HAL
open science

Le réseau Kondo à basse température: du liquide de Fermi au liquide de spin

Sebastien Burdin

To cite this version:

Sebastien Burdin. Le réseau Kondo à basse température: du liquide de Fermi au liquide de spin. Physique mathématique [math-ph]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2001. Français. NNT : . tel-00000901

HAL Id: tel-00000901

https://theses.hal.science/tel-00000901

Submitted on 5 Dec 2001

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Thèse,

présentée à l'Université Joseph Fourier-Grenoble 1

par

Sébastien BURDIN

pour obtenir le titre de

DOCTEUR EN SCIENCES
Spécialité : Physique

Le réseau Kondo à basse température : du liquide de Fermi au liquide de spin

soutenue le 23 Octobre 2001, devant le jury composé de

M.	B. Coqblin	Rapporteur
M.	J. Flouquet	Examinateur
M.	D.R. Grempel	Directeur
M.	M. Grilli	Rapporteur
Mme	C. Lacroix	Examinatrice
M.	P. Nozières	Président

Thèse préparée au sein de l'Institut Laue-Langevin et du Département de Recherche Fondamentale sur la Matière Condensée du CEA-Grenoble

5 novembre 2001

Table des matières

1 Introduction **3**
1.1 Introduction générale 3
1.2 Les fermions lourds 5
1.2.1 Présentation générale 5
1.2.2 Introduction phénoménologique 8
1.3 L'effet Kondo à une impureté 10
1.4 L'effet Kondo à plusieurs impuretés 12

I Réseau Kondo **13**

2 Motivation : étude du problème de l'épuisement **15**
2.1 Le principe d'épuisement de Nozières 15
2.1.1 Limite couplage fort 15
2.1.2 Une approche phénoménologique 16
2.1.3 Conclusion 18
2.2 Contexte expérimental 19
2.2.1 Expériences de photo-émission 19
2.2.2 UBe_{13} 19
2.2.3 $CePd_3$ 20
2.2.4 Série $YbXCu_4$ ($X = Ag,\ Cd,\ In,\ Mg,\ Tl,\ Zn$) 21
2.2.5 $CeIr_2Ge_2$ 23
2.2.6 Autres composés 23
2.2.7 Conclusion 24
2.3 Approches théoriques 25
2.3.1 Réseau et impuretés diluées 25
2.3.2 Travaux numériques 25
2.3.3 Conclusion 26

3 Formulation du problème **29**
3.1 Représentation fermionique des spins 29
3.2 Modèle Kondo à une impureté 31
3.2.1 Formulation du problème généralisé à $SU(N)$ 31

3.2.2 Equations de col dans la limite $N \to \infty$ 32
3.2.3 Une seule échelle énergétique : T_K 33
3.3 Réseau Kondo 34
3.4 Interprétation physique du paramètre r 36

4 Propriétés générales du modèle 39
4.1 Introduction de la densité d'états ρ_0 39
4.2 Spectre des quasiparticules 40
4.3 Ouverture d'un gap 41
4.4 Quasiparticules : bandes B^- et B^+ 43
4.5 Théorème de Luttinger 43
4.6 Masse effective 44

5 Résolution analytique des équations de col 45
5.1 Définition des échelles de température 45
5.2 Température de Kondo 46
5.2.1 Réseau et modèle à une impureté 46
5.2.2 Limite couplage faible 47
5.2.3 Limite couplage fort 48
5.3 Solution pour $\rho_0(\omega)$ constante et J_K quelconque 48
5.3.1 Solution exacte à $T = 0$ 48
5.3.2 Limite couplage faible 49
5.3.3 Limite couplage fort 49
5.3.4 Intérêt et limites d'une densité constante 50
5.4 Solution pour $\rho_0(\omega)$ quelconque et J_K faible 52
5.4.1 Solution pour $T = 0$ 52
5.4.2 Corrections d'ordre T^2 53

6 Quantités physiques 55
6.1 Paramètre r 55
6.2 Densités spectrales 57
6.2.1 Spectre des quasiparticules 57
6.2.2 Evolution des bords de bandes 58
6.2.3 Formation d'une sous-structure au niveau de Fermi 59
6.2.4 Bain électronique effectif 60
6.3 Interprétation de la température de Kondo 62
6.4 Occupation de la bande de conduction 63
6.5 Susceptibilité magnétique statique 64
6.5.1 Définition pour des spins de symétrie $SU(2)$: 64
6.5.2 Lien avec la susceptibilité magnétique dynamique 65
6.5.3 Généralisation à des spins de symétrie $SU(N)$ 65
6.6 Quantités thermodynamiques 68
6.6.1 Fonction de partition 68
6.6.2 Énergie libre 69

6.6.3 Entropie 69
6.6.4 Chaleur spécifique 69
6.7 Conductivité optique et pic de Drude 72

7 Conclusion 73

II Réseau Kondo et frustration magnétique 75

8 Motivation 77
8.1 Contexte expérimental : LiV_2O_4 77
8.2 Contexte théorique 79
8.2.1 Verre de spin longitudinal et interaction Kondo 79
8.2.2 Correlation magnétiques isotropes 83
8.2.3 Conclusion 85

9 Formulation du problème 87
9.1 Description schématique des systèmes concernés 87
9.2 Quel état fondamental pour les spins ? 91
9.3 Action effective pour un seul site 92
9.3.1 Principe de la méthode des répliques 92
9.3.2 Fonction de partition effective locale 93
9.3.3 Solution symétrique 96
9.4 Représentation fermionique des spins 97

10 Cas particulier : le modèle de Sachdev 101

11 Diagramme de phase de notre modèle 103
11.1 Température de Kondo généralisée 104
11.1.1 Limite réseau Kondo seul 104
11.1.2 Conséquences de la frustration 104
11.2 Caractérisation du point critique quantique (QCP) 105
11.3 Phase Kondo : liquide de Fermi 107
11.3.1 ρ_f ne diverge pas 107
11.3.2 Isolant ou conducteur ? 108
11.3.3 Théorème de Luttinger 109
11.3.4 densités d'états au niveau de Fermi 109
11.3.5 Taux de relaxation RMN 110
11.3.6 Quantités thermodynamiques 110
11.3.7 Conductivité optique et pic de Drude 113
11.3.8 Energies caractéristiques du liquide de Fermi 114

12 Proximité du point critique quantique **117**
12.1 Température de Kondo . . . 117
12.2 Ansatz pour la densité spectrale . . . 119
12.2.1 Point de départ . . . 119
12.2.2 Ansatz . . . 121
12.3 Echelle de cohérence du liquide de Fermi . . . 124
12.4 Quantités physiques . . . 125
12.4.1 Chaleur spécifique . . . 125
12.4.2 Dynamique de spin locale . . . 125
12.4.3 Propriétés de transport . . . 126
12.4.4 Conclusion . . . 126

13 Conclusion **127**

III Réseau Kondo et ordre magnétique **129**

14 Diagramme de phase magnétique du réseau Kondo **131**
14.1 Présentation . . . 131
14.1.1 Réseau Kondo seul . . . 132
14.1.2 Réseau Kondo et interaction magnétique supplémentaire . . . 134
14.1.3 Limite Kondo du modèle de Anderson périodique . . . 136
14.1.4 Conclusion . . . 137
14.2 Formulation du problème par DMFT . . . 138
14.3 Algorithme de Rozenberg . . . 139
14.4 Equivalence avec un modèle de Hubbard effectif . . . 141
14.4.1 Modèle de Hubbard en DMFT . . . 141
14.4.2 Modèle de Anderson périodique en DMFT . . . 141

15 Conclusion et perspectives **145**

A Solution des équations de col en couplage faible **149**
A.1 Développement de Taylor . . . 149
A.2 Limite $r/D \to 0$ . . . 150
A.3 Théorème de Luttinger $\Rightarrow r^2/(\mu + \lambda_0) = \mathcal{O}(D)$ . . . 150
A.4 Re-sommation de la série (lorsque $r/D \to 0$) . . . 151
A.4.1 Pour $n = 0$ . . . 152
A.4.2 Pour $n = 1$ . . . 152
A.4.3 Pour $n \geq 2$ . . . 152

B Température de Kondo dans la limite couplage faible **153**
B.1 Développement de Taylor pour la densité d'états : . . . 153
B.2 Limite $J_K \to 0$ . . . 154
B.2.1 Pour $p \geq 1$ . . . 154
B.2.2 Pour $p = 0$ . . . 154

B.3 Re-sommation de la série 154

C Équations de col ; limite $J_K \to 0$ première correction en température 155
C.1 Différenciation par rapport à T 155
C.2 Développement de type Sommerfeld 156
C.3 Limite couplage faible 157

D Susceptibilité magnétique statique 159

E Quantités thermodynamiques 161
E.1 Fonction de partition 161
E.2 Énergie libre 162
E.3 Entropie 163
E.3.1 Expression générale 163
E.3.2 Développement basse température 163

F Transformation de Hubbard-Stratonovitch (terme RKKY) 165

G Théorème de Luttinger 167
G.1 Trace de la fonction de Green 167
G.2 Fonctionnelle de Luttinger-Ward 168
G.3 Calcul du déphasage 168

H Echelle de cohérence près du point critique 171

Remerciements

Tout d'abord, je remercie très particulièrement Daniel Grempel, Tim Ziman, Bertrand Fourcade, Jacques Flouquet et Philippe Nozières, pour la confiance qu'ils m'ont accordée en me donnant la possibilité matérielle de réaliser cette "télé-thèse".

Daniel Grempel, pour avoir accepté de diriger mes travaux. Il a su se rendre constamment disponible, et s'adapter à divers moyens de communication (e-mail, fax, telephone, TGV...), me permettant de bénéficier à tout instant de son expérience et de ses qualités scientifiques et humaines.

Jacques Flouquet, chef du service SPSMS au département de recherche fondamentale sur la matière condensée du CEA-Grenoble, pour avoir soutenu financièrement la quasi-totalité de mes nombreux déplacements. De plus, son appui ne s'est pas limité aux problèmes d'ordre logistique puisqu'il a aussi suivi régulièrement l'évolution de mon travail, et accepté d'être examinateur de cette thèse.

Philippe Nozières, tout d'abord pour m'avoir accueilli au sein de son groupe, à l'Institut Laue-Langevin. Ensuite, pour avoir porté un intérêt particulier à mes travaux, m'accordant de nombreuses et passionnantes discussions, alimentées parfois par quelques "bons de commande". Aussi, je le remercie d'avoir promu, après les avoir longuement discutés, certains des résultats de cette thèse, qu'il a accepté de présider. Enfin, après avoir renforcé mon intérêt pour la recherche fondamentale, il m'a donné la possibilité matérielle de continuer à travailler dans ce domaine.

Tim Ziman, pour avoir accepté de me "parrainer" pendant toute la durée de cette thèse. Il a commencé par me trouver un bureau et un ordinateur, à l'ILL, puis m'a régulièrement conseillé, tant pour des questions scientifiques que d'ordre plus général. Outre ses compétences en tant que chercheur, j'admire sa générosité et son désintéressement.

Marco Grilli et Bernard Coqblin, pour avoir accepté la tâche ingrate d'être les rapporteurs de cette thèse.

Claudine Lacroix, pour avoir accepté d'en être examinatrice, ainsi que pour les discussions que nous avons pu avoir.

Antoine Georges, pour ses fructueuses collaborations et enseignements divers.

Marcelo Rozenberg, pour les connaissances scientifiques et culturelles qu'il m'a permis d'acquérir lors du séjour que j'ai effectué à l'université de Buenos Aires.

Andrès Jerez, dont je partage agréablement le bureau depuis déjà plus de trois années. Nos longues discussions concernent aussi bien l'effet Kondo, auquel il m'a initié, que les questions de politique, extérieure ou scientifique.

Les chercheurs et thésards, notamment Efim Kats, Paolo Carra, Fabio Pistolesi, Olivier Cépas, Peter Krüger, Chitra, Théo Costi, Mike Zhitomirsky, Olivier Plantevin, Dominique Bicout, Lamya, Nicola Manini, Ivan Marri, Rupert Mazzucco et Andrei Muratov, que je côtoie quotidiennement ou qui ont séjourné au sein des collèges théorie de l'ILL et de l'ESRF. Il y règne une atmosphère chaleureuse et scientifiquement très riche, stimulant nécessaire au bon déroulement d'une thèse.

Marielle Perrier et Michèle Dominiak, pour l'amabilité avec laquelle elles remplissent leurs fonctions de secrétaires du SPSMS.

Mireille Lavagna, pour ses enseignements et nombreux conseils, ainsi que les autres chercheurs et thésards du SPSMS.

Les visiteurs occasionnels, avec lesquels j'ai parfois échangé d'intéressantes discussions scientifiques, ainsi que les chercheurs et étudiants que j'ai pu rencontrer lors de mes propres déplacements, à l'université de Buenos Aires, aux SPEC, SPhT et SPCSI du CEA-Saclay, au LPTh de l'ENS Paris et aux universités de Jussieu et d'Orsay.

Mes amis, ma famille, et les thésards des laboratoires voisins, qui m'ont toujours apporté sympathie et soutien.

Chapitre 1

Introduction

1.1 Introduction générale

Cette thèse traite essentiellement des conséquences d'un épuisement électronique, du désordre et de la frustration magnétique, sur la formation d'un état quantique cohérent, le liquide de Fermi, stabilisé par effet Kondo dans des composés à base de terres rares appelés fermions lourds.

L'effet Kondo a été observé pour la première fois dans les années 30, lors de l'étude des propriétés de transport de certains métaux, comme par exemple la résistivité pour laquelle un minimum a été mesuré à une température finie[1]. Les travaux de Friedel [55, 56] dans les années 50, suivis par ceux de Anderson, ont permis à Kondo [92] d'expliquer cet effet en 64. Depuis sa découverte, il a donné naissance à des modèles extrêmement riches d'un point de vue théorique, et dont la pertinence expérimentale est continuellement démontrée par de nouvelles applications [185, 94].

La théorie de Landau des liquides de Fermi explique les propriétés universelles observées pour la plupart des métaux, qui se comportent à basse température comme des systèmes de fermions sans interaction. Une adaptation de cette théorie a permis à Nozières de fournir une description simple de l'effet Kondo [125].
Le thème est encore d'actualité, notamment dans le cadre de la physique des fermions lourds, qui ont permis récemment de mettre en évidence certaines anomalies de la théorie de Landau des liquides de Fermi [185].

Cependant, le champ d'applications du modèle Kondo, ou plus généralement des modèles d'impureté(s) magnétique(s) couvre aussi le domaine des nanotechnologies [124, 68, 94]. Ainsi, l'observation d'un "mirage quantique" par microscopie à effet tunnel [111] a récemment renforcé l'intérêt pour l'effet Kondo. Les îlots quantiques constituent un autre domaine d'applications expérimentales pour les modèles théoriques d'impuretés magnétiques [68, 69].

[1] Voir figure 1.3.

Cette thèse est organisée autour d'une problématique centrale : l'étude de l'effet Kondo lorsque les impuretés magnétiques sont en forte concentration. Le plan de ce manuscrit se compose d'un premier chapitre introductif, suivi de trois parties, décrivant successivement le problème de l'épuisement électronique, celui du désordre et de la frustration, et enfin, l'apparition d'un ordre magnétique à longue portée. Les deux premières parties ont conduit à deux publications, qui sont insérées après chaque chapitre introductif.

La première partie présente tout d'abord le problème de l'épuisement du réseau Kondo, sous des aspects théoriques et expérimentaux. Le problème est ensuite formulé dans le langage "grand-N", et il est résolu analytiquement dans la limite d'un couplage Kondo faible pour une densité d'états quelconque. Les courbes illustratives ont été obtenues par une résolution numérique des équations de col exprimées dans le formalisme de la théorie du champ dynamique moyen.

La deuxième partie traite simultanément le problème du désordre et de la frustration magnétique d'un réseau Kondo. Quelques aspects théoriques et expérimentaux sont présentés dans un premier chapitre, puis le problème est étudié analytiquement dans le formalisme de la théorie du champ dynamique moyen, en considérant la limite "grand-N". Cette approche s'inspire de travaux effectués par Parcollet, Georges, Sachdev et Ye [131, 153, 66, 67, 132]. Un point critique quantique (QCP) est obtenu, pour lequel la température de Kondo s'annule. Le système est étudié dans la phase Kondo, à l'approche de ce QCP.

La troisième partie concerne essentiellement une étude préliminaire, en collaboration avec Marcelo Rozenberg. Il porte sur la détermination du diagramme de phase magnétique du modèle de Anderson périodique dans la limite Kondo, en fonction du remplissage électronique. Je présente dans cette partie, quelques résultats connus. Puis, j'expose brièvement le principe de l'algorithme étudié, qui s'appuie sur une résolution numérique des équations de champ dynamique moyen, dans laquelle le problème local effectif est traité par diagonalisation exacte.

1.2 Les fermions lourds

1.2.1 Présentation générale

L'étude des systèmes fortement corrélés constitue une part importante de la physique de la matière condensée [45]. Les systèmes de type Kondo, ou matériaux à électrons lourds, qui ont été découverts à la fin des années soixante-dix, en sont un exemple. Les systèmes fortement corrélés incluent aussi les oxydes de métaux de transition[2] et les matériaux quasi-unidimensionels.

Les composés de type Kondo sont des matériaux électriquement conducteurs, qui se distinguent des métaux ordinaires essentiellement à basse température [130, 53]. En pratique, la chaleur spécifique et la susceptibilité magnétique à très basse température peuvent, pour ces composés, dépasser d'au moins deux ordres de grandeur les valeurs mesurées habituellement pour des métaux ordinaires. En général, les matériaux prototypes à électrons lourds sont les alliages constitués d'actinides ou de terres rares, contenant essentiellement des atomes U ou Ce, comme par exemple, $CeAl_3$, $CeCu_6$, UBe_{13} et UPt_3. Il existe toutefois des composés plus exotiques présentant des propriétés de basse température assez similaires, comme par exemple LiV_2O_4 (voir deuxième partie). De manière générale, ces systèmes se comportent à haute température comme des électrons de conduction de masse ordinaire interagissant faiblement avec les électrons des orbitales localisées f ; à basse température, les moments des électrons f se couplent fortement aux électrons de conduction, augmentant leur masse effective d'un ou deux ordres de grandeur.

Les matériaux à électrons lourds sont extrêmement intéressants, non seulement par rapport à leurs propriétés normales, mais aussi pour leurs propriétés magnétiques et supraconductrices, qui ne sont pas encore complètement comprises. En particulier, il a été remarqué que les systèmes à électrons lourds peuvent présenter à basse température un ordre magnétique ou supraconducteur, ce qui pourrait sembler à priori étonnant [130, 53]. Parmi ces composés, on peut citer par exemple U_2Zn_{17} et UCu_5, qui s'ordonnent antiferromagnétiquement pour des températures respectivement inférieures à 9.7 et $15K$. La découverte de la coexistence de la supraconductivité et de l'ordre magnétique dans certains de ces composés [113] a beaucoup attisé la curiosité des physiciens, tant du point de vue expérimental que théorique. Si URu_2Si_2 a été le premier métal à électrons lourds découvert pour lequel un état supraconducteur ($T_c = 1K$) se développe sur une matrice ordonnée antiferromagnétiquement ($T_N = 17.5K$), une recherche par la suite plus systématique [63, 64] a conduit à la découverte de la coexistence de l'antiferromagnétisme et de la supraconductivité dans UNi_2Al_3 ($T_N = 4.6K$ et $T_c = 1K$) et UPd_2Al_3 ($T_N = 14K$ et $T_c = 2K$). D'un autre coté, la supraconductivité se manifeste aussi seule dans des matériaux à électrons lourds plus conventionnels, tels que $CeCu_2Si_2$, UPt_3 ou UBe_{13}.

Une autre problématique importante des systèmes d'électrons fortement corrélés est de savoir si ces systèmes, dans leur état normal, peuvent être décrits par la quasi-universelle théorie des liquides de Fermi. Pour certains de ces composés à électrons lourds (ex UPt_3), cette théorie semble fournir une description en bon accord avec les données expérimentales de chaleur spécifique $C(T)$ et de résistivité $\rho(T)$, à condition de renormaliser fortement les

[2] ex : systèmes à électron d de type Mott-Hubbard, cuprates supraconducteurs à haute température.

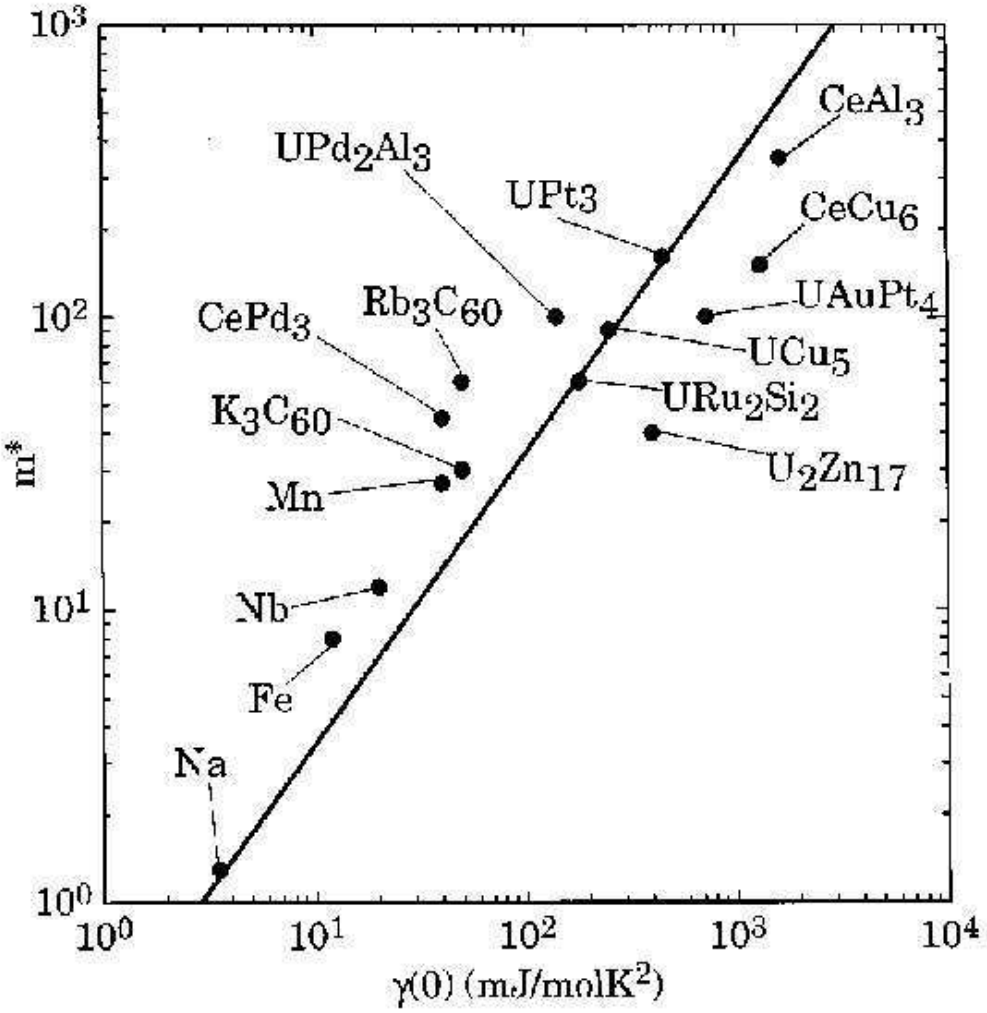


FIG. 1.1: Masse effective $m^\star$ en fonction du coefficient γ de la chaleur spécifique. $m^\star$ est évaluée à partir des données optiques utilisant des arguments de poids spectral. Figure d'après [45, 46].

La figure 1.1 présente la linéarité entre γ, le coefficient de la chaleur spécifique, et la masse effective obtenue à partir des données optiques utilisant des arguments de poids spectral.

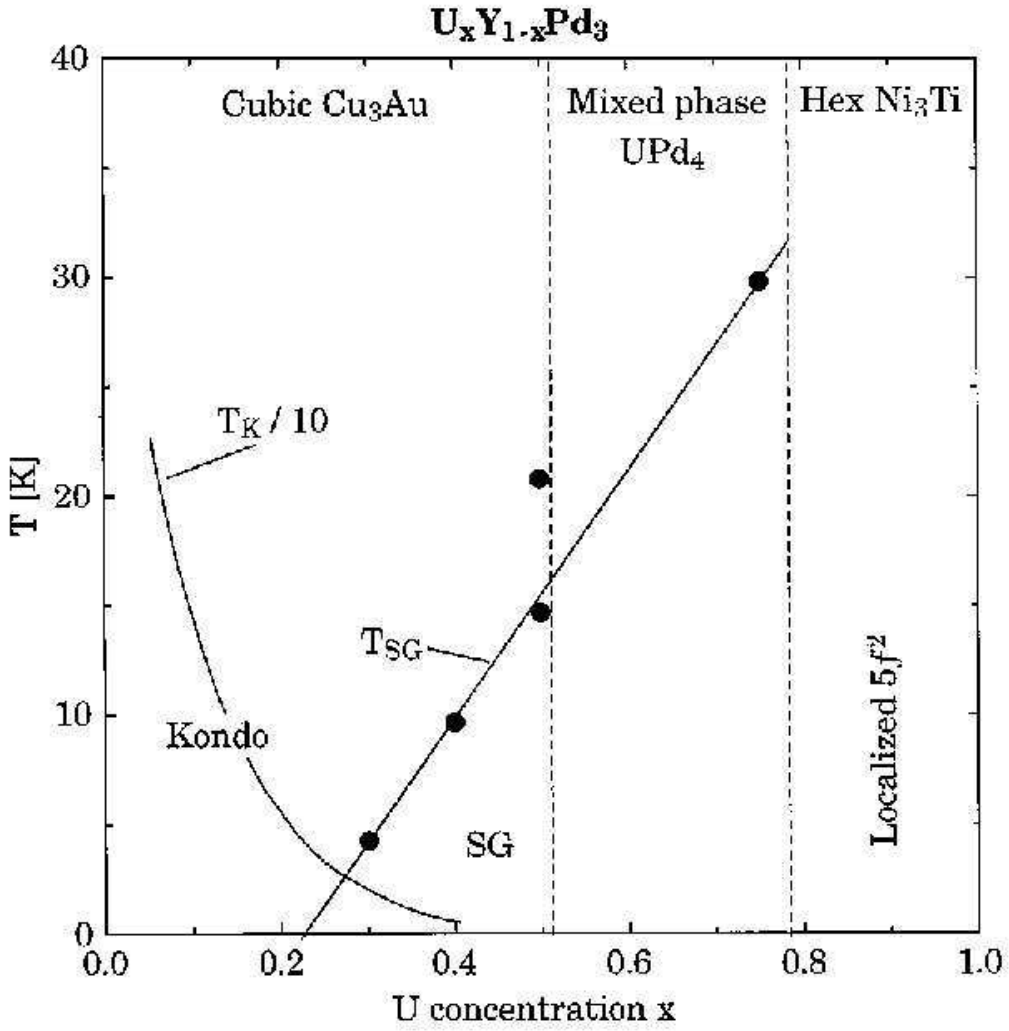


FIG. 1.2: Diagramme de phase du composé $U_xY_{1-x}Pd_3$ dans le plan $x-T$. Figure d'après [45, 114].

La figure 1.2 présente le diagramme de phase du composé $U_xY_{1-x}Pd_3$ dans le plan $x-T$. Pour une faible concentration en U, le système est à basse température dans un régime Kondo, alors qu'il choisit un état de verre de spin pour des concentrations x plus élevées.

paramètres du liquide de Fermi (masse effective multipliée par un facteur 100). Cependant, un travail expérimental plus récent [115, 114] a indiqué que les propriétés de certains alliages à électrons lourds très spécifiques peuvent difficilement être reliées aux comportement conventionnels des liquides de Fermi, sans pour autant correspondre à une violation triviale de cette théorie, qui serait due à un ordre magnétique ou supraconducteur. On désigne le comportement de tels matériaux par la traduction littérale “non liquide de Fermi” (NFL). Parmi ces alliages, on peut citer $UCu_{5-x}Pd_x$ pour $x = 1$ et 1.5, $CeCu_{5.9}Au_{0.1}$, $U_xY_{1-x}Pd_3$ ($x < 0.2$), $Th_{1-x}U_xRu2Si2$ ($x < 0.07$), et $U_{1-x}Th_xPd_2Al_3$ ($x > 0.4$), pour lesquels le comportement de NFL est associé à la proximité d'une transition de phase à température nulle, c'est à dire un point critique quantique (QCP).

Enfin, parmi les systèmes d'électrons fortement corrélés, plusieurs composés de terres rares sont des semi-conducteurs présentant un gap d'hybridation [2].

1.2.2 Introduction phénoménologique

Les matériaux à électrons lourds peuvent être considérés comme des métaux, contenant des électrons délocalisés mais fortement corrélés. Afin de comprendre l'origine physique de ces fortes corrélations, il est tout d'abord utile de comparer cette nouvelle catégorie de métaux à électrons lourds avec les métaux plus conventionnels ou ordinaires [130, 53]. Les propriétés caractéristiques habituellement observées pour les métaux sont une augmentation de la conductivité lorsque la température décroît, une susceptibilité magnétique faible et indépendante de la température (i.e. paramagnétisme de Pauli), et une dépendance linéaire en température pour la chaleur spécifique $C(T)$ à basse température (i.e. pour $T << E_F, \Theta_D$, $C(T) \propto T$, où E_F est l'énergie de Fermi et Θ_D est l'énergie de Debye).

Pour les systèmes à électrons lourds, la résistivité $\rho(T)$ correspond bien à cette description dans un régime de hautes températures, mais pour certains composés, il semblerait qu'elle augmente lorsque la température décroît jusqu'à une température caractéristique T_{max} relativement faible. En dessous de T_{max}, on observe à nouveau une forte décroissance de la résistivité lorsque la température décroît, jusqu'à ce que, à très basse température, on retrouve une loi en $\rho(T) \sim \rho_0 + AT^2$, où ρ_0 est la résistivité résiduelle. Cette dépendance en T^2 pour $\rho(T)$ à basse température est un critère généralement utilisé pour identifier un comportement de liquide de Fermi.
De façon analogue, la susceptibilité magnétique $\chi(T)$ suit une loi de Curie-Weiss à haute température, caractéristique de moments magnétiques libres, et sature, voire atteint un maximum près de T_{max}, pour entrer, à très basse température, dans un régime en $\chi(T) = \chi_0 + BT^2$, caractéristique des liquides de Fermi.
De la même manière, le comportement à basse température de la chaleur spécifique des systèmes d'électrons lourds, bien que non universel au voisinage de T_{max}, devient, à très basse température, linéaire en T. Le coefficient $\gamma = C(T)/T$ augmente considérablement en dessous de T_{max}, jusqu'à atteindre des valeurs de l'ordre de 1 J/mol K^2 (au lieu de quelques mJ/mol K^2 pour des métaux ordinaires tels que Cu).

Ces comportements à très basse température suivent donc des lois universelles, à savoir une résistivité, une susceptibilité magnétique et un coefficient γ pour la chaleur spécifique constants à $T = 0$, les deux premières quantités s'écartant de leurs valeurs limites avec une

loi en T^2, la dernière avec une déviation logarithmique. Cette découverte est extrêmement intéressante puisqu'elle établit une correspondance parfaite entre les excitations de basse énergie des systèmes d'électrons lourds fortement corrélés et celles d'un gaz d'électrons presque libres, à condition de renormaliser les paramètres de ce dernier (ex : la masse ou le moment magnétique des électrons). Le nom "électrons lourds", ou "fermions lourds" provient ainsi du fait qu'une valeur élevée du coefficient γ de la chaleur spécifique peut être déduite du modèle en remplaçant les électrons libres de masse m par des quasiparticules de masse effective $m^\star$, typiquement cent fois plus élevée.

Cette considérable augmentation de la masse effective est loin d'être triviale, et elle doit être corrélée à la présence, commune à tous les systèmes d'électrons lourds, d'orbitales f localisées[3]. Les "électrons lourds" peuvent être considérés comme résultant de l'hybridation entre les orbitales localisées $4f$ ou $5f$ et les états des électrons de la bande de conduction (d ou s), près du niveau de Fermi [23, 104, 144, 60]. Le résultat final est une renormalisation de la surface de Fermi, et une importante augmentation de la masse effective des électrons de la bande libre au niveau de Fermi.

[3] LiV_2O_4 transgresse cette règle, les orbitales d des atomes V jouant dans ce cas le rôle des orbitales f des atomes des actinides ou des terres rares.

1.3 L'effet Kondo à une impureté

Le Hamiltonien Kondo [56, 182] modélise l'interaction entre une impureté magnétique décrite par un spin $\vec{S}$, et une bande d'électrons de conduction :

$$H = \sum_{\vec{k}} \sum_{\alpha=\uparrow,\downarrow} \epsilon_{\vec{k}} c^{\dagger}_{\vec{k}\alpha} c_{\vec{k}\alpha} + J_K \vec{s}_0 . \vec{S} \tag{1.1}$$

Dans cette expression, $c^{\dagger}_{\vec{k}\alpha}$ et $c_{\vec{k}\alpha}$ désignent les opérateurs de création et d'anihilation d'un électron de conduction de spin α, d'impulsion $\vec{k}$, et d'énergie $\epsilon_{\vec{k}}$. Le premier terme décrit l'énergie d'un système d'électrons libres sur un réseau périodique. Le deuxième représente l'énergie de l'interaction Kondo, où la densité locale de spin électronique $\vec{s}_0 = \sum_{\alpha,\beta} c^{\dagger}_{0\alpha} \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{0\beta}$ est couplée antiferromagnétiquement avec le spin de l'impureté.

L'interaction Kondo génère des interversions de spin locales entre les électrons de la bande de conduction et le moment magnétique de l'impureté. Cet effet induit de fortes corrélations entre les électrons, et conduit à une augmentation de la résistivité lorsque la température diminue [92] (voir figure 1.3). Lorsque le couplage Kondo J_K est beaucoup plus élevé que toutes les énergies $\epsilon_{\vec{k}}$, l'état fondamental du système est caractérisé par la formation d'un état singulet local entre le spin des électrons de la bande de conduction et celui de l'impureté.

A haute température, lorsque le couplage Kondo est faible devant les énergies caractéristiques de la bande de conduction, J_K peut être traité comme une perturbation. Cependant, le développement perturbatif obtenu par Kondo fournit une divergence logarithmique non physique de la résistivité à température nulle. Les travaux de Anderson, puis ceux de Wilson [7, 8, 180], ont mis en évidence l'apparition dynamique d'une échelle de température, T_K, marquant un crossover vers un régime de couplage fort. Le système est alors caractérisé, à basse température, par la formation du singulet Kondo. La température de Kondo est reliée à la densité d'états $\rho_0(\epsilon_F)$ au niveau de Fermi ϵ_F par la relation $T_K \propto \epsilon_F \exp\left(-1/\rho_0(\epsilon_F) J_K\right)$. Le singulet Kondo est vu par les autres électrons comme un potentiel effectif local, et le système a été décrit par Nozières [125] en termes de liquide de Fermi local.

D'autres modèles assez proches du modèle Kondo permettent aussi de tenir compte des corrélations locales entre une impureté magnétique et une bande de conduction. Ainsi, le modèle Kondo est en réalité un cas particulier du modèle de Anderson [6], qui décrit l'hybridation, entre une bande d'électrons de conduction et une orbitale localisée doublement dégénérée, dont l'occupation est contrôlée par la répulsion coulombienne et le niveau énergétique de l'orbitale. L'équivalence avec le modèle Kondo est obtenue par la transformation de Schrieffer-Wolff [157], qui consiste à supposer infinies la répulsion coulombienne et le niveau énergétique de l'orbitale localisée, de sorte que l'occupation de cette dernière est constamment fixée à un électron, assimilé au moment magnétique local du modèle Kondo[4]. Le modèle de Coqblin-Schrieffer [38] fournit une généralisation de ces modèles, permettant de tenir compte de la forte dégénérescence orbitale de certaines impuretés[5].

[4] Voir en troisième partie.

[5] Les spécifi cités et autres généralisations de ces différents modèles à une impureté sont amplement détaillées dans le livre de Hewson, 'The Kondo Problem to Heavy Fermion' [74], ainsi que dans les articles originaux auquel il se réfère.

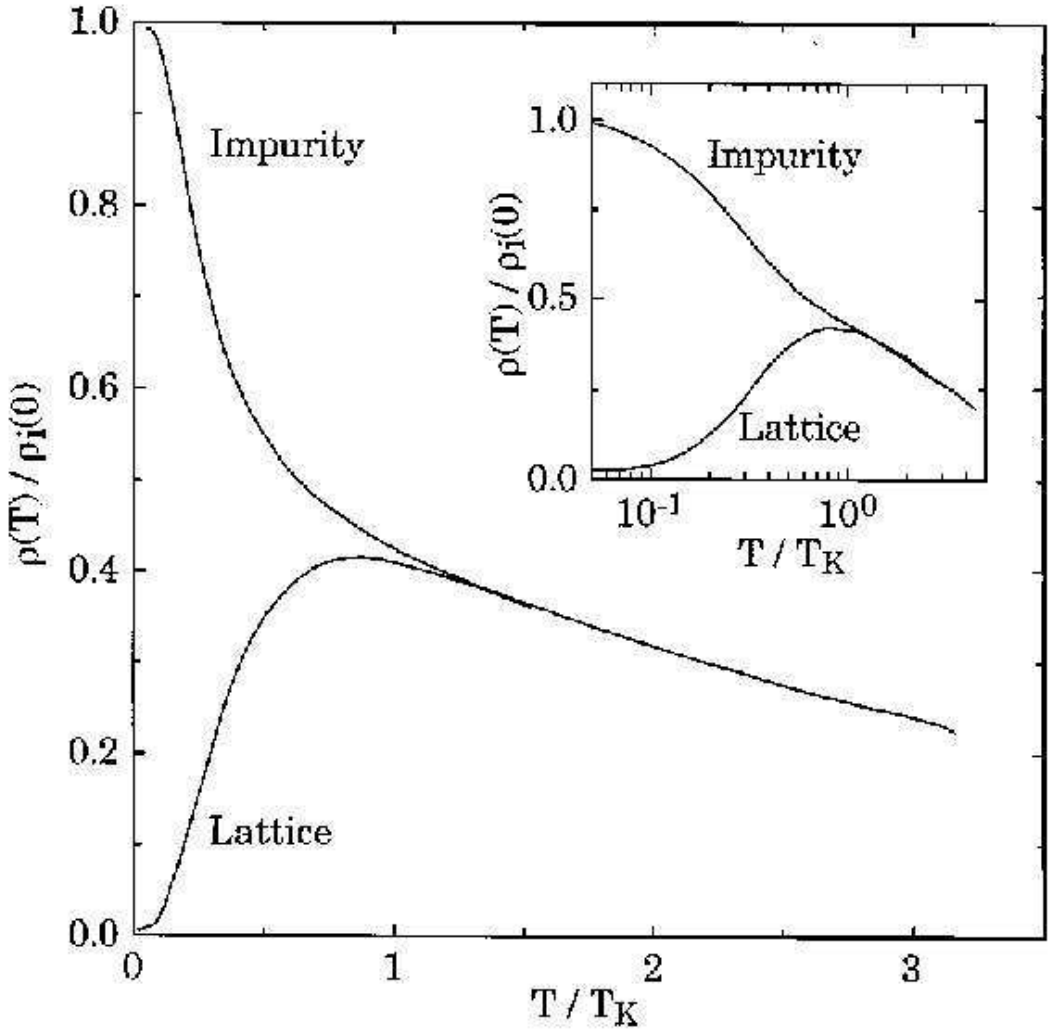


FIG. 1.3: Résistivité $\rho(T)$ du modèle de Anderson périodique de dégénérescence 6. La résistivité est mesurée en unité de $\rho_i(0)$, résistivité par ion, à $T = 0$, dans la limite diluée ; la dépendance en température de la résistivité de l'impureté est présentée par comparaison (courbe du haut). En incrustation, ces même quantités sont présentées sur un diagramme logarithmique, mettant en évidence le comportement en $\ln(T/T_K)$ de la résistivité de l'impureté. Figure d'après [45, 42].

1.4 L'effet Kondo à plusieurs impuretés

Les systèmes Kondo sont généralement constitués de plusieurs impuretés magnétiques. Lorsque celles-ci sont isolées, les électrons de conduction forment avec chacune un état singulet, et constituent des nuages Kondo indépendants. Cette situation caractérise des systèmes pour lesquels les atomes magnétiques sont en faible concentration[6]. Lorsque la densité d'impuretés augmente, des corrélations peuvent apparaitre entre les différents systèmes Kondo locaux.

Un premier exemple, relevé par Doniach [47], est l'apparition de corrélations magnétiques entre les impuretés, portées par les électrons de conduction. A l'ordre le plus bas d'un développement perturbatif, ces corrélations sont caractérisables par l'échelle d'énergie $T_{RKKY} \propto \rho_0(\epsilon_F)J_K^2$. Elles sont appelées interactions de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY), en raison de leur similitude avec les interactions entre les spins des noyaux atomiques. En comparant cette énergie à T_K, Doniach a prédit l'existence d'une transition depuis un état de type Kondo vers un état ordonné magnétiquement lorsque $\rho_0 J_K$ diminue. Cet effet permet d'expliquer l'apparition d'un ordre antiferromagnétique[7] pour les composés à fermions lourds. L'apparition de l'ordre magnétique sur un réseau de type Kondo est évoquée dans la troisième partie.

Certains systèmes, désordonnés ou à géométrie fortement frustrée, ne peuvent pas présenter d'ordre antiferromagnétique à longue distance. Dans ce cas, si l'énergie T_{RKKY} est supérieure à T_K, les moments magnétiques peuvent s'ordonner dans un état de verre de spin, ou fluctuer avec de fortes corrélations locales, dans un état appelé liquide de spin. Un exemple de transition entre état Kondo et liquide de spin est présenté en deuxième partie.

Un autre exemple de corrélation est le problème de l'épuisement électronique, soulevé par Nozières [126, 127]. Le rayon des nuages électroniques participant à l'écrantage Kondo des différentes impuretés est de l'ordre de $\xi \approx v_F/(k_B T_K)$, où v_F est la vitesse des électrons de conduction au niveau de Fermi. Lorsque la distance entre les moments magnétiques est inférieure à la taille ξ de chaque nuage, l'effet Kondo n'est plus local, et Nozières a suggéré qu'il pouvait conduire à une forte diminution de l'énergie de cohérence du liquide de Fermi. Cette diminution devrait être d'autant plus importante que le nombre d'électrons de conduction est faible devant le nombre de moments magnétiques. Parallèlement, le rapport T_{RKKY}/T_K augmente lorsque la concentration électronique diminue, et le système pourrait aussi préférer s'ordonner magnétiquement. Cependant, Nozières a montré qu'une large gamme de paramètres existait, pour laquelle les conséquences de l'épuisement peuvent être observées. Quelques aspects de ce problème sont exposés en première partie.

[6] C'est le cas, par exemple, de $La_xCe_{1-x}Ir_2Ge_2$ lorsque $x \sim 1$ [109].

[7] En pratique, le signe de T_{RKKY} oscille rapidement avec la distance et on peut envisager plusieurs types d'ordres magnétiques.

Première partie

Réseau Kondo

Chapitre 2

Motivation : étude du problème de l'épuisement

2.1 Le principe d'épuisement de Nozières

Le problème de l'épuisement électronique d'un réseau Kondo, ou "exhaustion", a été formulé en 1985 par Nozières [126]. Jusqu'alors, la principale distinction habituellement considérée entre un modèle à une impureté de type Kondo et un modèle de moments magnétiques sur réseau était la possibilité, pour le réseau, de s'ordonner magnétiquement (voir troisième partie). Le problème soulevé par Nozières repose sur une question candide : comment, dans un réseau, des électrons de conduction peuvent-ils parvenir à écranter, par effet Kondo, des moments magnétiques locaux surnuméraires ? Dans une telle situation, l'effet d'écran magnétique serait probablement collectif [127, 128].

2.1.1 Limite couplage fort

Nozières et Lacroix se sont dans un premier temps intéressés à la limite d'un couplage Kondo J_K beaucoup plus élevé que l'énergie d'échange t de la bande de conduction [126, 96]. Bien que non physique, (la transformation de Schrieffer-Wolff n'étant valide que dans la limite couplage faible), cette limite permet de donner une image simple du problème de l'épuisement. En effet, dans ce cas, aux températures très inférieures à la température de Kondo $T_K \sim J_K$, l'état du système est constitué de singulets Kondo et de spins célibataires. La structure interne des singulets n'est accessible qu'à des hautes énergies de l'ordre de T_K, et on peut négliger ces degrés de liberté internes. Les seules excitations du système proviennent de la possibilité, pour un électron écranteur, de quitter son spin pour aller fonder un singulet avec un spin voisin qui serait célibataire. Si on note N_{imp} le nombre total d'impuretés, et N_{eff} le nombre d'électrons de conduction contribuant à l'écrantage, le système se comporte comme $N_{imp} - N_{eff}$ fermions (les spins célibataires), avec spin mais avec une contrainte interdisant la double occupation. Ce système peut alors être décrit par un modèle de Hubbard effectif, de répulsion coulombienne U infinie[1]. L'énergie d'échange de ce modèle effectif est donnée par $t_{eff} = -t$,

[1] L'équivalence formelle est démontrée par Lacroix [96].

le changement de signe provenant du fait que les spins célibataires (comme les trous) se déplacent dans le sens inverse des électrons. si on considère que le réseau contient un moment magnétique (écranté ou non) par maille élémentaire, le signe de t_{eff} implique que la taille de la surface de Fermi correspondant à ces $N_{imp} - N_{eff}$ fermions est exactement identique à celle de $N_{imp} + N_{eff}$ particules[2]. Dans la limite de l'épuisement $N_{eff} << N_{imp}$, le système correspond à un modèle de Hubbard faiblement dopé avec $U = \infty$. Alors, en utilisant l'estimation dérivée par Brinkman et Rice pour un isolant de Mott faiblement dopé [25], on obtient une échelle de cohérence $T^\star \sim tN_{eff}/N_{imp}$. La valeur ainsi obtenue est très nettement inférieure à la température de Kondo $T_K \sim J_K$, caractéristique de la formation des singulets.

2.1.2 Une approche phénoménologique

Afin de comprendre comment le résultat obtenu en couplage fort se généralise au couplage faible, Nozières a construit un modèle phénoménologique fournissant une estimation de l'échelle de cohérence du liquide de Fermi, qui s'avère être d'un ordre de grandeur plus faible que la température de Kondo [127, 128].

Le point de départ de cette approche repose sur le fait que l'entropie d'un liquide de Fermi s'annule à $T = 0$. En couplage faible, les degrés de liberté magnétiques dominent complètement l'entropie de la phase Kondo. L'état cohérent caractéristique du liquide de Fermi est donc atteint lorsque les électrons de conduction sont parvenus à geler l'entropie des impuretés surnuméraires.

L'échelle de cohérence $T^\star$ du liquide de Fermi peut ainsi être définie en couplage faible comme étant la température à laquelle les électrons de conduction parviennent tout juste à geler la contribution magnétique à l'entropie. Le principe d'incertitude de Heisenberg[3] autorise des fluctuations quantiques du système pendant un temps $\beta = 1/T$. La température de cohérence $T^\star$ correspond ainsi au temps de cohérence $\beta^\star$ exactement nécessaire à chaque moment local pour visiter toutes les configurations.

Afin d'évaluer $T^\star$, plusieurs effets sont alors à prendre en compte.
D'une part, le processus d'écrantage peut être traité de manière semi-classique en considérant que lorsqu'un électron de conduction diffuse sur un moment magnétique local, leurs spins respectifs précessent l'un autour de l'autre avec une fréquence de Larmor donnée par la température de Kondo[4] $\omega_L = T_K$.
D'autre part, lorsque les moments magnétiques à écranter sont plus nombreux que les électrons écranteurs, ces derniers ne peuvent précesser en permanence autour d'un même moment local, et on peut estimer que pour une température $T = 1/\beta$, un moment local donné précesse avec chaque électron pendant un temps τ_h à déterminer.

[2]Ce résultat, dérivé par Nozières [127], permet d'obtenir de manière simple un élargissement de la surface de Fermi. Le nombre total de quasiparticules ainsi obtenu correspond au nombre total d'électrons auquel s'ajoute le nombre total de spins. Le théorème de Luttinger est ainsi vérifié "à la main" pour un modèle Kondo, sans avoir introduit de fluctuations de charge fictives pour les spins.

[3]Je simplifie en prenant $\hbar = 1$.

[4]si on suppose que l'effet Kondo pour un réseau se renormalise vers un point fixe de couplage fort décrit par la même échelle énergétique qu'un modèle à une seule impureté, alors cette hypothèse semble raisonnable.

Deux questions se posent alors. La première, qui sera discutée un peu plus loin, porte sur la valeur de la durée de vie effective τ_h des électrons renormalisés.
La seconde est la suivante : en supposant que le spin des électrons écranteurs successifs précesse avec celui d'un moment local à la fréquence $\omega_L = T_K$, combien de temps faut-il pour que le moment local ait visité toutes les directions possibles ? Après chaque visite d'un électron écranteur, le spin de l'impureté a précessé d'un angle $\theta = \omega_L \tau_h$. Tout dépend alors de la cohérence ou non entre les différents électrons participant successivement à l'écrantage d'une même impureté.
si on suppose que les électrons sont parfaitement cohérents, alors, chaque moment magnétique effectue un tour complet sur lui-même après le passage de $2\pi/\theta$ électrons, ce qui nécessite un temps $\tau^\star_{anis.} \sim \tau_h 2\pi/\theta \sim 1/\omega_L$. Cependant, dans une telle situation, la cohérence des électrons ne permet pas au moment magnétique de visiter toutes les directions, et il est probable que cette situation décrive un état anisotrope en spin, c'est à dire un état magnétique.
A l'inverse, si on suppose que les électrons successifs sont entièrement décorrélés, le problème se réduit à l'étude d'un mouvement Brownien sur une sphère, et le moment magnétique visite l'ensemble des configurations qui lui sont accessibles au bout d'un nombre de passages proportionnel à $1/\theta^2$, ce qui nécessite un temps $\tau^\star_{Brown.} \sim \tau_h/\theta^2 \sim 1/(\tau_h \omega_L^2)$.
Il semble raisonnable de supposer que $\tau^\star_{Brown.}$ fournit une borne inférieure pour la durée de vie des quasiparticules $\beta^\star$, et Nozières en déduit ainsi une estimation maximale de l'énergie de cohérence :

$$T^\star < \tau_h T_K^2 \tag{2.1}$$

Il reste encore à évaluer le temps de vie τ_h. En première approximation, Nozières a supposé que la densité d'états ρ au niveau de Fermi était préservée et qu'elle était proportionnelle à τ_h [127]. Cette hypothèse implique la relation :

$$T^\star < \rho T_K^2 << T_K \tag{2.2}$$

Cette relation est remarquable puisqu'elle prévoit une réduction considérable de l'échelle de cohérence du liquide de Fermi par rapport à la température de Kondo.

Cependant, quelques objections peuvent être apportées. La première porte sur l'estimation de τ_h. En effet, il semble assez surprenant que le temps de vie des électrons de conduction ne soit pas renormalisé par l'interaction Kondo. Notamment, l'élargissement de la surface de Fermi, au moins présent en couplage fort, et observé en couplage faible (voir figure 6.12), suggère de décrire les spins non pas comme des objets rigides visités occasionnellement par des électrons non renormalisé, mais comme des composantes à part entière des états de quasiparticules. La deuxième concerne la valeur de ω_L. En couplage fort, la formation du liquide de Fermi s'accompagne d'une augmentation de volume pour la surface de Fermi des quasiparticules. Dans ce cas, on peut imaginer que ce phénomène, qui n'est pas présent pour une modèle à une seule impureté, soit associé à une échelle d'énergie supérieure à l'énergie de Kondo T_K [128].

2.1.3 Conclusion

Que le couplage Kondo soit fort ou faible, il semblerait que contrairement au cas d'un modèle à une seule impureté, la température de cohérence $T^\star$ du réseau Kondo, caractéristique de la formation des quasiparticules cohérentes constituant le liquide de Fermi, soit beaucoup plus faible que la température de Kondo T_K, caractéristique de la formation de singulets locaux.

Si l'apparition d'un ordre magnétique est simple à mettre en évidence expérimentalement, les effets liés au problème de l'épuisement sont un peu moins limpides à observer, la différence d'échelles entre $T^\star$ et T_K ne devenant très nette que dans la limite d'un faible nombre de porteurs, pour laquelle, justement, un ordre magnétique est prédit. Des réserves peuvent ainsi être légitimement émises au sujet de la pertinence expérimentale de ce résultat. Cependant, à ma connaissance, peu de travaux expérimentaux ont pour le moment essayé de mettre en évidence cet effet. Une étude systématique des composés à fermions lourds serait très probablement fructueuse, mais celle-ci représenterait à elle seule un travail de thèse à part entière.

En pratique, le principe d'épuisement implique une différence cruciale entre les systèmes d'impuretés magnétiques denses et les systèmes dilués. Alors que les propriétés physiques des systèmes dilués sont universelles en dessous de T_K, celles d'un réseau d'impuretés ne le deviennent qu'en dessous d'une température $T^\star$ plus faible. Une telle "non-universalité" du régime intermédiaire entre $T^\star$ et T_K est observée pour de nombreux systèmes denses, mais elle peut, selon les cas, avoir une origine différente.

Dans la section suivante, j'expose quelques résultats expérimentaux qui sembleraient mettre en évidence un tel type de comportement, dont l'origine pourrait être attribuée au principe d'épuisement de Nozières. Ils pourraient servir de point de départ à une étude plus systématique.

2.2 Contexte expérimental

2.2.1 Expériences de photo-émission

Les expériences de photo-émission réalisées sur divers composés à fermions lourds pourraient être interprétées comme une mise en évidence d'un effet lié à l'épuisement électronique [168]. Une longue polémique sur ce sujet a animé les expérimentateurs, dont un point de vue est donné par Malterre *et al.* [110]. D'une part, les données spectroscopiques obtenues par les groupes de Bell Labs et de Neuchatel, à partir d'échantillons poly-cristallins, sembleraient être en accord avec les prédictions des modèles à une seule impureté [172, 62]. D'autre part, certains résultats obtenus par le groupe de Los Alamos, à partir d'échantillons élaborés sur place, ont révélé de nombreuses inconsistences avec les prédictions des modèles à une impureté, notamment une diminution de l'intensité, une dépendance en température beaucoup plus faible, et une dispersion de la résonance Kondo [83]. Il semblerait que le modèle de Anderson à une impureté soit généralement bien apprécié des expérimentateurs pour son aptitude à décrire le comportement d'un fermion lourd à haute température tout en conduisant à un régime de liquide de Fermi à basse température. Dans de nombreux cas pour lesquels la température de Kondo est du même ordre que l'énergie de cohérence, cette description est suffisante. Cependant, lorsqu'un écart notable apparaît entre ces deux températures, le modèle à une impureté ne correspond plus, et il faut comprendre l'origine de ce régime intermédiaire. Le principe d'épuisement devrait dans certains cas permettre de justifier la non validité des modèles simples à une impureté. Mais pour bien comprendre les résultats de photo-émission, il faudrait étudier au cas par cas l'ensemble des propriétés physiques obtenues pour chacun des composés étudiés. Ce travail sort du cadre de cette thèse, d'autant plus que certains résultats de photo-émission sembleraient être fortement perturbés par des effets de surface [110].

2.2.2 UBe_{13}

Il a été suggéré que certaines propriétés du composé UBe_{13} puissent être associées à des effets de réseau [43, 139]. Ce composé est connu depuis longtemps comme supraconducteur à pression ambiante [43], avec une transition vers un état normal sous l'effet de la pression [135, 171, 117, 17, 19] ou d'un champ magnétique [19].

A haute température, ce composé se comporte comme un système de moments libres, et les corrélations apparaissent pour une température de Kondo de l'ordre de $10K$. Le modèle de Anderson à une impureté ne permet pas de justifier certains comportements, tels que, par exemple, un coefficient de la chaleur spécifique $C(T)/T$ plus sensible que la susceptibilité magnétique $\chi(T)$ par rapport à la pression exercée [117]. Cox a suggéré qu'un modèle mettant en jeu un effet Kondo multipolaire pourrait être mieux adapté [41]. De plus, il semblerait que le comportement des propriétés de ce composé soient de type NFL sur une large gamme de températures [43].

Cependant, Ramirez *et al.* ont prouvé que les mesures de susceptibilité effectuées sur ce composé étaient incompatibles avec l'hypothèse d'un effet Kondo quadrupolaire à une impureté [139]. Une alternative qu'ils ont proposée serait celle d'un effet collectif, basée sur le fait que UBe_{13} correspond à un réseau dense d'atomes U magnétiques. De plus, certaines

interprétations des résultats expérimentaux sembleraient indiquer qu'un régime cohérent de liquide de Fermi puisse être observé, conduisant à une masse effective exceptionnellement élevée pour un supraconducteur. La température de cohérence d'apparition de ce régime est supérieure à la température d'apparition de la supraconductivité, et, bien sûr, inférieure à la température de Kondo.

Parallèlement, Koga et Cox ont rajouté des degrés de liberté à leur modèle quadrupolaire à une impureté en s'interessant à un couplage multi-canal [91], mais il semblerait que l'étude d'un modèle sur réseau s'avère indispensable pour ce type de composé à forte concentration d'atomes magnétiques.

Un point important observé expérimentalement pour UBe_{13} provient de la sensibilité des quantités physiques par rapport à la pression, faible pour la susceptibilité magnétique et forte pour le coefficient de la chaleur spécifique $\gamma = C(T)/T$.
Supposons que ce composé puisse être décrit simplement par un réseau Kondo à couplage antiferromagnétique. La valeur mesurée pour la température de Kondo ($10K$) est faible. Dans ce cas, l'entropie du système est essentiellement d'origine magnétique. Alors, aucune différence de comportement ne peut ressortir du modèle étudié dans la première partie de ce manuscrit (réseau Kondo sans corrélation magnétique), le rapport de Wilson valant 1 indépendamment du remplissage électronique.
Par contre, avec un modèle tel que celui étudié en deuxième partie, le système possède des modes supplémentaires d'excitations incohérentes qui pourraient justifier une différence de comportement entre entropie et susceptibilité magnétique, particulièrement dans la proximité d'une transition quantique.

2.2.3 $CePd_3$

Le composé $CePd_3$ a été signalé par Lawrence comme candidat potentiel à l'application du principe d'épuisement [100]. La susceptibilité magnétique de nombreux matériaux de valence intermédiaires varie avec la température comme une fonction universelle de la température adimentionnée T/T_K, où T_K est l'énergie de Kondo, ce qui est en parfait accord avec les modèles à une impureté. Un exemple manquant à cette règle est le composé $CePd_3$, pour lequel Lawrence, en 1985, a montré que l'échelle de cohérence du liquide de Fermi est de $40 - 50K$ alors que la température de Kondo est de l'ordre de quelques centaines de Kelvin [101]. Les arguments qu'il développe sont les suivant [100] :
1) En dessous de $40K$, la résistivité répond très différemment à la pression en dessous de $40K$ que à plus haute température.
2) Les mesures de résistivité à basse température suggèrent que l'échelle de cohérence soit de $40K$.
3) La susceptibilité présente un pic additionnel à basse température dont la dépendance en température suggère que l'échelle de température la plus basse pour le système soit de $40K$.
4) La conductivité optique présente une réponse de Drude renormalisée pour laquelle la masse effective devient importante en dessous de $40 - 50K$.
L'estimation de la température de cohérence semble confirmée par les mesures de susceptibilité dynamique effectuées par Shapiro *et al.*, qui ne peuvent pas être reproduites par un unique pic à l'énergie Kondo, mais nécessitent une composante quasi-élastique de faible énergie dont

la largeur est de l'ordre de $40K$ [162].
Dans un premier temps, Lawrence avait justifié ce résultat par la forte dégénérescence des orbitales [101]. Il remarque cependant qu'un aspect important de $CePd_3$ est le fait que la densité d'électrons de conduction est particuliairement faible par rapport aux autres composés de valence intermédiaire [100].

Bien sûr, les composés de valence intermédiaire, pour lesquels la charge des orbitales localisées peut fluctuer, ne correspondent pas à de véritables systèmes Kondo, pour lesquels les orbitales locales sont représentées par un moment magnétique (voir figure 14.5). Il est possible que les fluctuations de charges puissent accentuer la stabilité du liquide de Fermi, et on peut se demander si le principe d'épuisement est aussi applicable à ce type de composé. A priori, il n'y a aucune raison pour que les fluctuations de charge se soumettent à une quelconque loi d'universalité qui imposerait d'avoir une température de Kondo égale à la température de cohérence. Il semble donc raisonnable d'invoquer le principe d'épuisement pour $CePd_3$, bien qu'il ne s'agisse pas d'un véritable système Kondo.

2.2.4 Série $YbXCu_4$ ($X = Ag,\ Cd,\ In,\ Mg,\ Tl,\ Zn$)

Lawrence [100] suggère aussi de s'intéresser à la série des composés de valence intermédiaire $YbXCu_4$ ($X = Ag,\ Cd,\ In,\ Mg,\ Tl,\ Zn$).

Une comparaison des résultats de mesures de la susceptibilité magnétique $\chi(T)$, du coefficient linéaire de la chaleur spécifique $\gamma(T) = C(T)/T$, et du nombre d'occupation $n_f(T)$ de l'orbitale $4f$ des Yb, par rapport aux prédictions du modèle de Anderson à une impureté obtenues par une approche NCA a été effectuée par Lawrence *et al.* dans [103]. Il ont observé que le "crossover" entre l'état de liquide de Fermi à basse température et l'état de moments locaux libres à haute température est plus lent dans ces composés que ce que prédit le modèle à une seule impureté.

Le tableau 2.1 rassemble certains des résultats obtenus par Lawrence *et al.* [103]. Afin de comparer l'échelle de cohérence à la température de Kondo, j'ai calculé $\gamma T_K/n_f$ et $T_K\chi_0/n_f$. J'ai divisé ces quantités par n_f afin de me ramener à un modèle effectif équivalent à 1 moment magnétique par site. Cette "normalisation" n'est certainement pas la meilleure, mais elle possède l'avantage d'être la plus simple et la plus naturelle lorsque T_K est faible[5].
Une lecture de la classification périodique permet de comprendre la pertinence de cette série. On y trouve en effet (je garde les conventions habituelles utilisées pour cette table) :

$$\begin{array}{ccc} . & Zn & . \\ Ag & Cd & In \\ . & . & Tl \end{array}$$

Mg n'étant pas un métal de transition, il me semble difficile d'analyser de manière simple les résultats relatifs à $X = Mg$. De plus, il semblerait que la température de Kondo correspon-

[5]En effet, lorsque T_K est faible, l'entropie et la chaleur spécifi que sont toutes deux des grandeurs extensives relatives aux orbitales locales. Je ne normalise par contre pas T_K qui caractérise simplement l'énergie d'écrantage lorsque celui-ci à lieu, et ne tient pas compte de la probabilité qu'il ait lieu.

X	T_K (K)	γ $(mJ/mol\ K^2)$	$\mathcal{R}$	n_f	$\gamma T_K/n_f$ $(J/mol\ K^2)$	$T_K\chi_0/n_f$ $(J/mol\ K^2)$
Mg	500	53.3	0.84	$0.63-0.70$	$42.3-38.0$	$35.5-32.0$
Tl	514	24.2	1.67	$0.75-0.82$	$16.6-15.2$	$27.7-25.3$
Cd	127	165.6	1.02	$0.76-0.82$	$27.7-25.6$	$28.2-26.2$
Zn	60	370.0	1.07	$0.84-0.88$	$26.4-25.2$	$28.3-27.0$
Ag	95	198.9	0.89	$0.87-0.93$	$21.7-20.3$	$19.3-18.1$

TAB. 2.1: Tableau récapitulatif de quelques quantités expérimentales mesurées pour les composés de la série $YbXCu_4$. T_K : température de Kondo. γ : coefficient de la chaleur spécifique. $\mathcal{R} = \chi_0/\gamma$: rapport de Wilson. χ_0 : susceptibilité magnétique à $T = 0$. n_f : occupation de l'orbitale $4f$ de Yb. La valeur de gauche indique l'occupation à $T = 0$, celle de droite correspond à l'occupation à température ambiante. Les valeurs de T_K, γ, $\mathcal{R}$ et n_f sont issues de [103]. J'en ai ensuite déduit les valeurs de $\gamma T_K/n_f$ et $T_K\chi_0/n_f$, qui permettent de comparer T_K respectivement à $1/\gamma$ et $1/\chi_0$.

dant à $X = Mg$, tout comme celle correspondant à $X = Tl$, soit environ cinq fois plus élevée que celle des trois autres composés. Par conséquent, il parait relativement laborieux d'espérer comparer les comportements non universels observés pour ces cinq composés simultanément. Par contre, $X = Cd$, $X = Zn$ et $X = Ag$ sont des composés tout à fait comparables, tant du point de vue de la structure électronique locale que du point de vue des échelles énergétiques mises en jeu. Concentrons nous donc sur les résultats spécifiques à ces trois composés. Il apparaît que la quantité $\gamma T_K/n_f$ (respectivement $T_K\chi_0/n_f$) est identique à quelques $\%$ près pour $X = Cd$ et $X = Zn$, alors qu'elle est diminuée d'environ 20% (respectivement environ 30%) pour $X = Ag$. Je pense qu'il y a une forte corrélation entre ce résultat et le fait que Cd et Zn soient tous deux isoélectroniques. La différence de résultat pour $X = Ag$ serait un effet du remplissage électronique. Par contre, pour ce qui est de la différence obtenue pour $X = Mg$ et $X = Tl$, la différence de résultats serait due simultanément à une différence de densités de porteurs et à une différence d'énergie d'interaction entre les orbitales $4f$ et les électrons de conduction.

Il est donc très probable qu'un modèle de Anderson sur réseau puisse expliquer les résultats de Lawrence [162], et il semble légitime d'invoquer le principe d'épuisement, au moins pour comparer les trois composés $X = Cd$, $X = Zn$ et $X = Ag$. Il reste cependant à estimer précisément à partir d'un modèle de Anderson périodique les quantités physiques mesurées par Lawrence.

2.2.5 $CeIr_2Ge_2$

Sampathkumaran envisage une pertinence du problème de l'épuisement pour expliquer la forte différence observée entre la température de cohérence du composé $CeIr_2Ge_2$ et sa température de Kondo [154].

Une étude du composé $CeIr_2Ge_2$ a été effectuée par Mallik, Sampathkumaran *et al.* [109, 155], qui ont mis en évidence une température de Kondo T_K d'une centaine de Kelvin, ce qui est relativement élevé pour un composé de Ce, et une température de cohérence $T^\star \approx 4K$ très faible devant T_K.
Le maximum de la résistivité est observé à environ $100K$ et la température de Curie est de l'ordre de $180K$, ce qui correspond à peu près à une définition consistante de T_K, lorsqu'on compare cette échelle à $T^\star$.
Il semblerait qu'un régime intermédiaire apparaisse entre $4K$ et $11K$, pour lequel la résistivité se comporte avec une loi de NFL en $T^{1.2}$.
De plus, aucun pic n'a été observé pour la chaleur spécifique jusqu'à $2K$, ce qui garantit l'absence d'ordre magnétique jusqu'à cette température.

Une étude systématique de la résistivité a été effectuée, dans laquelle chacun des constituants de $CeIr_2Ge_2$ a été substitué. Les résultats les plus remarquables ont ainsi été obtenus pour l'alliage $Ce_{1-x}La_xIr_2Ge_2$. En effet, une substitution $Ce - La$ peut être interprétée comme la suppression de l'orbitale $4f$ des Ce. $x = 0$ correspond à un réseau de moments magnétiques, et la résistivité atteint son maximum à T_K et redécroit jusqu'à pratiquement s'annuler à $T = 0$, alors que pour $x \sim 1$, les impuretés magnétiques diluées induisent une augmentation de la résistivité jusqu'à $T = 0$. Cette différence entre impureté et réseau est bien comprise, et correspond au schéma de la figure 1.3.
Il semble par contre surprenant de constater que la transition entre une résistivité caractéristique d'un réseau et une résistivité caractéristique d'un système d'impuretés diluées s'effectue pour une valeur de $x \approx 0.3$, ce qui semblerait assez faible par rapport au changement de régime observé pour la même substitution sur d'autres composés constitués de Ce.
Cette rapide entrée dans le régime dilué est à comparer avec le fait que les autres substitutions[6] n'affectent pratiquement pas le comportement de la résistivité. On ne peut donc pas attribuer cette variation à un désordre des paramètres du réseau.

Mallik, Sampathkumaran *et al.* ont interprété cette rapide entrée dans le régime dilué comme étant le signe d'une fragilité de la cohérence du réseau, certainement liée à la faible valeur de $T^\star$, comparée à T_K.

2.2.6 Autres composés

Parmi les composés susceptibles de mettre en évidence le problème de l'épuisement, ceux à faible densité de porteurs sont potentiellement de bons candidats, à condition qu'ils ne soient pas proches d'une instabilité magnétique. Ainsi, par exemple, Degiorgi [45] cite Yb_4As_3 comme étant un système Kondo comportant peu de porteurs. Une description de trois composés à fermions lourds, faiblement dotés en porteurs de charges, $Ce_3Au_3Sb_4$, Sm_3Se_4 et

[6] $CeIr_{2-x}(Rh, Pt)_xGe_2$ et $CeIr_2Ge_{2-x}(Si, Sn)_x$, avec ($x = 0.2$ et 0.4).

Yb_4As_3 est donnée par Amato [5]. Une étude systématique de ces composés pourrait être effectuée.

2.2.7 Conclusion

L'examen de quelques composés de type fermions lourds semble montrer que le problème de l'épuisement n'est pas un simple jeu de l'esprit. Il permet ainsi de justifier de manière très nette la faible température de cohérence de $CePd_3$ par rapport à sa température de Kondo. Il semblerait aussi se manifester dans la série $YbXCu_4$ ($X = Ag,\ Cd,\ In,\ Mg,\ Tl,; Zn$), de manière plus subtile, ainsi que pour le composé $CeIr_2Ge_2$. La liste est loin d'être exhaustive, et une étude systématique et détaillée de composés de type fermions lourds devrait permettre de la compléter. Les composés à faible nombre de porteurs pourraient servir de point de départ à une telle étude.

2.3 Approches théoriques

2.3.1 Réseau et impuretés diluées

Avant de se demander s'il existe une ou plusieurs échelles caractéristiques pour un système de type réseau Kondo, le problème s'est posé de savoir si les expressions obtenues pour T_K avec des modèles théoriques à une seule impureté peuvent être utilisées telles quelles pour décrire des systèmes denses. Ainsi, Anderson [9] a suggéré que l'échelle de cohérence du liquide de Fermi était inférieure d'un facteur $1/N$ par rapport à l'échelle caractéristique relative à une seule impureté, où $N = 2j + 1$ désigne la dégénérescence orbitale. Cette idée a été confirmée par l'approche "grand-N" de Coleman [31], ainsi que par l'approche variationnelle suivie par Rice et Ueda [146]. Il est ainsi d'usage d'évoquer la dégénérescence orbitale pour justifier une différence entre température de Kondo et température de cohérence[7]. Cette question est indépendante du problème du remplissage électronique, mais elle a malencontreusement laissé croire que des méthodes telles que l'approximation de Gutzwiller étaient inadaptées au traitement du problème de l'épuisement [138].

2.3.2 Travaux numériques

Le problème de l'épuisement a été formulé par Nozières pour un réseau Kondo, mais on peut très facilement le généraliser à un modèle de Anderson périodique.

Utilisant les techniques de la théorie du champ dynamique moyen [65] (DMFT), Jarrell *et al.* ont résolu numériquement le modèle de Anderson périodique dans la limite Kondo. Dans un premier temps, ils ont traité le problème effectif local[8] en utilisant l'algorithme de Monte-Carlo quantique (MCQ) de Hirsch et Fye [75, 65], et ont ainsi pu comparer les susceptibilités magnétiques des modèles de Anderson périodique et à une impureté, en fonction du remplissage électronique [167] (voir figure 6.16). Ce premier résultat numérique a confirmé la forte diminution de l'énergie de cohérence du réseau par rapport à celle de l'impureté, particuliairement dans la limite de l'épuisement électronique. Jarrell *et al.* ont aussi constaté que l'écrantage des moments magnétiques est beaucoup plus graduel pour le réseau que pour une impureté isolée [167, 168], ce qui serait en accord avec les expériences de photo-émission (voir sous-section 2.2.1). Par la suite, Jarrell, Krishnamurthy *et al.* ont traité numériquement le même modèle de Anderson périodique, en résolvant cette fois le problème effectif local par une théorie de perturbation itérative [85] (TPI) qui leur a permis de confirmer les résultats obtenus par MCQ.
La conductivité optique et la résistivité ont pu être obtenues par une méthode dite de l'entropie maximale [78], à partir d'une résolution du problème local par MCQ [169].
Enfin, Jarrell *et al.* ont calculé les densités spectrales du modèle [138] en traitant le problème effectif local par le groupe de renormalisation numérique de Wilson [180]. Cette méthode a permis de retrouver qualitativement le comportement prédit par Nozières, à savoir une forte réduction de l'échelle de cohérence $T^\star$ devant la température de Kondo T_K, avec cependant

[7] Cet argument a été utilisé par Lawrence en 1985 au sujet de $CePd_3$ [101], avant que la question de l'épuisement soit soulevée pour ce composé [100].

[8] Voir aussi en troisième partie de ce manuscrit.

une différence quantitative par rapport à l'estimation de Nozières[9] puisque Jarrell *et al.* ont constaté que $T^\star \propto T_K$ pour n_c fixé. Un pseudo-gap a aussi été observé dans la densité spectrale de quasiparticules du réseau, près du niveau de Fermi, qui se referme à la température de Kondo.
Une résolution numérique des équations de DMFT en traitant le problème effectif local par TPI a permis à Meyer et Nolting [118] d'étudier le problème de l'épuisement du modèle de Anderson périodique, pour lequel ils ont obtenu des résultats comparables à ceux de Jarrell *et al.*.

On pourrait se demander dans quelle mesure le fait d'étudier un modèle de Anderson affecte ou non les résultats, puisqu'il autorise de très faibles fluctuations de charges pour les orbitales localisées, alors qu'un modèle Kondo les interdit, la répulsion coulombienne et l'énergie de l'orbitale locale étant infinies. Il est donc légitime de se demander si ces fluctuations ne pourraient pas favoriser la stabilité du liquide de Fermi, et augmenter ainsi l'échelle de cohérence. Dans un travail postérieur à celui présenté dans ce manuscrit, Costi et Manini [39] ont ainsi étudié numériquement le réseau Kondo par DMFT en traitant le problème local par les méthodes du groupe de renormalisation de Wilson. Ils auraient ainsi confirmé le résultat $T^\star \propto T_K$ à n_c fixé.

2.3.3 Conclusion

Le développement récent de la théorie du champ dynamique moyen [65] a permis un traitement numérique efficace du problème de l'épuisement électronique. Diverses méthodes ont été utilisées pour étudier le problème effectif local, à commencer par MCQ [167, 168, 169], dont l'inconvénient principal est de nécessiter un temps de calcul croissant lorsque la température diminue. L'observation des effets de l'épuisement nécessitant une résolution des modèles, évidemment pour plusieurs valeurs de la densité électronique, mais aussi sur une grande gamme de températures, d'autres approches ont alors été utilisées pour le traitement du problème effectif local, telles que la théorie des perturbations itératives [177, 118], et plus récemment, le groupe de renormalisation numérique de Wilson [138, 39].

Tous ces travaux, essentiellement numériques, semblent confirmer l'existence d'une deuxième échelle énergétique pour le modèle de Anderson périodique ou pour le réseau Kondo, proportionnelle à la température de Kondo, avec un préfacteur ne dépendant que du remplissage électronique, et conduisant, lorsque la concentration électronique diminue, à un élargissement relatif de la gamme de températures séparant d'une part l'apparition de l'effet Kondo et d'autre part la formation des quasiparticules cohérentes formant le liquide de Fermi.

Plusieurs remarques relatives à l'ensemble de ces travaux peuvent être effectuées. Tout d'abord, il apparaît que tous utilisent la théorie du champ dynamique moyen (DMFT). Bien que cette théorie ait déjà prouvé son efficacité pour l'étude de nombreux systèmes fortement corrélés [65], il pourrait être intéressant de comparer ces résultats avec d'autres approches. Ensuite, il peut paraître étonnant que la résolution du problème de l'épuisement nécessite des techniques numériques aussi avancées que, par exemple, le groupe de renormalisation de Wilson combiné à un traitement DMFT. N'existerait il pas une approche analytique sim-

[9] Voir inégalité 2.2.

ple permettant de capturer l'essentiel de la physique de l'épuisement ? Les théoriciens ont développé une grande quantité de méthodes analytiques permettant de tenir compte de différents aspects de l'effet Kondo à une impureté. Les plus remarquables sont le groupe de renormalisation [8, 138, 180], l'ansatz de Bethe [13, 179, 15, 175], la théorie de champ à invariance conforme [20, 3, 4], l'approximation NCA[10] [22], et les approches de type "grand-N" (voir section 3.1).
Le groupe de renormalisation fournit une bonne image de la physique, mais permet d'accéder à des résultats quantitatifs uniquement numériques, par l'approche de Wilson [180].
L'ansatz de Bethe fournit des expressions exactes pour les quantités thermodynamiques de modèles à une impureté [15, 80], mais ne peut pas s'appliquer de manière générale à un modèle n'ayant pas une symétrie centrale, tel qu'un réseau Kondo. De plus, son champ d'applications est limité au cas d'une bande électronique plate [81], ce qui le rend peu utile pour le traitement analytique éventuel du modèle effectif local dérivé par les équations de DMFT, dont la déformation du bain électronique effectif est, comme nous allons le voir, très pertinente pour l'étude du problème de l'épuisement.
De la même manière, la théorie de champ à invariance conforme est une méthode permettant d'accéder à des expressions analytiques exactes, mais elle s'applique uniquement pour des modèles à densité d'état plate. Une telle restriction semble poser un problème pour l'étude des faibles concentrations électroniques, pour lesquelles une densité plate risquerait d'introduire des singularités non physiques en bord de bande.

Toutes ces approches étant exclues, il ne reste que les méthodes de type "grand-N" ou assimilées. Ces dernières avaient trop rapidement été rendues inadaptées à l'étude de l'échelle de cohérence, alors que le travail que je présente dans ce manuscrit semblerait indiquer le contraire. L'explication vient du fait que les premières études ont beaucoup porté sur la diminution de l'échelle Kondo avec la dégénérescence N des orbitales localisées [31]. Cependant, il est possible, dans la limite $N \to \infty$, de capturer la physique d'un modèle $N = 2$, à condition de recaler certains des paramètres du modèle. Notamment, le couplage Kondo $J_K/2$ doit être changé en J_K/N, la densité d'électrons de conduction n_c doit être remplacée par $Nn_c/2$ et la densité d'orbitales f à écranter par $N/2$ afin que ces même densités par composante de spin restent finies et fixées indépendemment de N. Read et Newns [140], en considérant la limite $N \to \infty$ avec une densité électronique $Nn_c/2$ pour seulement un fermion par orbitale f n'ont obtenu ni d'augmentation de surface de Fermi, ni d'effet lié à l'épuisement. En effet, les électrons de conduction de ce modèle sont toujours infiniment plus nombreux que les fermions à écranter, puisque la limite $N \to \infty$ est considérée avant de prendre $n_c \to 0$.

[10] De l'anglais, "Non Crossing Approximation"

Chapitre 3

Formulation du problème

Le modèle qui nous intéresse est le modèle du réseau Kondo, donné par le Hamiltonien :

$$H = \sum_{\vec{k},\,\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} + \tilde{J}_K \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{s}_i \tag{3.1}$$

Les électrons de conduction sont notés $c_{\vec{k}\alpha}$, où $\alpha = \uparrow, \downarrow$ est l'indice de spin, $\vec{k}$ caractérise les orbitales de la bande de conduction. Dans cette expression, $\vec{s}_i \equiv \sum_{\alpha\beta} \sum_{\vec{k}\vec{k}'} \frac{1}{2} c^{\dagger}_{\vec{k}\alpha} \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{\vec{k}'\beta}$ désigne la densité de spin des électrons de conduction du bain au site i du réseau, et $\tilde{J}_K$ la force du couplage Kondo entre les spins localisés et les électrons de conduction (choisi antiferromagnétique).

3.1 Représentation fermionique des spins

Pour qu'un effet lié à l'épuisement puisse être observé, il est indispensable que le système reste dans une phase paramagnétique. Nous avons donc choisi d'étudier ce problème sans tenir compte de l'apparition éventuelle d'un ordre magnétique sous l'effet d'une variation de la densité électronique. Ainsi, nous avons utilisé une approche de type "bosons esclaves", basée sur une représentation fermionique des opérateurs de spin, exacte dans la limite "grand$-N$".
Le modèle étudié correspond ainsi au modèle de Coqblin-Schrieffer [38], généralisé à un réseau, considéré dans la limite d'une dégénérescence infinie.

Cette approche s'est beaucoup développée depuis les années quatre-vingt, où elle a été utilisée par Read et Newns [140] dans le cadre du modèle de Coqblin-Schrieffer de grande dégénérescence. Des variantes ont été appliquées par Coleman [31] pour l'étude du réseau Kondo, puis du modèle de Anderson périodique [32]. Pour les puristes, l'expression "bosons esclaves" concerne exclusivement ce dernier cas.
Lorsque le modèle est un réseau Kondo, les opérateurs de spin sont représentés par des fermions d'Abrikosov dont la couleur peut prendre N valeurs différentes. On parle aussi de N "composantes de spin", faisant alors allusion aux orbitales localisés de dégénérescence N du modèle de Coqblin-Schrieffer.

Dans la limite “grand$-N$”, c’est à dire lorsque $N \to \infty$, les couleurs sont découplées et le modèle effectif obtenu est formellement équivalent à celui dérivé par Lacroix et Cyrot [98] à partir d’un développement Hartree-Fock, ou “champ moyen”.

Dans le cadre du modèle de Anderson périodique, Coleman [33] a par la suite décrit la brisure de symétrie non physique induite par la méthode, les fluctuations autour de la solution exacte du modèle ne s’annulant que pour $N = \infty$.
En parallèle, Read, Newns et Doniach [141] ont étudié certaines propriétés physiques du réseau Kondo dans la limite $N \to \infty$. Il ont montré d’une part la stabilité de l’état paramagnétique, et d’autre part que la susceptibilité magnétique et la chaleur spécifique correspondent à celles obtenues par un modèle à une seule impureté.
L’approche a ainsi rapidement été jugée apte à tenir compte de l’effet Kondo à une impureté, mais inapte à décrire de manière simple les particularités des réseaux [123].

Plusieurs alternatives ont alors été développées. D’une part, les développements perturbatifs en $1/N$ [18, 99, 121, 49] permettent d’accéder aux propriétés magnétiques et de contrôler les fluctuations. D’autre part, des modèles d’impuretés supersymétriques ont été introduits[1] pour tenir compte simultanément de l’effet Kondo, via la partie fermionique des spins, et du magnétisme, via la partie bosonique [35, 133].

Cependant, la pertinence de la représentation fermionique pour la prise en compte des effets de réseau a été un peu trop rapidement négligée. En effet, une question importante lorsque l’on considère la limite $N \to \infty$ est de savoir comment les paramètres du modèle doivent être renormalisés si l’on veut retrouver le comportement qualitatif de $N = 2$. Le résultat de Read, Newns et Doniach [141] a été obtenu en représentant chaque opérateur de spin par un unique fermion, alors que la densité totale d’électrons de conduction a été supposée proportionnelle à N. Evidemment, la résonance Kondo peut toujours se produire localement lorsque $N \to \infty$, mais ce système ne peut pas être épuisé. Depuis, la “bonne” limite $N \to \infty$ a été introduite dans de nombreux travaux, pour lesquels les nombres de fermions et d’électrons sont tous deux proportionnels à N. Il restait alors à reprendre les calculs de Read, Newns et Doniach avec cette nouvelle contrainte.

[1] Il s’agit en réalité de modèles à une seule impureté, introduits historiquement par Gan, Coleman et Andrei [61] afi n d’étudier le problème du sous-écrantage [129].

3.2 Modèle Kondo à une impureté

Avant d'étudier le problème du réseau, considérons le modèle Kondo à une impureté dans le formalisme "grand$-N$". Nous allons ainsi vérifier que les propriétés de basse température de ce modèle définissent, dans la limite couplage faible, une unique échelle énergétique, la température de Kondo T_K.

3.2.1 Formulation du problème généralisé à $SU(N)$

En utilisant une représentation fermionique des opérateurs de spin, le modèle Kondo à une seule impureté, généralisé à la symétrie $SU(N)$ correspond à un modèle de Coqblin-Schrieffer [38], donné par le Hamiltonien suivant :

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} + \tilde{J}_K \sum_{\sigma,\sigma'} f^\dagger_\sigma f_{\sigma'} c^\dagger_{0\sigma'} c_{0\sigma} \tag{3.2}$$

$c^\dagger_{\vec{k}\sigma}$ et $c_{\vec{k}\sigma}$ sont respectivement des opérateur de création et d'anihilation d'un électron de vecteur d'onde $\vec{k}$ et de spin σ. De la même manière, $c^\dagger_{i\sigma}$ (respectivement $c_{i\sigma}$) est un opérateur de création (respectivement d'anihilation) d'un électron de spin σ sur le site i. L'opérateur $f^\dagger_\sigma$ (respectivement f_σ) correspond à la création d'un "fermion f" de spin σ localisé sur le site $i = 0$. Les indices de spin σ et σ' varient de 1 à N, où N vaut 2 lorsqu'il s'agit des "spins habituels" de la symétrie $SU(2)$, représentables par les matrices de Pauli. Nous allons considérer la limite $N \to \infty$ du modèle décrit par le Hamiltonien (3.2), en tenant compte des contraintes suivantes, où $\mathcal{N}$ représente le nombre total de sites.

$$\tilde{J}_K = J_K/N \tag{3.3}$$

$$\boxed{\frac{1}{\mathcal{N}N}\sum_{i\sigma} c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma} = \frac{n_c}{2} \qquad (3.4)} \quad \to \quad \mu$$

$$\boxed{\frac{1}{N}\sum_{\sigma} f^\dagger_\sigma f_\sigma = \frac{1}{2} \qquad (3.5)} \quad \to \quad \lambda(\tau)$$

La renormalisation du couplage Kondo 3.3 permet de faire tendre N vers l'infini, à J_K fixé, tout en conservant une énergie finie par composante de spin. La valeur de la densité de "fermions f" par composante de spin est fixée à $1/2$ (contrainte (3.5)), ce qui respecte la symétrie particule-trou du modèle Kondo de symétrie $SU(2)$. Par contre, il est possible de faire varier la densité d'électrons de conduction n_c, définie de manière à ce que le demi-remplissage (symétrique électron-trou) corresponde à $n_c = 1$ (contrainte (3.4)). Afin d'étudier la limite $N \to \infty$ de ce modèle, nous utilisons l'intégrale fonctionnelle, en tenant compte des contraintes via l'introduction du potentiel chimique μ et du paramètre de Lagrange $\lambda(\tau)$. Le

Hamiltonien (3.2) et les contraintes (3.4) et (3.5) définissent la fonction de partition suivante :

$$Z^{(N)} = \int \mathcal{D}c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\mathcal{D}c_{\vec{k}\sigma}\mathcal{D}f^{\dagger}_{\sigma}\mathcal{D}f_{\sigma}\mathcal{D}\mu\mathcal{D}\lambda \tag{3.6}$$

$$\exp\left[-\int_0^\beta d\tau H - \int_0^\beta d\tau \sum_\sigma f^{\dagger}_{\sigma}(\tau)\partial_\tau f_\sigma(\tau) - \int_0^\beta d\tau \sum_{\vec{k},\sigma} c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}(\tau)\partial_\tau c_{\vec{k}\sigma}(\tau)\right.$$

$$\left. + \int_0^\beta d\tau \mu \sum_{\vec{k}\sigma}\left(c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}(\tau)c_{\vec{k}\sigma}(\tau) - \frac{n_c N}{2}\right) + \int_0^\beta d\tau i\lambda(\tau)\sum_\sigma\left(f^{\dagger}_{\sigma}(\tau)f_\sigma(\tau) - \frac{N}{2}\right)\right]$$

Nous introduisons alors un champ commutant $B(\tau)$ pour découpler, par transformation de Hubbard-Statonovitch, l'interaction entre les composantes de spin (qui provient du terme Kondo, dans le Hamiltonien (3.2)). La fonction de partition prend ainsi la forme :

$$Z^{(N)} = \int \mathcal{D}c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}\mathcal{D}c_{\vec{k}\sigma}\mathcal{D}f^{\dagger}_{\sigma}\mathcal{D}f_{\sigma}\mathcal{D}\mu\mathcal{D}\lambda\mathcal{D}B\exp\mathcal{S} \tag{3.7}$$

où l'action $\mathcal{S}$ est donnée par :

$$\begin{aligned} -\mathcal{S} &= \frac{N}{J_K}\int_0^\beta d\tau B^{\dagger}(\tau)B(\tau) + \sum_\sigma\int_0^\beta d\tau\left(B(\tau)f^{\dagger}_{\sigma}(\tau)c_{0\sigma}(\tau) + B^{\dagger}(\tau)f_\sigma(\tau)c^{\dagger}_{0\sigma}(\tau)\right) \\ &+ \sum_\sigma\int_0^\beta d\tau\left[\sum_{\vec{k}} c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}(\tau)\left(\partial_\tau + \epsilon_{\vec{k}} - \mu\right)c_{\vec{k}\sigma}(\tau) + f^{\dagger}_{\sigma}(\tau)\left(\partial_\tau - i\lambda(\tau)\right)f_\sigma(\tau)\right. \\ &\quad \left. + \frac{i}{2}\lambda(\tau) + \frac{n_c}{2}\mu\right] \end{aligned} \tag{3.8}$$

3.2.2 Equations de col dans la limite $N \to \infty$

Dans la limite $N \to \infty$, nous cherchons une solution statique sous la forme $B(\tau) = r$ et $i\lambda(\tau) = \mu + \lambda_0$. On obtient, au col, une action gaussienne pour les opérateurs f_σ et $c_{\vec{k}\sigma}$, dans laquelle les composantes de spin ont été découplées. L'approche "grand$-N$" peut ainsi être vue comme un traitement en champ moyen entre les différentes composantes de spin. Alors, en supprimant l'indice σ devenu superflu, l'action par couleur est donnée par :

$$\begin{aligned} -\frac{\mathcal{S}}{N} &= \int_0^\beta d\tau\left[\sum_{\vec{k}} c^{\dagger}_{\vec{k}}(\tau)\left(\partial_\tau + \epsilon_{\vec{k}} - \mu\right)c_{\vec{k}}(\tau) + f^{\dagger}(\tau)\left(\partial_\tau - \mu - \lambda_0\right)f(\tau)\right. \\ &+ \left. r\left(f^{\dagger}(\tau)c_0(\tau) + c^{\dagger}_0(\tau)f(\tau)\right)\right] + \beta\left[\frac{r^2}{J_K} + \frac{\lambda_0}{2} + \mu\left(\frac{1}{2} + \frac{n_c}{2}\right)\right] \end{aligned} \tag{3.9}$$

Les paramètres r, λ_0 et μ s'ajustent pour minimiser l'énergie libre du système, qui se déduit de la fonction de partition (3.7) par la relation $\mathcal{F} = -ln\left(Z^{(N)}\right)/(\beta N\mathcal{N})$. On obtient les

équations de col suivantes :

$$\frac{2r}{J_K} = -\sum_{\vec{k}} \left(G_{f\vec{k}}(\tau = 0^-) + G_{\vec{k}f}(\tau = 0^-) \right) \quad (3.10)$$

$$\frac{1}{2} = G_{ff}(\tau = 0^-) \quad (3.11)$$

$$\frac{n_c}{2} = \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}\vec{k}}(\tau = 0^-) \quad (3.12)$$

L'action (3.9) se diagonalise formellement, ce qui permet d'exprimer de manière simple les fonctions de Green en fonction des paramètres effectifs r, λ_0 et μ. On obtient ainsi, en introduisant les fréquences de Matsubara fermioniques :

$$G_{ff}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu + \lambda_0 - \sum_{\vec{k}} \frac{r^2}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}}}} \quad (3.13)$$

$$G_{\vec{k}f}(i\omega_n) = G_{f\vec{k}}(i\omega_n) = \frac{r G_{ff}(i\omega_n)}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}}} \quad (3.14)$$

$$G_{\vec{k}\vec{k}'}(i\omega_n) = \frac{\delta_{\vec{k}\vec{k}'}}{i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}}} + \frac{r^2 G_{ff}(i\omega_n)}{\left(i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}}\right)\left(i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}'}\right)} \quad (3.15)$$

3.2.3 Une seule échelle énergétique : T_K

La figure 3.1 montre l'universalité entre la température de Kondo et la susceptibilité magnétique du modèle à une impureté. La courbe de droite met en évidence l'universalité du nombre de Wilson[2] pour le modèle à une seule impureté, dans la limite couplage faible.
Ce résultat permet d'illustrer le fait que les propriétés physiques d'un modèle à une seule impureté peuvent être décrites par une unique échelle énergétique, la température de Kondo T_K, égale à l'énergie de cohérence du liquide de Fermi $T^\star$.

Nous allons voir dans la suite de cette première partie que les quantités physiques obtenues pour un réseau d'impuretés ne sont pas universelles aux températures inférieurs à T_K, en particulier sous l'effet d'une variation de la concentration électronique n_c. Pour cela, commençons par appliquer au réseau Kondo la même méthode "grand$-N$" qui vient d'être décrite pour le modèle à une impureté.

[2]Le nombre de Wilson est défi ni par le produit $T_K \chi_{loc}(T = 0)$. Il se distingue du rapport de Wilson, qui, lui, mesure le rapport $\chi_{loc}(T = 0)/\gamma$ et vaut 1 pour notre modèle, γ étant le coeffi cient de la chaleur spécifi que.

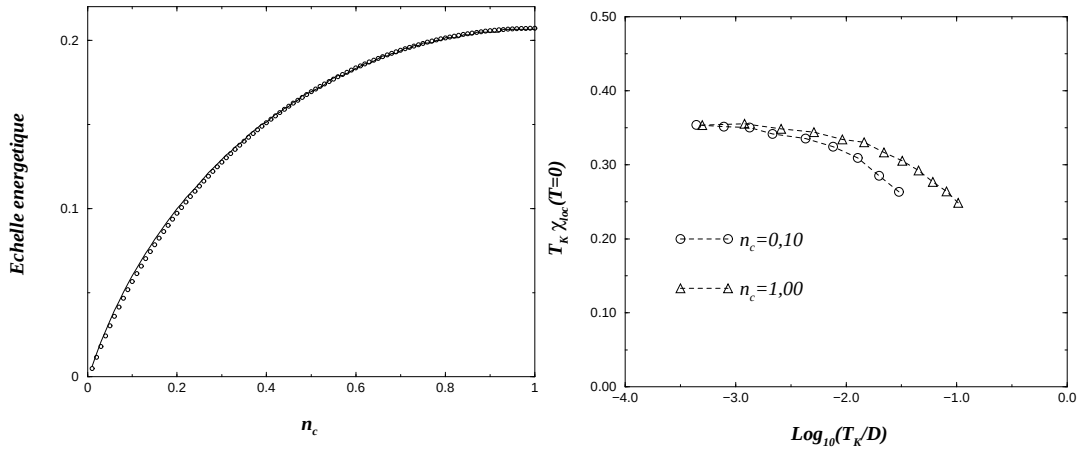


FIG. 3.1: Modèle Kondo à une seule impureté. La figure de gauche présente la température de Kondo T_K (trait plein) et l'inverse de la susceptibilité magnétique statique $1/4\chi_{loc}(T=0)$ (cercles) en fonction de n_c. L'échelle verticale correspond dans le premier cas à la température, dans le second à une énergie. Résultat numérique. $D=2$ et $J_K=1.5$. La figure de droite présente le nombre de Wilson. Les triangles correspondent à $n_c=1$, les cercles à $n_c=0.1$. Résultat numérique. $D=2$. Pour n_c fixé, on fait varier J_K de manière à obtenir plusieurs valeurs de T_K.

3.3 Réseau Kondo

Nous considérons désormais le Hamiltonien (3.1) du réseau Kondo, généralisé à une représentation fermionique du groupe de symétrie $SU(N)$:

$$H=\sum_{\vec{k},\sigma}\epsilon_{\vec{k}}c^{\dagger}_{\vec{k}\sigma}c_{\vec{k}\sigma}+\tilde{J}_K\sum_i\sum_{\sigma,\sigma'}f^{\dagger}_{i\sigma}f_{i\sigma'}c^{\dagger}_{i\sigma'}c_{i\sigma} \tag{3.16}$$

Les notations sont les mêmes que celles que nous avons utilisées pour le modèle Kondo à une impureté (voir Hamiltonien (3.2)). La seule différence tient dans le fait que nous considérons maintenant un réseau de spins, représentés par les opérateurs $f^{\dagger}_{i\sigma}$ (respectivement $f_{i\sigma}$) de création (respectivement d'anihilation) d'un fermion f sur le site i. Nous considérons la limite $N\to\infty$ de ce modèle, avec les contraintes (analogues des contraintes (3.3), (3.4) et (3.5) :

$$\boxed{\begin{aligned} \tilde{J}_K &= J_K/N && (3.17)\\ \frac{1}{\mathcal{N}N}\sum_{i\sigma}c^{\dagger}_{i\sigma}c_{i\sigma} &= \frac{n_c}{2} && (3.18)\\ \frac{1}{N}\sum_{\sigma}f^{\dagger}_{i\sigma}f_{i\sigma} &= \frac{1}{2} && (3.19)\end{aligned}} \quad \begin{aligned} &\to\ \mu\\ &\to\ \lambda_j(\tau)\end{aligned}$$

Pour ce modèle sur réseau, les opérateurs fermioniques doivent vérifier une contrainte pour

chaque site. Comme pour le modèle à une seule impureté, le nombre moyen de "fermions f_i" par composante de spin[3] est fixé à $1/2$ (contrainte (3.19)), ce qui respecte la symétrie particule-trou du modèle Kondo de symétrie $SU(2)$. De même, il est possible de faire varier la densité d'électrons de conduction n_c, définie de manière à ce que le demi-remplissage (symétrique électron-trou) corresponde à $n_c = 1$ (contrainte (3.18)). Pour obtenir les équations de col à N grand, nous utilisons l'intégrale fonctionnelle, en tenant compte des contraintes via l'introduction du potentiel chimique μ et des multiplicateurs de Lagrange $\lambda_j(\tau)$. En notant de manière compacte $T_R = \int \mathcal{D}c^\dagger_{\vec{k}\sigma}\mathcal{D}c_{\vec{k}\sigma}\mathcal{D}f^\dagger_\sigma\mathcal{D}f_\sigma\mathcal{D}\mu\mathcal{D}\lambda$, la fonction de partition associée au Hamiltonien (3.16) et aux contraintes (3.18) et (3.19) s'écrit :

$$Z^{(N)} = T_R T \exp\left\{\int_0^\beta d\tau \left[\sum_{\vec{k}}\left[c^\dagger_{\vec{k}\sigma}(\tau)\left(\partial_\tau + \epsilon_{\vec{k}} - \mu\right)c_{\vec{k}\sigma}(\tau) + \frac{n_c}{2}\mu\right]\right.\right. \tag{3.20}$$
$$\left.\left. + \sum_j \left[J_K \sum_{\sigma\sigma'} f^\dagger_{j\sigma}(\tau) f_{j\sigma'}(\tau) c^\dagger_{j\sigma'}(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + f^\dagger_{j\sigma}(\tau)\left(\partial_\tau - i\lambda_j(\tau)\right) f_{j\sigma}(\tau) + \frac{i}{2}\lambda_j(\tau)\right]\right]\right\}$$

Nous introduisons alors les champs commutants $B_i(\tau)$ pour découpler sur chaque site i, par transformation de Hubbard-Statonovitch, l'interaction entre les composantes de spin (qui provient du terme Kondo dans le Hamiltonien (3.16)). La fonction de partition prend la forme suivante :

$$Z^{(N)} = \int \prod_j \mathcal{D}B_j(\tau) \exp\left\{-\frac{N}{J_K}\int_0^\beta d\tau B^\dagger_j(\tau) B_j(\tau)\right\} T_R T \exp \sum_\sigma \mathcal{S}_\sigma \tag{3.21}$$

$$\mathcal{S}_\sigma = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{\vec{k}}\left[c^\dagger_{\vec{k}\sigma}(\tau)\left(\partial_\tau + \epsilon_{\vec{k}} - \mu\right)c_{\vec{k}\sigma}(\tau) + \frac{n_c}{2}\mu\right]\right. \tag{3.22}$$
$$\left. + \sum_j \left[B_j(\tau) f^\dagger_{j\sigma}(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + B^\dagger_j(\tau) c^\dagger_{j\sigma}(\tau) f_{j\sigma}(\tau) + f^\dagger_{j\sigma}(\tau)\left(\partial_\tau - i\lambda_j(\tau)\right) f_{j\sigma}(\tau) + \frac{i}{2}\lambda_j(\tau)\right]\right]$$

Dans la limite $N \to \infty$, nous cherchons une solution statique sous la forme $B_j(\tau) = r$ et $i\lambda_j(\tau) = \mu + \lambda_0$. On obtient, au col, une action gaussienne pour les opérateurs $f_{j\sigma}$ et $c_{\vec{k}\sigma}$, et dans laquelle les composantes de spin ont été découplées. Alors, en supprimant l'indice σ devenu superflu, l'action $\mathcal{S} \equiv \mathcal{S}_\sigma$ par composante de spin devient :

$$\begin{aligned}\mathcal{S} &= \int_0^\beta d\tau \sum_{\vec{k}} \left[c^\dagger_{\vec{k}}(\tau)\left(\partial_\tau + \epsilon_{\vec{k}} - \mu\right)c_{\vec{k}}(\tau) + f^\dagger_{\vec{k}}(\tau)\left(\partial_\tau - \mu - \lambda_0\right) f_{\vec{k}}(\tau)\right. \\ &+ \left. r\left(f^\dagger_{\vec{k}}(\tau) c_{\vec{k}}(\tau) + c^\dagger_{\vec{k}}(\tau) f_{\vec{k}}(\tau)\right)\right] + \beta\mathcal{N}\left[\frac{r^2}{J_K} + \frac{\lambda_0}{2} + \mu\left(\frac{1}{2} + \frac{n_c}{2}\right)\right]\end{aligned} \tag{3.23}$$

[3] La contrainte utilisée initialement par Read et Newns[140] était différente, ne permettant pas capturer la physique de l'épuisement dans la limite $N \to \infty$.

Les paramètres r, λ_0 et μ s'ajustent pour minimiser l'énergie libre du système. Celle-ci se déduit de la fonction de partition par la relation $\mathcal{F} = -\ln\left(Z^{(N)}\right)/(\beta\mathcal{N}N)$, ce qui conduit aux équations de col suivantes (analogues, pour le réseau, des équations (3.10), (3.11), (3.12)), exprimées à partir des fonctions de Green locales :

$$-\frac{2r}{J_K} = G_{fc}(\vec{R}=\vec{0},\tau=0^-) + G_{cf}(\vec{R}=\vec{0},\tau=0^-) \quad (3.24)$$

$$\frac{1}{2} = G_{ff}(\vec{R}=\vec{0},\tau=0^-) \quad (3.25)$$

$$\frac{n_c}{2} = G_{cc}(\vec{R}=\vec{0},\tau=0^-) \quad (3.26)$$

L'action (3.23) est diagonale dans l'espace réciproque, ce qui permet d'exprimer de manière simple les fonctions de Green en fonction des paramètres effectifs r, λ_0 et μ. On obtient ainsi, en introduisant les fréquences de Matsubara fermioniques :

$$G_{cf}(\vec{k},i\omega_n) = G_{fc}(\vec{k},i\omega_n) = \frac{r}{(i\omega_n+\mu+\lambda_0)(i\omega_n+\mu-\epsilon_{\vec{k}})-r^2} \quad (3.27)$$

$$G_{ff}(\vec{k},i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n+\mu+\lambda_0-\frac{r^2}{i\omega_n+\mu-\epsilon_{\vec{k}}}} \quad (3.28)$$

$$G_{cc}(\vec{k},i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n+\mu-\epsilon_{\vec{k}}-\frac{r^2}{i\omega_n+\mu+\lambda_0}} \quad (3.29)$$

3.4 Interprétation physique du paramètre r

Une quantité importante intervenant dans les équations de col (3.24), (3.25) et (3.26) est le paramètre r. L'équation (3.24), qui provient du découplage de l'interaction Kondo par l'approche que nous utilisons, traduit légalité $r = J_K\langle f_\sigma^\dagger c_\sigma\rangle$, à un facteur de phase près. Une non-nullité de r nécessite a priori des fluctuations de charges non physiques pour les orbitales localisées. Cependant, nous allons voir dans cette section que le véritable paramètre d'ordre de notre modèle est en réalité une fonction de Green à quatre opérateurs, dont la non-nullité ne nécessite aucune fluctuation de charge.

Considérons un site particulier du réseau, avec $N = 2$. Ce site contient un moment magnétique (le spin $\vec{s}$ correspondant à l'orbitale f localisée), ainsi que 0, 1 ou 2 électrons de conduction. En notant $f_\sigma^\dagger$ (respectivement $c_\sigma^\dagger$) l'opérateur de création d'un fermion représentant le spin (respectivement d'un électron de conduction sur le site considéré), on peut alors définir le projecteur p_s sur le sous espace de Hilbert correspondant à l'état singulet.

$$p_s = \frac{1}{2}(f_\uparrow c_\downarrow - f_\downarrow c_\uparrow)(c_\downarrow^\dagger f_\uparrow^\dagger - c_\uparrow^\dagger f_\downarrow^\dagger) \quad (3.30)$$

On vérifie que $\langle\Phi|p_s|\Phi\rangle$ vaut 1 si $|\Phi\rangle$ est un état correspondant à un singulet sur le site considéré, alors que cette valeur moyenne est nulle dans les autres cas. La probabilité d'obtenir un

état singulet local vaut alors :

$$\langle p_s \rangle = \frac{1}{2}\left[\langle f_\uparrow^\dagger f_\uparrow c_\downarrow^\dagger c_\downarrow\rangle + \langle f_\downarrow^\dagger f_\downarrow c_\uparrow^\dagger c_\uparrow\rangle + \langle f_\uparrow^\dagger c_\uparrow c_\downarrow^\dagger f_\downarrow\rangle + \langle f_\downarrow^\dagger c_\downarrow c_\uparrow^\dagger f_\uparrow\rangle\right] \tag{3.31}$$

En champ moyen, les composantes de spin $\uparrow$ et $\downarrow$ sont complètement découplées, et on trouve :

$$\boxed{\langle p_s \rangle = \frac{n_c}{4} + \frac{r^2}{J_K^2} \qquad (3.32)}$$

Où

$$\begin{aligned} \langle c_\sigma^\dagger c_\sigma \rangle &= n_c/2 \\ \langle f_\sigma^\dagger c_\sigma \rangle &= r/J_K \end{aligned}$$

Evidemment, la non nullité des fonctions de corrélation $\langle f_\sigma^\dagger c_\sigma \rangle$ ne respecte pas la conservation de la charge, le niveau f ne pouvant avoir que des fluctuations de spin. Cependant, il faut considérer ces termes comme étant des intermédiaires de calcul, permettant d'accéder à la probabilité $\langle p_s \rangle$.

lorsque $r/J_K = 0$, cette probabilité vaut $n_c/4$. En effet, en annulant l'hybridation effective entre les deux bandes (f et c), on décorrèle leurs statistiques. La probabilité d'obtenir un singulet est donc égale à la probabilité d'avoir un (et un seul) électron de conduction, c'est à dire n_c, divisée par quatre, puisque sur les quatre états que le spin peut constituer avec l'électron, un seul correspond au singulet.

La non nullité de r/J_K implique une augmentation de $\langle p_s \rangle$ par rapport à une répartition équiprobable des états du système. Ainsi, le paramètre r permet directement d'évaluer le renforcement du poids de l'état singulet, induit par le couplage Kondo.

On constate que cette approche ne permet pas d'obtenir des valeurs de $\langle p_s \rangle$ inférieures à $n_c/4$. Cela signifie que notre champ moyen permet de tenir compte d'un renforcement de l'état singulet du à un couplage Kondo antiferromagnétique, mais qu'il ne peut en aucun cas décrire le système lorsque le couplage est ferromagnétique.

Chapitre 4

Propriétés générales du modèle

Nous avons vu dans le chapitre précédent que la périodicité du réseau d'impuretés permet d'obtenir une action effective (3.23) diagonale dans l'espace réciproque, les paramètres de champ moyen vérifiant par contre les contraintes locales (3.24), (3.25) et (3.26). Le problème ayant été formulé, nous allons étudier dans ce chapitre certaines propriétés très générales du modèle étudié, relatives en particulier à la densité spectrale de quasiparticules. Tout d'abord, commençons par introduire la densité d'états ρ_0 des électrons sans interaction Kondo.

4.1 Introduction de la densité d'états ρ_0

Exprimées à partir des fonctions de Green en fréquences de Matsubara fermioniques, les équations de col (3.24), (3.25) et (3.26) vérifiées par les paramètres r, λ_0 et μ sont les suivantes :

$$\left\{\begin{array}{rcl} -\frac{2r}{J_K} & = & \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{\beta}\sum_n\left(G_{fc}(\vec{k},i\omega_n)+G_{cf}(\vec{k},i\omega_n)\right) \\ \frac{1}{2} & = & \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{\beta}\sum_n G_{ff}(\vec{k},i\omega_n) \\ \frac{n_c}{2} & = & \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{\beta}\sum_n G_{cc}(\vec{k},i\omega_n) \end{array}\right. \tag{4.1}$$

Les fonctions de Green G_{fc}, G_{ff} et G_{cc} sont respectivement données par les expressions (3.27), (3.28) et (3.29). On effectue la sommation sur $i\omega_n$ selon les méthodes habituelles[1], par intégration dans le plan complexe. On remplace alors la sommation sur les vecteurs d'onde $\vec{k}$ par une intégrale sur la densité d'états $\rho_0(\omega)=\frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{k}}\delta\left(\omega-\epsilon_{\vec{k}}\right)$. Il s'agit de la densité d'états des

[1] Voir par exemple le livre de Mahan [112].

électrons de conduction en l'absence de l'interaction Kondo. Les équations de col deviennent :

$$\left\{\begin{array}{rcl} -\frac{1}{J_K} & = & \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_0(\omega) \frac{n_F(\omega^+)-n_F(\omega^-)}{\omega^+-\omega^-} \\ \frac{1}{2} & = & \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_0(\omega) \frac{(\omega^++\mu-\omega)n_F(\omega^+)-(\omega^-+\mu-\omega)n_F(\omega^-)}{\omega^+-\omega^-} \\ \frac{n_c}{2} & = & \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_0(\omega) \frac{(\omega^++\mu+\lambda_0)n_F(\omega^+)-(\omega^-+\mu+\lambda_0)n_F(\omega^-)}{\omega^+-\omega^-} \end{array}\right. \tag{4.2}$$

avec

$$\omega^{\pm} = -\mu + \frac{\omega-\lambda_0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega+\lambda_0}{2}\right)^2 + r^2}$$

Lorsque $r \neq 0$, ω^+ et ω^- sont des fonctions de ω strictement monotones, ce qui permet d'effectuer les changements de variable suivants :

$$\left|\begin{array}{l} \omega' = \omega^+ \text{ pour les termes faisant intervenir } n_F(\omega^+) \\ \omega' = \omega^- \text{ pour les termes faisant intervenir } n_F(\omega^-) \end{array}\right.$$

Le système (4.2) devient alors :

$$\boxed{\begin{array}{rcll} -\dfrac{1}{J_K} & = & \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\omega+\mu+\lambda_0}\rho_0\left(\omega+\mu-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right) n_F(\omega) & (4.3) \\ \dfrac{1}{2} & = & \displaystyle r^2\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{(\omega+\mu+\lambda_0)^2}\rho_0\left(\omega+\mu-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right) n_F(\omega) & (4.4) \\ \dfrac{n_c}{2} & = & \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\rho_0\left(\omega+\mu-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right) n_F(\omega) & (4.5) \end{array}}$$

D'un point de vue mathématique, ces équations ne posent aucun problème de convergence. En effet, lorsque $\omega \to -\mu-\lambda_0$, on a $\omega+\mu-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0} \to \infty$. Il suffit donc de supposer que la densité d'états de conduction sans interaction $\rho_0(\omega)$ est à support compact (c'est à dire qu'il existe un cut-off énergétique), ou au moins qu'elle s'annule à haute fréquence plus rapidement que $1/\omega$. Une telle hypothèse n'est évidemment pas restrictive du point de vue de la physique.

4.2 Spectre des quasiparticules

En présence de l'interaction Kondo, les électrons de conduction (opérateurs $c_{\vec{k}}$), ainsi que les fermions représentant les spins des impuretés (opérateurs $f_{\vec{k}}$) ne correspondent plus aux états propres du Hamiltonien. Les quasiparticules correspondant à ce système sont désormais une combinaison linéaire entre états de conduction (opérateurs $c^\dagger_{\vec{k}}$ et $c_{\vec{k}}$) et états localisés (opérateurs $f^\dagger_{\vec{k}}$ et $f_{\vec{k}}$). Une telle hybridation peut donner naissance à des quasiparticules plus localisées et donc plus lourdes que les électrons de conduction sans hybridation [2]. Afin d'étudier plus quantitativement la description qui vient d'être donnée, il est utile d'introduire les

[2] Pour le réseau Kondo, cette description est un artefact de l'approche grand-N. Cependant, elle reste adaptée à un modèle de Anderson, qui correspond à la réalité physique des composés à fermions lourds.

densités spectrales ρ_c (respectivement ρ_f et ρ_{fc}) associées aux fonctions de Green locales G_{cc} (respectivement G_{ff} et G_{fc}). Ces densités s' expriment facilement en fonction des paramètres r, λ_0 et μ ainsi que de la densité spectrale sans interaction $\rho_0(\omega)$, et on trouve, à partir des expressions (3.27), (3.28) et (3.29) :

$$\boxed{\begin{aligned} \rho_c(\omega) &= \rho_0\left(\omega+\mu-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right) && (4.6)\\ \rho_f(\omega) &= \frac{r^2}{(\omega+\mu+\lambda_0)^2}\rho_0\left(\omega+\mu-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right) && (4.7)\\ \rho_{fc}(\omega) &= \frac{r}{\omega+\mu+\lambda_0}\rho_0\left(\omega+\mu-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right) && (4.8)\end{aligned}}$$

Les équations de col (4.3), (4.4) et (4.5) peuvent alors s'écrire simplement :

$$\left\{\begin{aligned} -\frac{r}{J_K} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\rho_{fc}(\omega)n_F(\omega)\\ \frac{1}{2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\rho_f(\omega)n_F(\omega)\\ \frac{n_c}{2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\rho_c(\omega)n_F(\omega)\end{aligned}\right. \qquad (4.9)$$

Les relations (4.6), (4.7) et (4.8) qui viennent d'être dérivées constituent des expressions très simples des différentes densités spectrales pertinentes pour le problème. Bien sûr, il reste encore à déterminer les paramètres r, λ_0 et μ solutions des équations de col (4.9). Cependant, plusieurs caractéristiques de ces densités spectrales peuvent être obtenues directement. Notamment, nous allons montrer tout d'abord que toutes présentent un gap d'hybridation.

4.3 Ouverture d'un gap

Supposons que $\rho_0(\omega) = 0$ si $|\omega| > D$, et que $\rho_0(\omega)$ soit non nulle sur l'intervalle $]-D, D[$. Alors, le support de la fonction $\rho_0\left(\omega+\mu-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right)$, qui intervient dans l'expression des densités spectrales (4.6), (4.7) et (4.8), est la réunion de deux intervalles $B^- \equiv [\omega_1, \omega_2]$ et $B^+ \equiv [\omega_3, \omega_4]$, avec

$$\begin{aligned} \omega_1 = \omega^-(-D) \quad \omega_2 = \omega^-(+D)\\ \omega_3 = \omega^+(-D) \quad \omega_4 = \omega^+(+D)\end{aligned}$$

Où l'on a défini

$$\omega^{\pm}(\eta D) = -\mu + \frac{\eta D-\lambda_0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\eta D+\lambda_0}{2}\right)^2 + r^2}$$

On vérifie facilement que $\omega_2 < \omega_s \equiv -\mu-\lambda_0 < \omega_3$; ainsi, la densité $\rho_0(\omega+\mu-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0})$ présente un gap autour du point singulier ω_s. La largeur de ce gap vaut $\Delta_{gap} = \omega_3 - \omega_2$, et

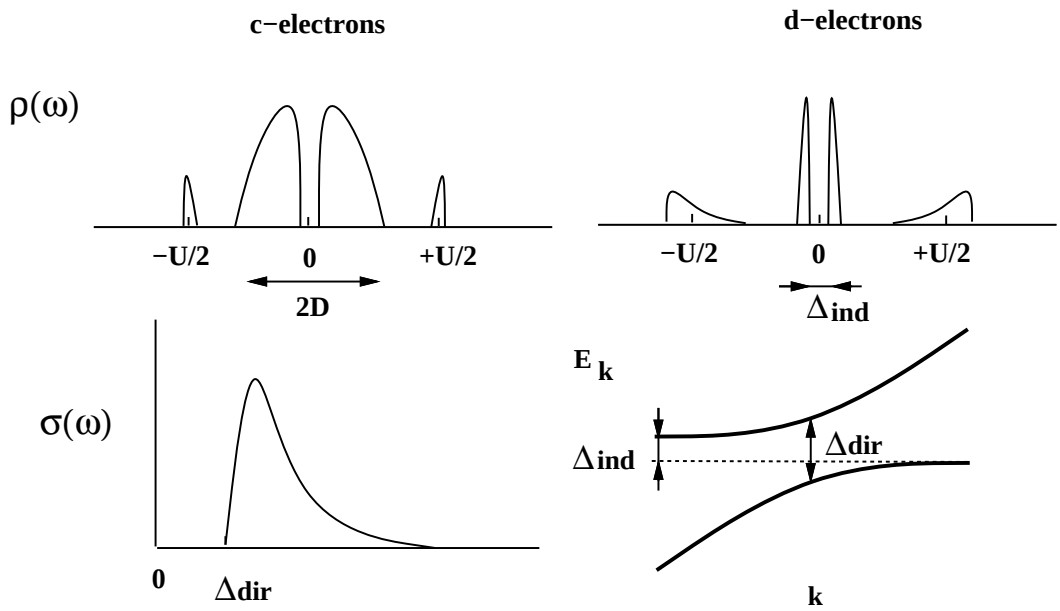


FIG. 4.1: Densités spectrales schématiques (demi-remplissage) pour les électrons c et d dans le modèle de Anderson périodique (en haut). Les orbitales d de ce modèle correspondent aux fermions f de celui que nous étudions. Le spectre optique correspondant à $T = 0$ (en bas à gauche) et la structure de bande schématique avec les gaps direct et indirect (en bas à droite). Figure d'après Rozenberg *et al.* [150].

peut s'exprimer simplement en fonction des paramètres r, λ_0 et D :

$$\Delta_{gap} = -D + \sqrt{\left(\frac{D+\lambda_0}{2}\right)^2 + r^2} + \sqrt{\left(\frac{D-\lambda_0}{2}\right)^2 + r^2} \tag{4.10}$$

On vérifie que $\Delta_{gap} \to 0$ dans les limites $\lambda_0/D \to 0$ et $r/D \to 0$, ce qui permet de montrer que pour une densité d'états $\rho_0(\omega)$ à support non borné (telle qu'une lorentzienne ou une gaussienne), ce gap d'hybridation se réduit en un pseudo-gap, localisé en ω_s. On remarque aussi que dans les limites $\lambda_0/D \to 0$ et $r/D \to 0$, ce gap s'annule comme : $\Delta_{gap} = 2r^2/D$, les corrections suivantes étant d'ordre $max(\lambda_0^3/D^2, \lambda_0 r^2/D^2, r^4/D^3)$. Il s'agit là d'un gap indirect, correspondant à des excitations entre des niveaux de vecteurs d'onde $\vec{k}$ distincts. La figure 4.1 présente de manière schématique et pour le demi-remplissage la densité spectrale et les gaps direct et indirect intervenant pour le modèle de Anderson périodique. Le gap direct Δ_{dir} est de l'ordre de r, et correspond à des excitations à vecteur d'onde $\vec{k}$ constant. Le gap indirect Δ_{ind} de la figure 4.1 correspond au gap Δ_{gap} (expression (4.10)) qui apparaît dans la densité spectrale. Hors du demi-remplissage ($n_c < 1$), le gap d'hybridation est encore présent, mais à une énergie supérieure au niveau de Fermi, le système devenant alors conducteur. Dans une limite r/D faible, ce gap indirect Δ_{gap} correspond à des transitions énergétiquement bien plus faibles que celles liées au gap direct r, d'excitation à vecteur d'onde $\vec{k}$ constant.

4.4 Quasiparticules : bandes B^- et B^+

On définit la densité spectrale de quasiparticules[3] $\rho(\omega) = \rho_c(\omega) + \rho_f(\omega)$, et on obtient :

$$\boxed{\rho(\omega) = \left[1 + \frac{r^2}{(\omega + \mu + \lambda_0)^2}\right] \rho_0 \left(\omega + \mu - \frac{r^2}{\omega + \mu + \lambda_0}\right)} \tag{4.11}$$

On affecte d'un indice $+$ (respectivement $-$) la densité ρ dont on a restreint le support à la bande inférieure [4] B^- (respectivement à la bande supérieure B^+). On trouve que les fonctions $\rho^{\pm}(\omega)$ ainsi obtenues sont normées à 1, tout comme ρ_c et ρ_f. En réalité, on montre que ρ^+ et ρ^- correspondent précisément aux densités spectrales associées aux fonctions de Green des états de quasiparticules qui diagonalisent le Hamiltonien. En notant n^+ (respectivement n^-) les nombres de quasiparticules associées à la bande B^+ (respectivement B^-), on obtient, quelle que soit la température, une relation traduisant la conservation du nombre total de particules :

$$\frac{1}{2} + \frac{n_c}{2} = n^- + n^+ \tag{4.12}$$

A température nulle, le remplissage des bandes B^- et B^+ dépend de la concentration électronique n_c. En dessous du demi-remplissage électronique ($n_c < 1$), on a $n^+ = 0$, et toutes les quasiparticules correspondent à des excitations dans la bande B^-. Le système est métallique et ses propriétés thermodynamiques sont celles d'un liquide de Fermi. Au demi-remplissage ($n_c = 1$), B^- est complètement remplie alors que B^+ est vide. Le potentiel chimique μ est alors au milieu du gap qui sépare les deux bandes, et le système est isolant. Au dessus du demi-remplissage ($n_c > 1$), B^- reste pleine et le potentiel chimique appartient à B^+.

Cette conservation du nombre total de quasiparticules constitue un point de départ important de la démonstration du théorème de Luttinger[5].

4.5 Théorème de Luttinger

Laissons de coté le cas du demi-remplissage ($n_c = 1$), qui correspond à une phase isolante, pour nous intéresser à la phase dopée en trous[6] ($n_c < 1$). A température nulle, le nombre total de particules est relié à la densité spectrale de quasiparticules via la relation suivante, obtenue en additionnant les équations de col (4.4) et (4.5) :

$$\frac{1}{2} + \frac{n_c}{2} = \int_{-\infty}^{0} d\omega \rho(\omega) \tag{4.13}$$

[3] Cette définition correspond aussi à la densité des états de quasiparticules diagonalisant l'action effective du système.

[4] Les bandes $B^{\pm}$ sont définies rigoureusement au début de la section 4.3.

[5] Une dérivation plus générale du théorème de Luttinger est fournie en annexe G, dans laquelle une self-énergie a été rajoutée à la bande f. Cependant, en l'absence de cette self-énergie, le résultat de ce théorème peut être obtenu directement.

[6] Les résultats obtenus pour $n_c < 1$ seront généralisables au cas $n_c > 1$ par simple symétrie particule-trou.

Où $\rho(\omega)$ est la densité spectrale des quasiparticules, donnée par l'expression (4.11). Après le changement de variable $\epsilon = \omega + \mu - r^2/(\omega + \mu + \lambda_0)$, cette relation devient :

$$\frac{1}{2} + \frac{n_c}{2} = \int_{-\infty}^{\mu - r^2/(\mu+\lambda_0)} d\epsilon \rho_0(\epsilon) \tag{4.14}$$

On en déduit une relation très générale que doivent vérifier les paramètres r, λ_0 et μ lorsque $T = 0$:

$$\boxed{-\frac{r^2}{\mu + \lambda_0} = \mu_0(n_c + 1) - \mu \equiv \Delta\mu \qquad (4.15)}$$

$\mu_0(n_c + 1)$ est la valeur du potentiel chimique qui correspondrait à une densité de porteurs de $(n_c + 1)/2$ (par site et par composante de spin) qui seraient placés sur le même réseau sans l'interaction Kondo. Cette propriété est en fait une vérification directe du théorème de Luttinger, qui traduit, pour notre modèle, l'élargissement de la surface de Fermi, lié à la délocalisation des orbitales f (fermions représentant les spins du modèle Kondo).

4.6 Masse effective

Le théorème de Luttinger (équation (4.5)) nous permet d'exprimer de manière simple la valeur au niveau de Fermi de la densité d'états de quasiparticules (dont l'expression générale est donnée par la relation (4.11)) :

$$\rho(\omega = 0) = \left[1 + \frac{(\Delta\mu)^2}{r^2}\right] \rho_0(n_c + 1) \tag{4.16}$$

Tout d'abord, cette expression permet de retrouver de manière continue la densité d'états nulle correspondant à l'isolant Kondo. En effet, au demi-remplissage, $n_c = 1$ puis $\rho_0(n_c + 1) = 0$. Ensuite, si on définit la masse effective par $m^\star = \rho(\omega = 0)/\rho_0(\omega = 0)$, on trouve :

$$m^\star = \left[1 + \frac{(\Delta\mu)^2}{r^2}\right] \frac{\rho_0(n_c + 1)}{\rho_0(n_c)} \tag{4.17}$$

L'évolution de $m^\star$ en fonction du remplissage n_c est présentée figure 6.20. Nous verrons par la suite que dans une limite de couplage Kondo faible, le rapport $\Delta\mu/r$ peut devenir beaucoup plus grand que 1, ce qui correspond à une masse effective elle aussi beaucoup plus grande que 1. Ce terme $(\Delta\mu/r)$ provenant de la contribution de la densité ρ_f, nous pouvons interpréter cette augmentation de la masse effective des $n_c + 1$ quasiparticules comme étant liée à la lourdeur effective des fermions f, qui auront d'autant plus envie de rester localisés que leur hybridation avec les électrons de conduction (via le couplage Kondo) sera faible. Parallèlement, si on fixe le couplage Kondo, le rapport $\rho_0(n_c + 1)/\rho_0(n_c)$ a tendance à augmenter lorsque le système est appauvri en électrons de conduction, jusqu'à faire à nouveau diverger la masse effective $m^\star$ dans la limite des faibles concentrations $n_c \to 0$ (voir figure 6.20). Par ce simple modèle, nous pouvons donc déjà pressentir deux processus distincts permettant d'accroître considérablement la masse effective (diminution du couplage Kondo J_K et diminution du nombre de porteurs n_c).

Chapitre 5

Résolution analytique des équations de col

Le système constitué par les équations de col (4.3), (4.4) et (4.5) a été résolu analytiquement dans plusieurs limites, ce qui constitue une partie importante des résultats obtenus dans le cadre de cette thèse.
Les inconnues de ce système sont les potentiels chimiques μ et λ_0, ainsi que l'hybridation effective r. Les paramètres avec lesquels il est possible de jouer sont le couplage Kondo J_K, la température T, le remplissage électronique n_c, et la forme ρ_0 de la densité spectrale libre de la bande de conduction.

Après l'avoir définie, je présente tout d'abord des résultats relatifs à la température de Kondo T_K du modèle. Ensuite, j'expose la solution exacte des équations de col à $T = 0$, obtenue d'une part pour une densité spectrale $\rho(\omega)$ constante et un couplage Kondo J_K quelconque, et d'autre part pour une densité $\rho(\omega)$ quelconque et un couplage Kondo $J_K \to 0$.
Les détails des calculs sont fournis dans les annexes A, B et C.

5.1 Définition des échelles de température

La symétrie particule-trou nous permet de supposer que $n_c < 1$. Les propriétés de liquide de Fermi s'obtiennent donc simplement à partir de la densité d'états de quasiparticules au niveau de Fermi, $\rho(\omega = 0) = \rho^-(\omega = 0)$.

Aux plus basses températures peuvent apparaître simultanément deux premières sortes d'excitations : d'une part, des excitations de type particule-trou à l'intérieur de la seule bande B^- ; et d'autre part, une évolution des quasiparticules avec T, qui se traduit par une déformation de la bande [1] B^-. Cette première échelle d'excitation définit la température de cohérence T_c du système. A l'opposé, lorsque la température devient de l'ordre du gap, la proportion d'états excités dans la bande B^+ commence brutalement à être significative. Alors, le gap se referme (voir figures 6.3 et 6.11), et on observe une transition vers un état dans lequel les électrons de conduction et les fermions f ne se "voient" plus. Cette transition définit une deuxième

[1] Les bandes $B^\pm$ sont défi nies rigoureusement au début de la section 4.3.

échelle, la température de Kondo T_K.

Nous voyons ainsi apparaître de manière simple deux échelles de température qui caractérisent le système dans sa phase Kondo. S'il semble évident que la température de cohérence est plus faible que la température de Kondo, on peut se demander dans quelle mesure le rapport entre ces deux échelles peut dépendre de la concentration. On constate que T_c est caractérisée à partir de la densité d'états de quasiparticules ρ^- à $T = 0$, qui correspond à une surface de Fermi contenant $n^- = (1 + n_c)/2$ particules. Par contre, lorsque $T = T_K$, les électrons de conduction et les fermions f devenant indépendants, la densité d'états de quasiparticules est alors ρ_0, et la surface de Fermi[2] ne contient plus que $n_c/2$ particules par composante de spin. Cet élargissement de la surface de Fermi entre $T = T_K$ et $T = 0$ laisse donc pressentir que l'effet d'un épuisement en électrons aura des conséquences sur le rapport entre température de cohérence et température de Kondo, ce qui n'est pas le cas pour un modèle à une seule impureté.

De manière plus rigoureuse, nous pouvons définir pour notre modèle une échelle d'énergie $T^\star$ et une échelle de température T_K.
L'énergie $T^\star$ est définie à température nulle à partir de la densité d'états de quasiparticules au niveau de Fermi : $T^\star = 1/\rho(\omega = 0)$. Cela définit une énergie caractéristique du liquide de Fermi obtenu à très basse température, qui, loin du demi-remplissage, fournit une bonne estimation de la température T_c.
La température de Kondo T_K est la température de décondensation du boson esclave, c'est à dire la température pour laquelle le paramètre r devient nul [3].

5.2 Température de Kondo

La figure 6.14 présente la dépendance de T_K par rapport à n_c.

5.2.1 Réseau et modèle à une impureté

Exprimées pour $r = 0$, les équations de col obtenues pour le réseau Kondo (système (4.1)) et pour le modèle à une seule impureté (équations (3.10), (3.11) et (3.12)) deviennent rigoureusement identiques, à savoir :

$$\left\{\begin{array}{rcl} -\frac{1}{J_K} & = & \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{\beta_K}\sum_n \frac{1}{(i\omega_n+\mu+\lambda_0)\left(i\omega_n+\mu-\epsilon_{\vec{k}}\right)} \\ \frac{1}{2} & = & \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{\beta_K}\sum_n \frac{1}{(i\omega_n+\mu+\lambda_0)} \\ \frac{n_c}{2} & = & \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{\beta_K}\sum_n \frac{1}{\left(i\omega_n+\mu-\epsilon_{\vec{k}}\right)} \end{array}\right. \tag{5.1}$$

[2] La notion de surface de Fermi à $T = T_K$ garde un sens lorsque le couplage est faible, T_K étant dans ce cas très inférieure à la largeur de bande.

[3] Cette défi nition de la température de Kondo correspond pour notre modèle à une température de transition du deuxième ordre. Pour un modèle Kondo plus réaliste (ayant par exemple la symétrie $SU(2)$), cette température correspond en réalité à un cross-over.

Les deux dernières équations sont vérifiées pour $\mu = -\lambda_0 = \mu_0(n_c)$, où $\mu_0(n_c)$ est le potentiel chimique correspondant à n_c électrons à la température T_K, sur le même réseau et sans interaction. Il ne reste alors plus que la première équation, qui après intégration dans le plan complexe et introduction de la densité spectrale "libre" ρ_0 devient :

$$\boxed{\frac{2}{J_K} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{tanh(\omega/2T_K)}{\omega} \rho_0(\mu + \omega) \qquad (5.2)}$$

Il s'agit de l'équation permettant de relier la température de Kondo T_K du réseau ou de l'impureté au couplage Kondo J_K. On constate que la fonction $\frac{tanh(\omega/2T_K)}{\omega}$ est paire. Cela signifie que, même dans une limite de couplage faible, les états d'excitations de trous ($\omega > 0$) vont tout autant contribuer au calcul de T_K que les états d'excitations de particules ($\omega < 0$). A l'inverse, nous verrons plus loin que l'énergie $T^\star$ du réseau est déterminée à $T = 0$, la limite $T \to 0$ étant dans ce cas prise avant la limite couplage faible. Cela signifie que, en raison des facteurs de Fermi présents dans les équations de col, la seule connaissance du spectre d'excitations de trous devrait suffire pour déterminer $T^\star$, alors que la connaissance de tout le spectre ρ_0 est nécessaire au calcul de T_K. De plus, la contribution des spins implique que dans le régime de liquide de Fermi, les propriétés du système sont obtenues au niveau de la grande surface de Fermi, contenant $n_c + 1$ quasiparticules (voir la sous-section 6.4), tandis que le système redevient un métal normal au dessus de la température de Kondo, avec, en couplage faible, des propriétés déterminées par la surface de Fermi à n_c électrons [4]. Cette différence laisse pressentir la différence de comportement entre T_K et $T^\star$ lorsque le système est épuisé et brise la symétrie particule-trou.

5.2.2 Limite couplage faible

L'équation (5.2) vérifiée par T_K est formellement identique à l'équation de fermeture du gap de la théorie BCS, et il est possible de développer une expression analytique de T_K dans la limite d'un couplage faible. Dans cette limite, on s'attend à obtenir T_K faible, ce qui nous permet d'effectuer un développement de type Sommerfeld. En supposant que $\rho_0(\omega)$ possède un cut-off en $\pm D$, on trouve (voir annexe B), dans la limite $J_K \to 0$ (et donc $T_K \to 0$) :

$$\boxed{T_K(n_c) = F_K(n_c) \left(D^2 - \mu_0^2\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{J_K \rho_0(\mu_0)}\right\} \qquad (5.3)}$$

Avec

$$F_K(n_c) = \alpha \exp\left[\int_{-(D+\mu_0)}^{D-\mu_0} \frac{d\omega}{|\omega|} \frac{\rho_0(\mu_0 + \omega) - \rho_0(\mu_0)}{2\rho_0(\mu_0)}\right] \qquad (5.4)$$

$\alpha \approx 1.13387$ est un facteur numérique.

[4] La surface de Fermi n'existe rigoureusement que à $T = 0$, mais en couplage faible, on peut étendre cette défi nition à la température $T_K << D$.

5.2.3 Limite couplage fort

La limite d'un couplage Kondo fort n'est à priori pas d'un grand intérêt physique dans la mesure où l'on considère le modèle Kondo comme étant déjà une approximation "couplage faible" du modèle de Anderson. Cependant, il peut être instructif de considérer cette limite, puisque le modèle Kondo à couplage faible antiferromagnétique à une seule impureté se renormalise vers un point fixe de couplage fort. Supposons que la densité $\rho_0(\omega)$ possède un cut-off en $\pm D$. Dans la limite d'un couplage Kondo élevé, on a $T_K >> D$; alors, dans l'équation (5.2), on peut remplacer $\frac{tanh(\omega/2T_K)}{\omega}$ par $1/2T_K$. On obtient finalement :

$$T_K = J_K/4 \tag{5.5}$$

5.3 Solution pour $\rho_0(\omega)$ constante et J_K quelconque

5.3.1 Solution exacte à $T = 0$

Intéressons nous désormais aux équations de col (4.3), (4.4) et (4.5). Considérons dans un premier temps une densité d'états ρ_0 constante, avec un cut-off $\pm D$:

$$\rho_0(\omega) = \frac{\theta(D - |\omega|)}{2D}$$

Où θ désigne la fonction de Heaviside. Pour ce cas particulier les équations de col (4.3), (4.4) et (4.5) s'intègrent à $T = 0$ quelle que soit la valeur du couplage J_K et on obtient, en supposant que le potentiel chimique appartient à la bande inférieure B^- (ce qui n'est pas restrictif, étant donnée la symétrie particule-trou) :

$$\begin{cases} r^2/D^2 &= n_c\xi/(1-\xi)^2 \\ \lambda_0/D &= (1-n_c)/(1-\xi) \\ \mu/D &= n_c - 1/(1-\xi) \end{cases} \tag{5.6}$$

Où l'on a défini

$$\boxed{\xi = \exp\{-2D/J_K\} = \exp\{-1/J_K\rho_0\} \qquad (5.7)}$$

On trouve, pour la largeur du gap d'hybridation à $T = 0$ (d'après l'expression (4.10)) :

$$\Delta_{gap} = \frac{D}{1-\xi}\left[\frac{n_c}{2} + \frac{3}{2}\xi - 1 + \sqrt{1 - n_c - \xi + n_c\xi + \left(\frac{n_c+\xi}{2}\right)^2}\right] \tag{5.8}$$

La densité de quasiparticules au niveau de Fermi, donnée par l'expression (4.16), vaut :

$$\rho(\omega = 0) = \frac{1}{2D}m^* \tag{5.9}$$

La masse effective (expression (4.17)) est donnée par :

$$m^* = 1 + \frac{(1-\xi)^2}{n_c \xi} \tag{5.10}$$

Dans les limites de couplage faible ($J_K << D$) ou fort ($J_K >> D$), ces expressions se simplifient, et on obtient :

	Couplage faible ($J_K \ll D$)	Couplage fort ($J_K \gg D$)
ξ	$\to 0$	$\to 1$
r^2/D	$n_c \xi D$	$n_c J_K^2/(4D)$
λ_0	$(1-n_c)D$	$(1-n_c)J_K/2$
μ	$-(1-n_c)D$	$-J_K/2 + n_c D$
Δ_{gap}	$\xi D/(1-n_c/2)$	$(1+n_c)J_K/2$
m^*	$1/(n_c\xi)$ (0 si $n_c = 1$)	1 (0 si $n_c = 1$)
T_K	$\alpha \xi D \sqrt{n_c(2-n_c)}$	$J_K/4$

(5.11)

La limite couplage faible est intéressante car elle correspond à la réalité physique des systèmes Kondo. La limite couplage fort est aussi intéressante car plus intuitive.

5.3.2 Limite couplage faible

On constate que les différentes échelles d'énergies D/m^*, $\Delta_{gap}(T = 0)$ et T_K s'annulent toutes comme $\xi = \exp -\frac{1}{J_K \rho_0}$ dans la limite $J_K \rho_0 \to 0$, mais avec un préfacteur qui dépend du remplissage électronique n_c. Ainsi, en fixant le remplissage, nous obtenons des échelles d'énergies proportionnelles entre elles, avec à l'approche du demi-remplissage ($n_c = 1$), $T_K(n_c = 1) \sim \Delta_{gap}(n_c = 1) \sim 1/\rho(n_c = 1^-) \sim D\xi$.

5.3.3 Limite couplage fort

Comme pour le cas du couplage faible, nous trouvons que Δ_{gap} et T_K dépendent du couplage de la même manière, mais que le rapport de ces deux quantités reste fortement dépendant du remplissage n_c. Nous obtenons par contre une densité d'états de quasiparticules au niveau de Fermi $\rho(\omega = 0) \propto D$ très inférieure à T_K. Ces résultats de couplage fort valident la description introduite par Nozières [126, 127] et Lacroix [96] pour le modèle à symétrie $SU(2)$ (voir aussi la sous-section 2.1.1).

A haute température ($T \gg J_K \gg D$), électrons et moments magnétiques locaux ne se "voient" pas.

Puis, lorsque la température devient du même ordre que J_K, des corrélations antiferromagnétiques apparaissent entre les densités locales de spin électroniques et les spins localisés des impuretés. Pour un modèle Kondo de symétrie $SU(2)$, il s'agit de la formation d'états singulets locaux incohérents. Pour le modèle que nous avons considéré ($SU(N = \infty)$), ce phénomène se traduit par une transition de phase du deuxième ordre (paramètre d'ordre r), survenant à la température T_K. Cette température de transition correspond à l'énergie d'excitation entre une généralisation à $SU(N)$ de l'état singulet de $SU(2)$ et une généralisation à $SU(N)$ des états triplets de $SU(2)$. En couplage fort, cette énergie d'excitation est indépendante du remplissage, est indépendante du fait que nous considérions un réseau d'impuretés ou une impureté seule, et vaut $T_K = J_K/4$ pour notre approche $SU(N = \infty)$. A cette température, une différence physique importante demeure entre un réseau d'impuretés Kondo et un modèle à une seule impureté : l'entropie de l'impureté seule est déjà complètement gelée, tandis que celle du réseau d'impuretés est encore élevée, en raison de l'incohérence entre les différents singulets localisés. La cohérence du liquide de Fermi apparaîtra alors pour le réseau à une température beaucoup plus basse.

Lorsque la température continue à décroître ($T_K > T$), une fraction $n_c/2$ (par site et composante de spin) des fermions f ont été rendus inertes par leurs corrélations avec les électrons de conduction. Le réseau Kondo devient alors équivalent à N systèmes indépendants de $(1 - n_c)/2$ fermions sans spins placés sur le même réseau. Alors, puisque nous considérons une densité d'états constante ρ_0, les quasiparticules ainsi obtenues possèdent exactement la même masse effective que les électrons de conduction sans interaction, ce qui permet d'expliquer le résultat $m^* = 1$. Pour un système plus réaliste, $(1-n_c)/2$ fermions n'ont pas la même densité d'états que n_c électrons placés sur le même réseau, et on devrait obtenir une masse effective différente de 1. On commence ainsi à percevoir certaines limitations de l'utilisation d'une d.o.s. constante.

5.3.4 Intérêt et limites d'une densité constante

En étant exactement soluble à $T = 0$, ce modèle simplifié nous a permis de capturer sans trop d'efforts une partie de l'effet Kondo, notamment le comportement exponentiel des échelles énergétiques dans la limite couplage faible. Il nous a aussi permis de percevoir semi-quantitativement l'effet de l'épuisement en électrons de conduction, qui se manifeste par un préfacteur de l'exponentielle dépendant de n_c dans l'expression des échelles d'énergies caractéristiques du système. De plus, la connaissance de la solution exacte pour J_K/D quelconque nous a permis de déterminer numériquement les domaines de validité des hypothèses de couplage faible ou fort. Ainsi, par exemple, nous avons constaté qu'il suffit de prendre $J_K < D$ pour que la limite couplage faible fournisse une très bonne approximation pour les solutions des équations de col. En effet, en prenant par exemple $J_K = 1.5$ et $D = 2$, on trouve $\xi = \exp -\frac{1}{J_K \rho_0} \approx 0.07 << 1$.

Par contre, en considérant une d.o.s. constante, nous introduisons des discontinuités peu physiques en bord de bande, dont l'effet pourrait être d'autant plus important que l'on choisira n_c petit.

L'une de ces pathologie est la discontinuité de la masse effective, qui passe d'une valeur nulle au demi-remplissage à une valeur finie pour n_c infiniment proche de 1. Cette discontinuité n'a aucune justification physique. En effet, dans la limite thermodynamique, il est inconcevable de pouvoir rendre un isolant Kondo conducteur en lui retirant un seul électron. L'origine de la discontinuité de m^* en $n_c = 1$ se comprend bien dans la limite couplage fort. En effet, le nombre de spin célibataires, $(1 - n_c)/2$, tend vers zéro à l'approche du demi-remplissage. Il est donc faux de supposer (implicitement) que leur densité d'états ρ_0 est du même ordre de grandeur que celle d'un système de n_c électrons sans interaction, et la renormalisation de la bande électronique joue un rôle important.
Une autre de ces pathologies est la persistance d'un gap d'hybridation fini, lorsque l'on considère la limite $n_c \to 0$ à couplage J_K constant. On peut ainsi trouver des relations aberrantes mais exactes, du type : $\Delta_{gap}(n_c = 0) = \Delta_{gap}(n_c = 1)/2$ lorsque $J_K \to 0$! ! ! Ce type de "mauvaise" relation vient du fait que, en considérant une densité d'états constante, on suppose implicitement que $\xi = \exp -2D/J_K$ ne dépend pas du remplissage n_c.
Ces problème sont d'autant plus gênants que nous nous intéressons justement à l'effet d'une variation de n_c sur les échelles énergétiques du système...

On pourrait cependant imaginer de généraliser ces résultats à ceux d'une densité $\rho_0(\omega)$ quelconque, au moins dans la limite de couplage faible ; en effet, si on suppose que dans cette limite, les propriétés du liquide de Fermi sont contrôlées uniquement par des électrons de conduction situés dans une gamme d'énergies de largeur T_K autour du niveau de Fermi d'une bande non renormalisée, alors, toujours dans la limite couplage faible, il suffirait de remplacer $1/2D$ par $\rho_0(n_c)$ (densité d'états au niveau de Fermi). Si une telle substitution permet effectivement d'annuler $\Delta(n_c = 0)$ tout en gardant $\Delta(n_c = 1)$ fini, elle ne fournit pas pour autant le résultat exact.

En effet, via le couplage Kondo, les degrés de liberté des spins contribuent à l'élargissement de la surface de Fermi, augmentant de $1/2$ le nombre moyen de quasiparticules par site et par composante de spin (voir sous-section 6.4). Par conséquent, même dans la limite d'un couplage faible, il n'est pas forcément évident que seule la densité $\rho_0(n_c)$ intervienne dans le calcul des quantités physiques. Alors, on peut ainsi se demander si les propriétés du liquide de Fermi dépendent de $\rho_0(n_c)$, de $\rho_0(n_c + 1)$, ou de toute la bande $\rho_0(\omega)$ (voir figure 6.12).
Afin de répondre à cette question, le problème a été résolu densité spectrale quelconque, dans la limite couplage faible.

5.4 Solution pour $\rho_0(\omega)$ quelconque et J_K faible

5.4.1 Solution pour $T = 0$

Les paramètres r, λ_0 et μ sont déterminés par les équations de col (4.3), (4.4) et (4.5). Afin d'accéder analytiquement à l'échelle énergétique la plus basse (température de cohérence), nous nous intéressons dans un premier temps à la solution de ces équations pour $T = 0$. Elles deviennent alors :

$$\left\{\begin{array}{rcl} -\frac{1}{J_K} & = & \int_{\omega_1}^{0} \frac{d\omega}{\omega+\mu+\lambda_0}\rho_0(\mu+\omega-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}) \\ \frac{1}{2} & = & r^2\int_{\omega_1}^{0} \frac{d\omega}{(\omega+\mu+\lambda_0)^2}\rho_0(\mu+\omega-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}) \\ \frac{n_c}{2} & = & \int_{\omega_1}^{0} d\omega\rho_0(\mu+\omega-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}) \end{array}\right. \tag{5.12}$$

Le bord de bande $\omega_1 = -\mu - (D+\lambda_0)/2 - \sqrt{[(D-\lambda_0)/2]^2 + r^2}$ intervenant dans ces expressions est défini au début de la section 4.3.
Dans la limite d'un couplage Kondo faible, nous développons le système (5.12) constitué par les trois équations de col selon la technique détaillée en annexe A, et en supposant que la quantité $\Delta\mu = \mu_0(n_c+1) - \mu$ est d'ordre D. Ces trois équations deviennent, respectivement :

$$\left\{\begin{array}{rcl} -\frac{1}{J_K} & = & \rho_0(-\lambda_0)ln\left(\frac{r^2}{(D+\mu)\Delta\mu}\right) - \int_{-D-\mu}^{\Delta\mu} d\omega\left[\frac{\rho_0(-\lambda_0+\omega)-\rho_0(-\lambda_0)}{|\omega|}\right] \\ \frac{1}{2} & = & \int_0^{\Delta\mu} d\omega\rho_0(-\lambda_0+\omega) \\ \frac{n_c}{2} & = & \int_{-D-\mu}^{0} d\omega\rho_0(-\lambda_0+\omega) \end{array}\right. \tag{5.13}$$

Les deux dernières équations sont vérifiées pour

$$\boxed{\begin{array}{rr} -\lambda_0 = \mu = \mu_0(n_c) & (5.14) \\ \Delta\mu = \mu_0(n_c+1) - \mu_0(n_c) & (5.15) \end{array}}$$

La première donne alors :

$$\boxed{r^2 = F^*(n_c)(D+\mu)\Delta\mu \exp\left\{-\frac{1}{J_K\rho_0(\mu)}\right\} \qquad (5.16)}$$

avec

$$F^*(n_c) = \exp\int_{-D-\mu}^{\Delta\mu} d\omega\left[\frac{\rho_0(-\lambda_0+\omega)-\rho_0(-\lambda_0)}{|\omega|}\right] \tag{5.17}$$

On remarque que l'énergie r^2/D se distingue de la température de Kondo[5] uniquement par un préfacteur indépendant du couplage, mais dépendant du remplissage électronique.

[5] Voir expression (5.3.

5.4.2 Corrections d'ordre T^2

En différenciant les équations de col par rapport à T, il est possible de calculer la première correction en température pour r^2, λ_0 et μ (voir annexe C).
On trouve, quelle que soit la valeur du couplage J_K, que cette correction est d'ordre T^2 pour ces trois paramètres ; ce résultat général est notamment utile pour le développement en température de grandeurs thermodynamiques telles que l'entropie ou la chaleur spécifique (voir annexe E). De plus, dans la limite $J_K \to 0$, ces paramètres se mettent sous la forme :

$$\boxed{\begin{aligned} r^2 &= r^2_{(0)}\left[1 - A(n_c)\left(\frac{T}{r^2/D}\right)^2 + \mathcal{O}\left(T^3\right)\right] && (5.18)\\ \lambda_0 + \mu &= (\lambda_0^{(0)} + \mu^{(0)})\left[1 - B(n_c)\left(\frac{T}{r^2/D}\right)^2 + \mathcal{O}\left(T^3\right)\right] && (5.19)\\ \lambda_0 &= \lambda_0^{(0)}\left[1 - C(n_c, J_K)\left(\frac{T}{r^2/D}\right)^2 + \mathcal{O}\left(T^3\right)\right] && (5.20)\end{aligned}}$$

$$\begin{aligned} A(n_c) &= \frac{\pi^2}{6}\left(\frac{\Delta\mu}{D}\right)^2 \frac{\rho_0(n_c+1)}{\rho_0(n_c)}\\ B(n_c) &= -\frac{\pi^2}{6}\left(\frac{\Delta\mu}{D}\right)^2 \left[2 - \frac{\rho_0(n_c+1)}{\rho_0(n_c)} + \Delta\mu\frac{\rho'_0(n_c+1)}{\rho_0(n_c+1)}\right]\\ C(n_c, J_K) &= \frac{\pi^2}{6}\frac{\Delta\mu}{\lambda_0}\frac{r^2}{D^2}\frac{\rho_0(n_c+1)}{\rho_0(n_c)}\left[2 - \frac{\rho_0(n_c+1)}{\rho_0(n_c)} - \frac{\Delta\mu\rho'_0(n_c)}{J_K(\rho_0(n_c))^2}\right]\end{aligned}$$

La notation '(0)' permet de préciser que la valeur des paramètres est prise à $T = 0$. Elle est utilisée pour les relations précédentes, où elle permet d'éviter toute ambiguïté. Afin d'alléger les expressions, je l'ai volontairement omise dès qu'elle est superflue.

Lorsque $J_K \to 0$, la décroissance exponentielle de r implique que $r/J_K \to 0$. Alors, $C(n_c, J_K = 0) = 0$ tandis que $A(n_c)$ et $B(n_c)$ sont finies et indépendantes de J_K. Ainsi, en augmentant la température à partir de $T = 0$, les variations relatives de λ_0 et de μ sont négligeables devant les variations relatives de r^2/D et de $\lambda_0 + \mu$. Ce résultat n'a rien de surprenant dans la mesure où les deux premières énergies sont d'ordre D, tandis que les deux dernières sont exponentiellement petites. Pour n_c fixé, Il apparaît ainsi une échelle de température r^2/D à partir de laquelle les paramètres r^2/D et $\lambda_0 + \mu$ commencent à s'écarter de manière significative de leur valeur à $T = 0$.
Dès que l'on s'éloigne du demi-remplissage (i.e. pour $n_c \neq 1$), la fonction $\rho'_0(n_c+1)/\rho_0(n_c+1)$ (présente dans l'expression de $B(n_c)$) ne diverge pas, et on obtient $A(n_c) \propto B(n_c)$. Alors, r^2/D et $\lambda_0 + \mu$ ont la même température caractéristique.
A l'inverse, à l'approche du demi-remplissage (i.e. pour $n_c \to 1$), $B(n_c)$ diverge comme $\rho'_0(n_c+1)/\rho_0(n_c+1)$, tandis que $A(n_c)$ reste finie. La température caractéristique de $\lambda_0 + \mu$ est alors beaucoup plus faible que celle de r^2/D, en raison de la proximité du gap de l'isolant Kondo.

Chapitre 6

Quantités physiques

Dans ce chapitre sont rassemblés les principaux résultats physiques obtenus pour le modèle dans le cadre de cette thèse. Les résultats analytiques sont issus de la résolution analytique des équations de col (4.3), (4.4) et (4.5) présentée au chapitre 5. Toutes les courbes ont été obtenues par une résolution numérique de ces mêmes équations de col, pour laquelle la densité spectrale ρ_0 des électrons de conduction a été choisie semi-elliptique[1] et de largeur $2D = 4$ unités arbitraires.

6.1 Paramètre r

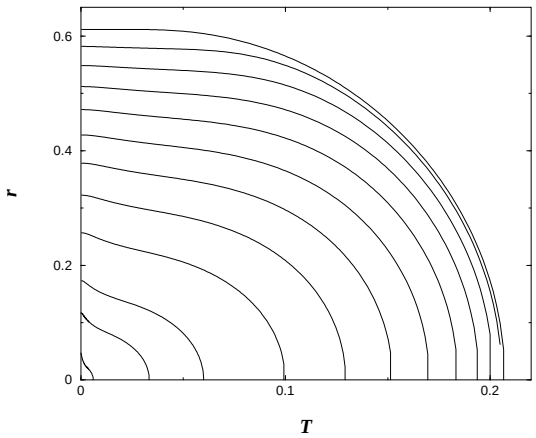


FIG. 6.1: Courbes $r(T)$. De haut en bas, n_c vaut respectivement 1, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1, 0.05 et 0.01. Résultat numérique. $D = 2$ et $J_K = 1.5$.

[1] Voir figure 9.5. Cette densité spectrale possède notamment l'avantage d'avoir la même singularité de bord de bande qu'un réseau tridimensionnel.

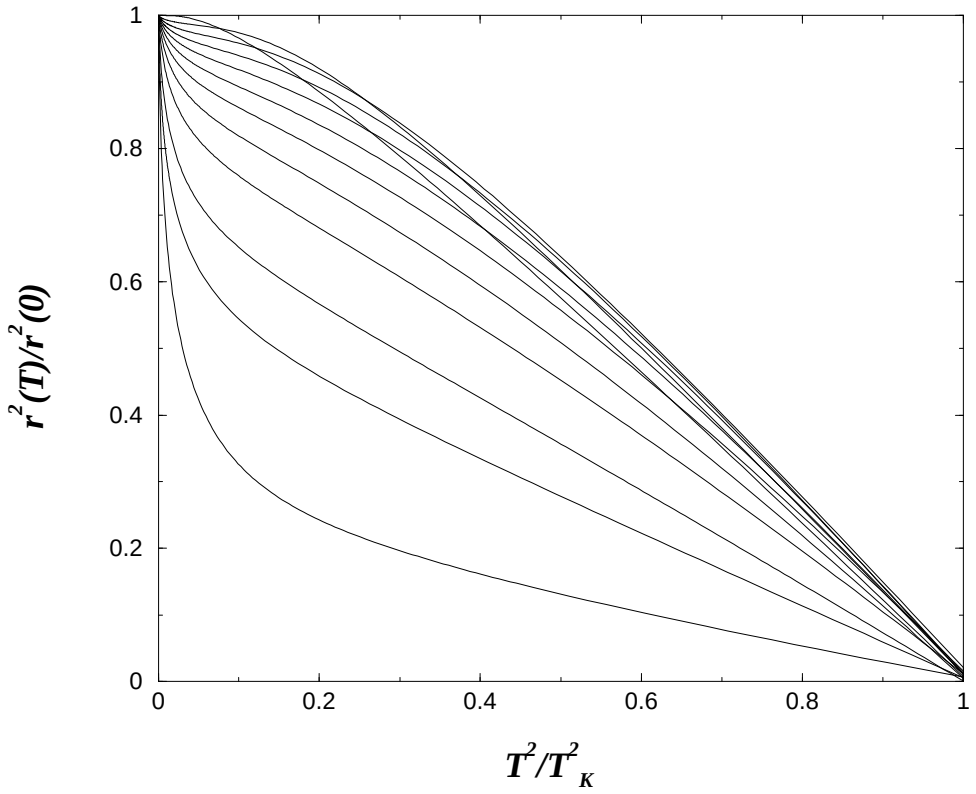
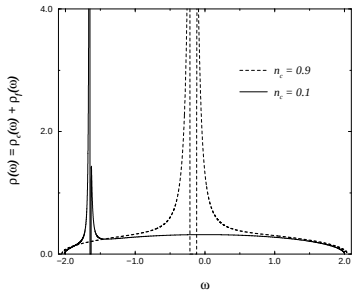


FIG. 6.2: Courbes $r^2(T)/r^2(T=0)$ en fonction de $(T/T_K)^2$. De haut en bas (si on ordonne les courbes à partir des très basses températures), n_c vaut respectivement 1, 0.9, 0.8, 0.7, 0.6, 0.5, 0.4, 0.3, 0.2, 0.1, 0.05 et 0.01. Résultat numérique. $D=2$ et $J_K=1.5$.

La figure 6.2 présente la variation du paramètre normalisé $r^2(T)/r^2(T=0)$ en fonction de $(T/T_K)^2$. Chaque courbe correspond à une valeur de remplissage électronique fixée. Tout d'abord, il ressort de ces courbes que l'hybridation effective normalisé $r(T)/r(T=0)$ n'est pas une fonction universelle de T/T_K, mais dépend aussi très fortement du remplissage électronique. On constate cependant que, près de la température de Kondo, $r^2(T)$ s'annule comme $(T-T_K)^2$, l'exposant étant universel, mais le coefficient de proportionnalité ne l'étant pas. Ce comportement n'est cependant pas très intéressant du point de vue pratique, puisque la transition obtenue ici est un artefact de l'approche grand-N, la température de Kondo correspondant en réalité à un crossover lorsque $N=2$. On remarque la présence d'un changement de convexité des courbes obtenues, selon que n_c est proche ou non du demi-remplissage. Ce changement de convexité et l'universalité de l'exposant critique garantissent la non universalité par rapport à n_c des courbes obtenues.

6.2 Densités spectrales

6.2.1 Spectre des quasiparticules



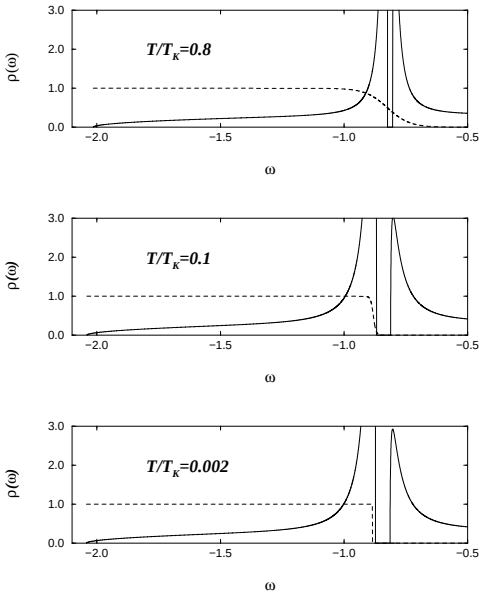


FIG. 6.3: (figure de gauche) Densité spectrale des quasiparticules $\rho(\omega) = \rho_c(\omega) + \rho_f(\omega)$ à $T \approx 0$ pour $n_c = 0.9$ (pointillés) et $n_c = 0.1$ (traits pleins). Résultat numérique. $D = 2$ et $J_K = 1.0$.

FIG. 6.4: (figures de droite) Effet de la température sur la densité spectrale de quasiparticules $\rho(\omega)$ (trait plein) pour un remplissage électronique intermédiaire ($n_c = 0.5$). De haute en bas, T/T_K vaut respectivement 0.8, 0.1 et 0.002. La fonction de Fermi est indiquée en pointillés. Résultat numérique. $D = 2$ et $J_K = 1.0$.

La figure 6.3 présente la densité spectrale des quasiparticules $\rho(\omega) = \rho_c(\omega) + \rho_f(\omega)$ à $T \approx 0$ correspondant à deux valeurs de remplissage électronique. Dans les deux cas, la densité spectrale est constituée d'un fond semi-elliptique de largeur environ $2D$, qui provient de la contribution de la bande de conduction (on rappelle que ces simulations numériques ont été obtenues pour une densité libre ρ_c^0 de largeur $2D$). Près du niveau de Fermi (qui varie avec n_c), apparaît le pic de la résonance Kondo (d'Abrikosov-Suhl), qui présente un gap [2]. On observe une diminution de la largeur de la résonance lorsque le système est épuisé en électrons, accompagnée d'une disymétrisation de ce double pic.

[2] Le gap d'hybridation introduit par notre méthode de calcul deviendrait un pseudo-gap avec une approche plus réaliste.

6.2.2 Evolution des bords de bandes

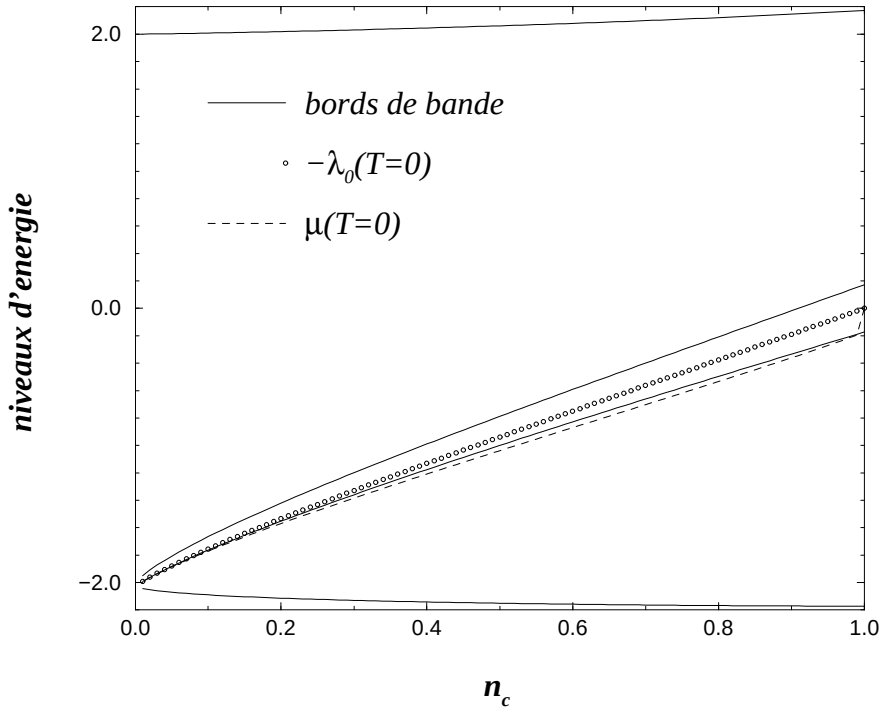


FIG. 6.5: Evolution des bords de bande des quasiparticules, du gap, et du potentiel chimique en fonction de n_c. Les quatre traits pleins délimitent les cut-off de haute fréquence et le gap. Les pointillés représentent la position du potentiel chimique μ. Les cercles indiquent le niveau des orbitales localisées $-\lambda_0$. Résultat numérique. $D = 2$, $J_K = 1.5$ et $T << T_K$.

La figure 6.5 présente l'évolution du support de la densité spectrale de quasiparticules en fonction du remplissage électronique n_c. Il apparaît ainsi que le gap se referme lorsque $n_c \to 0$, et que sa position se déplace continuement avec les potentiels μ et $-\lambda_0$. Le potentiel chimique μ des quasiparticules reste à l'intérieur de la bande, garantissant l'obtention d'un comportement de liquide de Fermi. Par contre, $-\lambda_0$ reste toujours à l'intérieur du gap quelle que soit la valeur de n_c.

La figure 6.6 présente la densité d'états ρ_c de la bande de conduction pour différentes valeurs du remplissage électronique. Lorsque n_c varie, on observe l'évolution d'une sous-structure, pour la bande de conduction, près du niveau de Fermi. Plus le système est épuisé, plus le poids spectral des électrons de conduction se localise (de manière relative) au niveau de Fermi. Les propriétés du liquide de Fermi sont données par cette sous-structure, dont la taille caractéristique devient, pour n_c faible, très inférieure à la largeur du gap. Cet effet illustre le fait que l'échelle de cohérence du liquide de Fermi ne puisse pas s'exprimer de manière simple à partir de la densité d'états au niveau de Fermi, mais nécessite la prise en compte d'autres degrés de liberté (la forme entière de ρ_c^0) même dans la limite d'un couplage Kondo faible.

6.2.3 Formation d'une sous-structure au niveau de Fermi

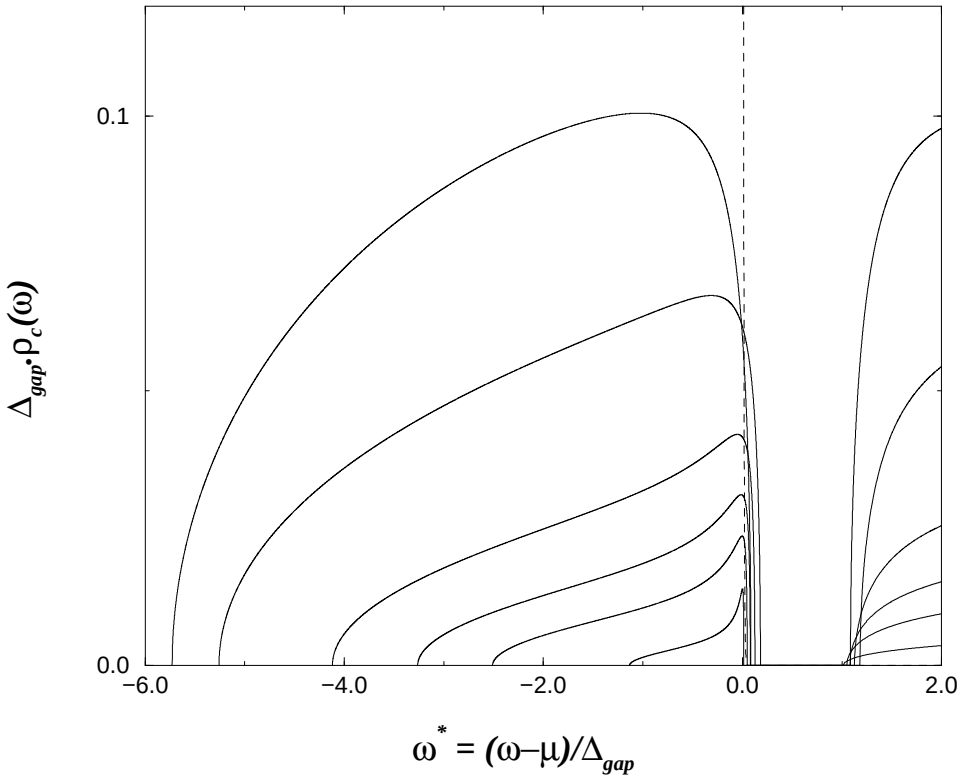


FIG. 6.6: Densités spectrales de la bande de conduction à température nulle. De haut en bas, n_c vaut respectivement 0.90, 0.50,0.20, 0.10, 0.05 et 0.01. Les énergies sont adimensionnées par la largeur du gap. Les fréquences ont été translatées de la valeur du potentiel chimique μ, et le trait pointillé vertical indique la position du niveau de Fermi, commune à toutes les courbes. Resultat numérique. $D = 2$, $J_K = 1.5$ et $T << T_K$.

6.2.4 Bain électronique effectif

La théorie du champ dynamique moyen [65] (DMFT) permet de considérer le réseau Kondo de manière locale[3]. Ainsi, on peut obtenir les fonctions de Green locales du système en considérant que chaque impureté du réseau est placée dans un bain effectif d'électrons de conduction. On obtient alors une équivalence formelle entre réseau Kondo et impureté dans un environnement effectif. En effet, les fonctions de Green G_f, G_c et G_{fc} se mettent dans les deux cas sous la forme :

$$rG_{fc}^{-1}(\omega) = (\omega + \mu + \lambda_0)\mathcal{G}_{c\,bain}^{-1}(\omega) - r^2 \quad (6.1)$$

$$G_f^{-1}(\omega) = \omega + \mu + \lambda_0 - r^2\mathcal{G}_{c\,bain}(\omega) \quad (6.2)$$

$$G_c^{-1}(\omega) = \mathcal{G}_{c\,bain}^{-1}(\omega) - \frac{r^2}{\omega + \mu + \lambda_0} \quad (6.3)$$

La fonction de Green $\mathcal{G}_{c\,bain}$ s'appelle le bain effectif. Elle est reliée à la fonction de Green électronique $G_c^{vois.}$ des sites voisins[4] de l'impureté par la relation suivante :

$$\mathcal{G}_{c\,bain}^{-1}(\omega) = \omega + \mu - t^2 G_c^{vois.}(\omega) \quad (6.4)$$

- Dans le cas d'une impureté seule, $G_c^{vois.} = G_0$ est la fonction de Green libre des électrons sans l'interaction.

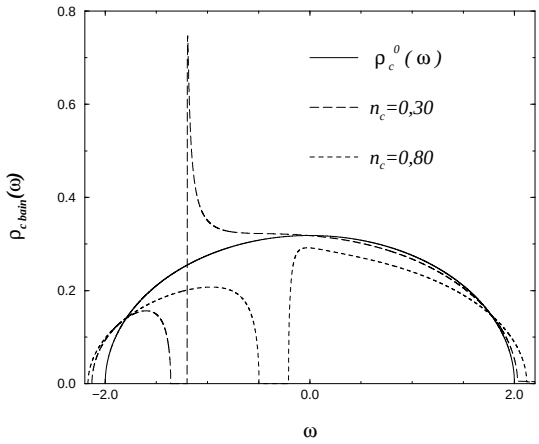
- Dans le cas d'un réseau, $G_c^{vois.} = G_c$ est égale à la fonction de Green des électrons de conduction en présence de l'interaction Kondo.

La figure 6.7 représente la densité spectrale $\rho_{c\,bain}(\omega)$ associée à $\mathcal{G}_{c\,bain}$ à $T = 0$ et pour deux valeurs de remplissages. Ce bain possède dans l'ensemble la forme de la densité spectrale libre $\rho_c^0(\omega)$, avec cependant la présence d'un gap [5].

La figure 6.8 présente le bain effectif pour un système proche du demi-remplissage ($n_c = 0.99$). Lorsque le rapport T/T_K varie de $1/350$ à $1/2$, ce bain ne se déforme pratiquement pas. La variation la plus importante, caractérisée par la fermeture du gap, survient lorsque la température varie entre $T_K/2$ et T_K.

La figure 6.9 illustre le fait que le bain effectif se déforme continuellement pour des faibles valeurs de remplissage (courbes de gauche), alors qu'il se déforme essentiellement pour des température proches de T_K lorsque le niveau de Fermi est loin du bord de bande (courbes de droite).

[3] Un exemple détaillé est dérivé dans la deuxième partie de ce manuscrit.
[4] Certaines subtilités apparaissent, liées à la présence d'une cavité [65] pour le calcul de $G_c^{vois.}$.
[5] Ce gap deviendrait probablement un pseudo-gap, pour un modèle à symétrie $SU(2)$ [39].



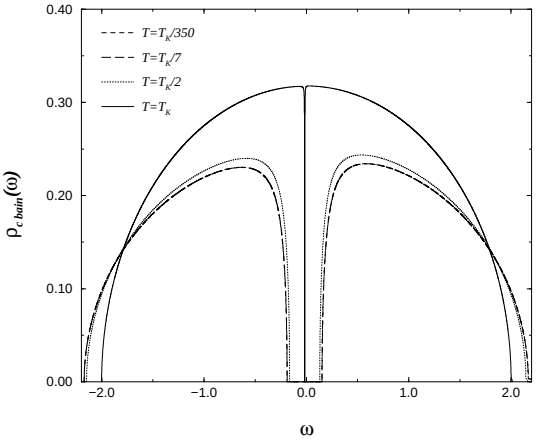


FIG. 6.7: (à gauche) Densité spectrale du bain effectif du réseau $\rho_{c\ bain}(\omega)$ pour $n_c = 0.30$ et $n_c = 0.80$. Le bain effectif du modèle à une seule impureté, égal à la densité spectrale libre ρ_c^0, est représenté en trait plein. Résultat numérique. $D = 2$, $J_K = 1.5$ et $T = 4.10^{-4} \approx 0$.

FIG. 6.8: (à droite) Evolution du bain effectif avec la température. Resultat numérique. $D = 2$, $J_K = 1.5$ et $n_c = 0.99$.

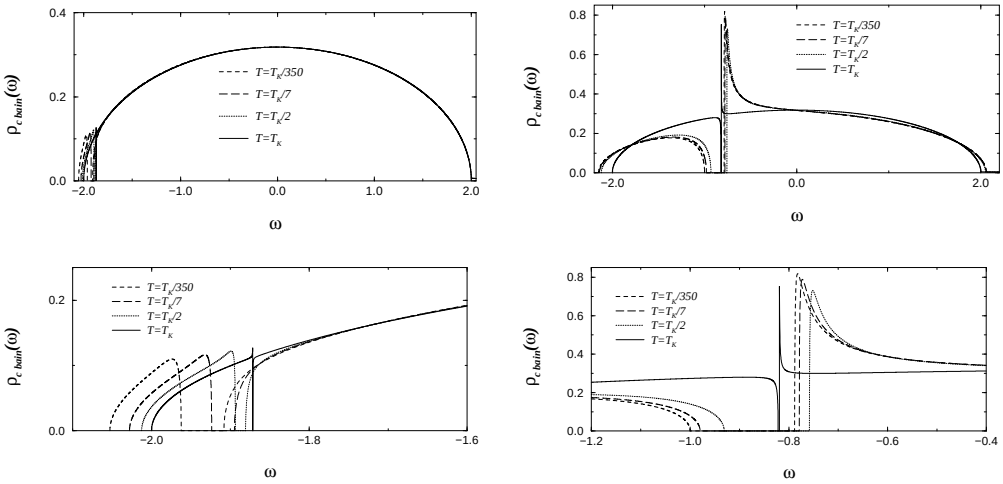
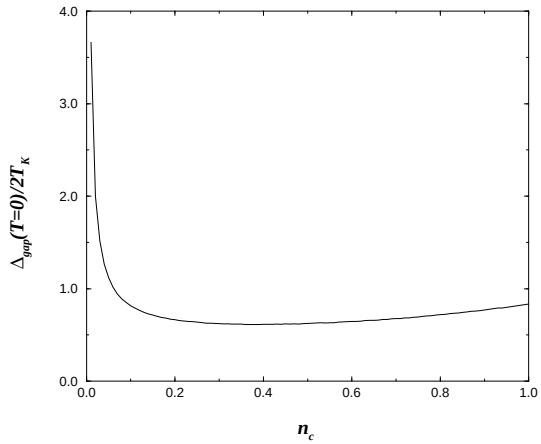


FIG. 6.9: Evolution du bain effectif avec la température. Les courbes du haut sont une vue d'ensemble. Celle du bas montrent le comportement détaillé autour du niveau de Fermi. Les courbes de gauche correspondent à $n_c = 0.02$, celles de droite à $n_c = 0.5$. Resultat numérique. $D = 2$ et $J_K = 1.5$.

6.3 Interprétation de la température de Kondo



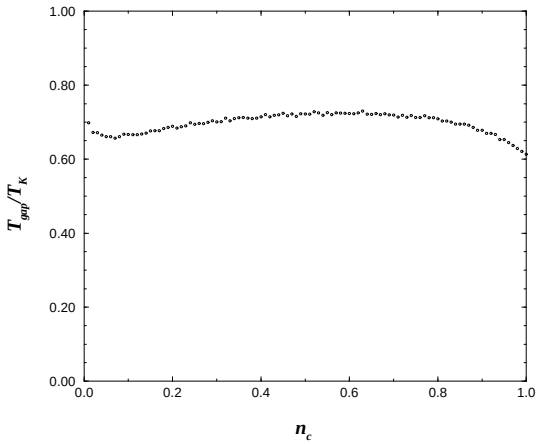


FIG. 6.10: (à gauche) Rapport entre la demi-largeur du gap à $T = 0$ et la température de Kondo T_K, en fonction de n_c. Résultat numérique. $D = 2$ et $J_K = 1.5$.

FIG. 6.11: (à droite) Rapport T_{gap}/T_K en fonction du remplissage électronique n_c. Résultat numérique. $D = 2$ et $J_K = 1.5$.

La figure 6.10 présente le rapport entre la moitié de la largeur du gap Δ_{gap} à $T = 0$ et la température de Kondo en fonction du remplissage électronique (l'expression de Δ_{gap} en fonction des paramètres du champ moyen est donnée par la relation (4.10)). Il apparaît que T_K et $\Delta_{gap}(T = 0)$ sont du même ordre pour une large gamme de concentrations électroniques n_c, mais on observe une importante augmentation relative du gap lorsque $n_c \to 0$. Ce résultat montre que T_K et la largeur du gap à température nulle peuvent en général être considérées comme proportionnelles, à l'exception des systèmes fortement épuisés en électrons, pour lesquels ces deux échelles ne sont corrélables qu'en tenant compte d'effets dynamiques, tels que la refermeture du gap lorsque la température augmente (voir la figure 6.11).

La figure 6.11 présente la dépendance en n_c du rapport T_{gap}/T_K. La température T_{gap} est définie comme la température à partir de laquelle la fonction de Fermi permet d'occuper de manière significative des états situés de l'autre coté du gap par rapport au niveau de Fermi (i.e. des états de la bande B^+ lorsque $n_c < 1$). De manière rigoureuse, cette température est donnée (pour $n_c < 1$) par la relation $T_{gap} = \omega_3(T_{gap}) - \mu(T_{gap})$ (où ω_3 est le bord inférieur de la bande B^+ (les bandes $B^\pm$ sont définies au début de la section 4.3) On constate que la différence $\omega_3 - \mu$ calculée à la température T_{gap} diffère de sa valeur à $T = 0$, particulièrement dans la limite de l'épuisement électronique (voir figures 6.5 et 6.10). La figure 6.11 montre que T_K et T_{gap} sont du même ordre, indépendamment du remplissage électronique. En comparant ce résultat avec la courbe de la figure 6.10, ainsi celle représentant l'évolution du bain effectif avec la température (figures 6.8 et 6.9), on comprend comment la fermeture progressive du gap avec T permet, lorsque le système est très épuisé en électrons de conduction, d'obtenir à $T = 0$ un gap beaucoup plus important que T_K.

6.4 Occupation de la bande de conduction

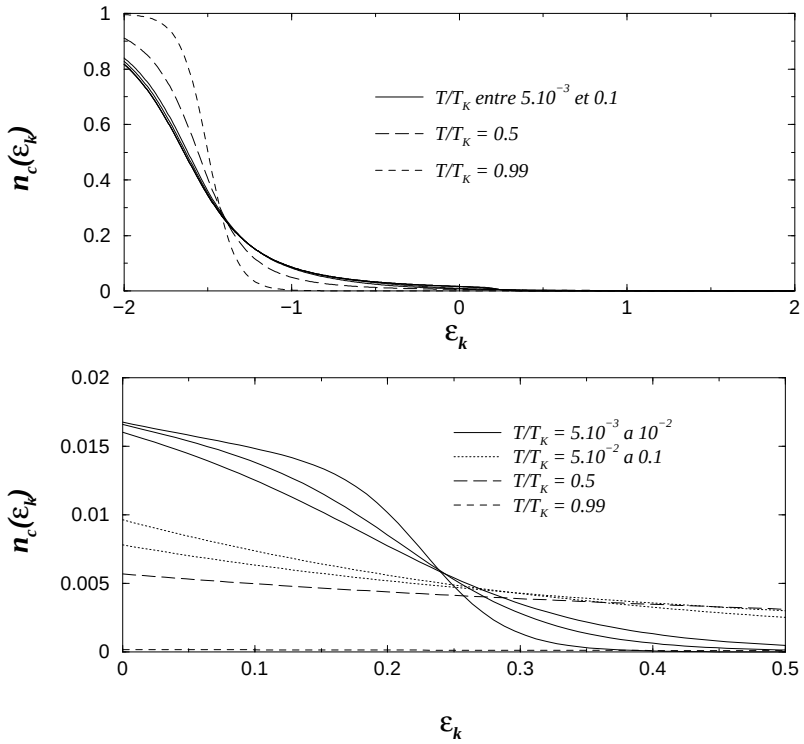


FIG. 6.12: Occupation des niveaux énergétiques "libres" $\epsilon_{\vec{k}}$ par les électrons de conduction interagissant. Les courbes du haut fournissent une vue d'ensemble pour plusieurs température. Celles du bas montrent le comportement au niveau de Fermi de la grande surface. Résultat numérique. $D = 2$, $J_K = 1.5$ et $n_c = 0.15$. Pour ces valeurs des paramètres, on a $\mu_0(n_c) \approx -1.5$ et $\mu_0(n_c + 1) \approx 0.25$.

On définit l'occupation $n_c(\epsilon_{\vec{k}}) = \langle c^\dagger_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \rangle$ comme la densité moyenne d'électrons de conduction de vecteur d'onde $\vec{k}$. Dans cette définition, $\epsilon_{\vec{k}}$ correspond à la dispersion sans interaction. Ainsi, la figure 6.12 présente l'occupation par les électrons de conduction des niveaux d'énergie "libres" $\epsilon_{\vec{k}}$.

Il est inhabituel d'observer que le fait de diminuer la température à tendance à créer des trous à des énergies inférieures au potentiel chimique $\mu_0(n_c)$, tandis que des états d'énergies a priori supérieures sont favorisé. Ce phénomène non trivial est directement lié à l'augmentation de la surface de Fermi à basse température.

En effet, à très basse température, le liquide de Fermi est constitué de $(n_c + 1)/2$ quasiparticules par composante de spin. Le niveau de Fermi associé à ces quasiparticules est donc décalé de manière à permettre l'occupation de ces $1/2$ états supplémentaires provenant de la contribution des spins (voir courbes du bas de la figure 6.12). Les quasiparticules étant, par notre approche, des superpositions entre états localisés f et états électroniques de la bande

de conduction, il est normal de retrouver, même à $T = 0$, des électrons de conduction dans tous les états de la grande surface de Fermi. Cette grande surface ayant la place pour accueillir $(n_c + 1)/2$ états, dont seulement $n_c/2$ proviennent de la bande de conduction, on obtient un profil d'occupation relativement étalé.
Lorsque $T = T_K$, les $n_c/2$ électrons doivent se contenter d'une petite surface de Fermi, les états de plus haute énergie ne leur étant accessibles, en couplage faible, qu'à une température beaucoup plus élevée, de l'ordre de D. Les courbes du bas présentent l'évolution avec la température du niveau d'occupation électronique autour du potentiel chimique correspondant à $(n_c + 1)/2$ quasiparticules. Au niveau du potentiel $\mu_0(n_c + 1)$, on retrouve une variation de l'occupation plus habituelle à très basse température, avec un étalement progressif de l'occupation électronique autour du niveau de Fermi de la grande surface lorsque T/T_K varie de 0 à 10^{-2}. Le système est alors dans le régime de liquide de Fermi. Puis, pour $T/T_K > 5.10^{-2}$, le remplissage décroît exponentiellement avec l'énergie, jusqu'à devenir négligeable à $T \sim T_K$. En effet, aux températures proches de T_K, et pour un couplage suffisamment faible, les électrons de la bande de conduction sont tous concentrés à des énergies inférieures au niveau de Fermi de la petite surface[6]

6.5 Susceptibilité magnétique statique

La susceptibilité magnétique caractérise la réponse du système à des excitations magnétiques. On pourrait envisager d'étudier la susceptibilité magnétique totale, dans la mesure où une excitation magnétique affecte aussi bien le spin des électrons de conduction que les moments magnétiques locaux. Cependant, le facteur de Lande, qui pondère le poids de chacune de ces deux contributions, s'avère généralement être nettement plus important pour les moments locaux que pour les électrons de conduction. Il n'est donc physiquement pas inutile de ne s'intéresser qu'aux premiers. De plus, la formation de l'état singulet entre spins et électrons de conduction implique une aimantation totale nulle dans la phase Kondo. Spins et électrons de conduction conduisent donc aux même fonctions de corrélation spin-spin, et seule la différence des facteurs de Lande implique une réponse magnétique totale non nulle.

6.5.1 Définition pour des spins de symétrie $SU(2)$:

La susceptibilité magnétique statique d'un système de fermions mesure l'aptitude de ce système à être aimanté sous l'effet d'un champ magnétique. On la définit par :

$$\chi_0(T) = \left.\frac{\partial m_z(h,T)}{\partial h}\right|_{h=0} \tag{6.5}$$

Où $m_z(h,T)$ est la composante longitudinale de l'aimantation des fermions en présence d'un champ magnétique d'intensité h.
L'aimantation est donnée par les densités d'états [7] $\rho_{f\sigma}(\omega,h) = \rho_f(\omega + \sigma h)$, correspondant

[6] C'est à dire inférieures au potentiel libre $\mu_0(n_c)$.
[7] On remarque que $\rho_{f\sigma}(\omega,h)$ n'est pas toujours égale à $\rho_f(\omega + \sigma h)$.

aux composantes $\sigma = \pm 1/2$ des spins des fermions :

$$\begin{aligned} m_z(h,T) &= \sum_{\sigma=\pm 1/2} \sigma \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_{f\sigma}(\omega,h) n_F(\omega) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_f(\omega) \frac{n_F(\omega - h/2) - n_F(\omega + h/2)}{2} \end{aligned} \tag{6.6}$$

On en déduit $\chi_0(T=0) = \rho_f(\omega = 0)$.

6.5.2 Lien avec la susceptibilité magnétique dynamique

On peut généraliser la définition précédente à un champ magnétique oscillant à la fréquence ω. On définit ainsi la susceptibilité magnétique dynamique $\chi(\omega)$, qui peut s'exprimer à partir des fonctions de corrélation spin-spin. Exprimée en temps imaginaire, on a :

$$\chi(\tau) = \langle T \vec{S}_0(\tau).\vec{S}_0(0) \rangle \tag{6.7}$$

$\vec{S}_0(\tau)$ désigne l'opérateur de spin (de symétrie $SU(N)$) correspondant au moment magnétique positionné sur le site 0, choisi arbitrairement (il s'agit de la susceptibilité locale).
La susceptibilité magnétique statique correspond alors à la composante $\omega = 0$, et vaut :

$$\chi_0(T) = \int_0^\beta d\tau \chi(\tau) \tag{6.8}$$

6.5.3 Généralisation à des spins de symétrie $SU(N)$

On généralise la définition de la susceptibilité à des spins de symétrie $SU(N)$. La notion de champ magnétique étant dans ce cas difficile à généraliser, nous partons de l'expression de $\chi_0(T)$ en terme de fonctions de corrélation spin-spin. En revenant à la représentation fermionique utilisée pour les opérateurs de spin, on a :

$$\chi(\tau) = \frac{1}{N^2} \sum_{\sigma,\sigma'=1}^{N} \langle T(f^\dagger_{0\sigma}(\tau) f_{0\sigma'}(\tau) - \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{2})(f^\dagger_{0\sigma'}(0) f_{0\sigma}(0) - \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{2}) \rangle \tag{6.9}$$

Dans la limite $N \to \infty$, l'action est quadratique par rapport aux opérateurs de fermions f, et diagonale par rapport aux composantes de spin. $\chi(\tau)$ peut alors se contracter et s'exprimer à partir des fonctions de Green fermioniques locales. On trouve :

$$\chi(\tau) = G_{ff}(\tau) G_{ff}(-\tau) - \frac{1}{2N} \tag{6.10}$$

Dans la limite $J_K \to 0$, on obtient pour la susceptibilité statique (voir annexe D) :

$$\chi_0(T=0) \approx \frac{(\Delta\mu)^2}{r^2} \rho_0 (n_c + 1) \tag{6.11}$$

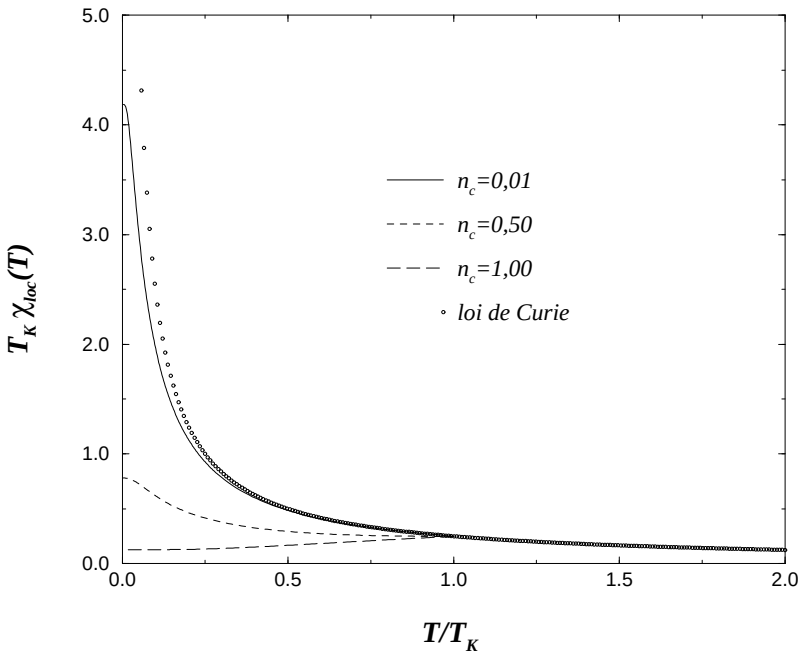
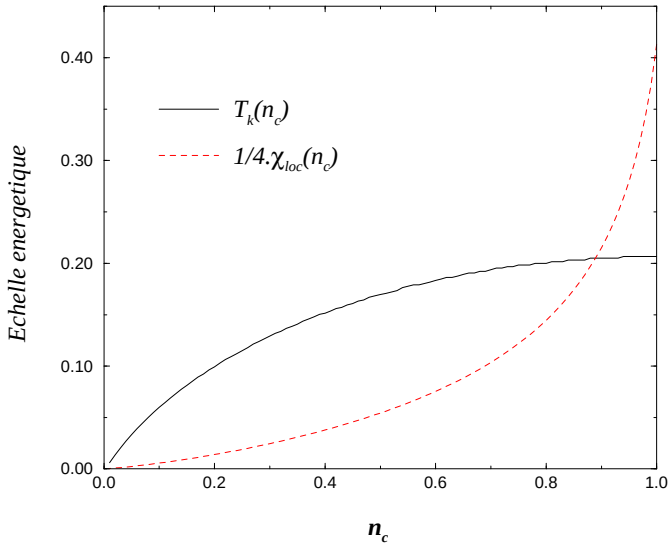
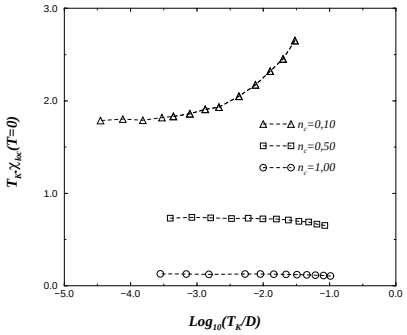


FIG. 6.13: Dépendance en température de la susceptibilité magnétique locale. Les cercles représentent la loi de Curie ($1/4T$), tracée à titre indicatif. Les courbes correspondent, de haut en bas, à $n_c = 0.01$, $n_c = 0.5$ et $n_c = 1.00$. Résultat numérique. $D = 2$ et $J_K = 1.5$.

Alors $\chi_0(T = 0) \approx \rho_f(\omega = 0)$, généralisation à $N \to \infty$ du résultat exact pour $N = 2$. La dépendance en température de $\chi(T)$ est présentée sur la figure 6.13, et la courbe de $\chi_0(T = 0)$ en fonction de n_c est tracée sur la figure 6.14.

La figure 6.13 décrit la dépendance en température de la susceptibilité magnétique locale pour différentes valeurs du remplissages électronique. La loi de Curie en $1/4T$, qui correspond à la susceptibilité magnétique d'un spins libre, caractérise indépendamment du remplissage électronique le régime $T > T_K$ pour lequel les spins sont découplés des électrons. Dans la phase Kondo, $T_K\chi_{loc}(T)$ n'est plus une fonction universelle de T/T_K, et dépend très fortement du remplissage. J'ai choisi trois valeurs extrêmes de n_c, qui permettent d'illustrer cette non-universalité. Au demi-remplissage, tous les spins sont occupés à former des singulet avec les électrons de conduction, et il est d'autant plus difficile de les aimanter que la température est faible. A l'inverse, lorsque le système est très épuisé en électrons de conduction (voir par exemple $n_c = 0.01$), seule une très faible proportion de spins constitue à un instant donné les singulets Kondo, pendant que les autres, célibataires, peuvent être aimantés facilement. On obtient ainsi une susceptibilité magnétique encore très proche d'une loi de Curie jusqu'à des températures nettement plus faibles que la température de Kondo. A très basse température, cette susceptibilité sature tout de même à une valeur finie, les spins célibataires contribuant alors à la constitution de l'état cohérent non magnétique caractérisant le régime de liquide de Fermi. Entre ces deux cas extrêmes s'échelonne tout un panachage de comportements intermédiaires, dont la courbe $n_c = 0.50$ est un exemple.





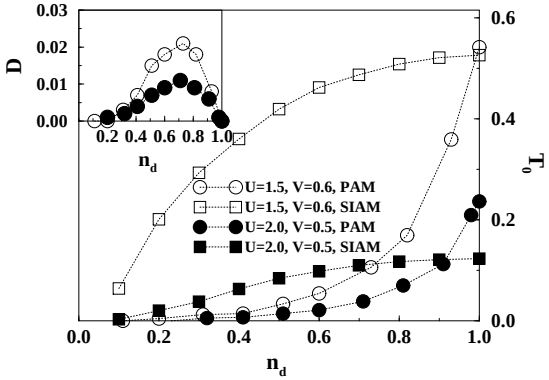


FIG. 6.14: (en haut à gauche) Evolutions de T_K (trait plein) et de $1/4\chi_{loc}(T=0)$ (pointillés) en fonction de n_c. L'échelle verticale correspond dans le premier cas à la température, dans le second à une énergie. Résultat numérique. $D=2$ et $J_K=1.5$

FIG. 6.15: (en haut à droite) Nombre de Wilson du réseau Kondo. Les carrés correspondent à $n_c=1$, les cercles à $n_c=0.5$, et les triangles à $n_c=0.1$. Résultat numérique. $D=2$. Pour n_c fixé, on fait varier J_K de manière à obtenir plusieurs valeurs de T_K.

FIG. 6.16: (en bas) Inverse de la susceptibilité magnétique à $T=0$ pour le modèle de Anderson périodique (PAM) et le modèle de Anderson à une impureté (SIAM), en fonction du remplissage de la bande de conduction (n_d correspond à notre n_c), pour une bande f à demi-remplie ($n_f \approx 1.0$), et deux jeux de paramètres pour le modèle. L'incrustation indique le poids de Drude correspondant pour le PAM. Figure d'après Tahvildar-Zadeh, Jarrell et Freericks [167].

La figure 6.14 présente la température de Kondo T_K et l'inverse de la susceptibilité magnétique locale $1/4\chi_{loc}(T=0)$ en fonction du remplissage électronique n_c. En excluant la proximité de l'isolant Kondo, un peu particulière en raison de la proximité du gap, $1/4\chi_{loc}(T=0)$ est proportionnelle à la température de cohérence du liquide de Fermi. La figure 6.14 met en évidence une très nette différence de convexité entre ces deux échelles, qui conduit, dans la limite de l'épuisement électronique, à une échelle de cohérence du liquide de Fermi très inférieure à la température de Kondo, caractéristique de la formation des singulets locaux. Cependant, il n'est pas nécessaire de considérer des systèmes trop épuisés pour observer ce comportement. S'il était possible de faire varier expérimentalement n_c sans changer la valeur du couplage Kondo J_K ni la densité spectrale libre ρ_c^0, alors, on pourrait déjà sentir une décroissance de $1/4\chi_{loc}(T=0)$ avec n_c plus rapide que celle de T_K sur une gamme quelconque de remplissage.
La figure 6.16 présente le résultat équivalent, obtenu par Jarrell, en résolvant numériquement par Monte-Carlo quantique les équations de DMFT correspondant au modèle de Anderson de symétrie $SU(2)$, pour une bande f demi-remplie. Ce résultat semble très similaire au notre.
La figure 6.15 illustre la non-universalité du nombre de Wilson [8] du réseau Kondo. Les trois concentrations électroniques choisies correspondent respectivement au demi-remplissage ($n_c = 1$), à un remplissage intermédiaire ($n_c = 0.5$), et à un système plus proche de l'épuisement ($n_c = 0.1$). Contrairement au cas du modèle à une seule impureté (voir figure **??**), la limite du produit $T_K\chi_{loc}(T=0)$ dépend fortement du remplissage lorsque le couplage Kondo tend vers zéro.

6.6 Quantités thermodynamiques

Les détails des calculs analytiques sont donnés en annexe E.

6.6.1 Fonction de partition

La fonction de partition $Z^{(N)}$ (donnée par l'expression (3.21)) permet de calculer les quantités thermodynamiques du système. On ne sait pas calculer cette fonction de manière générale pour N quelconque ; par contre, dans la limite $N \to \infty$, il est possible d'exprimer $Z^{(N)}$ de manière simple en fonction de r, λ_0 et μ. On trouve :

$$\boxed{\left[Z^{(N)}\right]^{1/N} = exp\left[-\beta\mathcal{F}_0\right]\prod_{\vec{k}}\left(1+exp[-\beta\omega_{\vec{k}}^{-}]\right)\left(1+exp[-\beta\omega_{\vec{k}}^{+}]\right) \qquad (6.12)}$$

$\omega_{\vec{k}}^{\pm}$ sont les niveaux d'énergies des quasiparticules, solutions de l'équation $(\omega_{\vec{k}}^{\pm}+\mu-\epsilon_{\vec{k}})(\omega_{\vec{k}}^{\pm}+\mu+\lambda_0) = r^2$. La contribution $\mathcal{F}_0$ de l'énergie libre est donnée par :

$$\mathcal{F}_0 = \frac{r^2}{J_K} + \frac{\lambda_0}{2} + \mu\left(\frac{1}{2}+\frac{n_c}{2}\right) \qquad (6.13)$$

[8] Le nombre de Wilson est défi ni par le produit $T_K\chi_{loc}(T=0)$. Il se distingue du rapport de Wilson, qui, lui, mesure le rapport $\chi_{loc}(T=0)/\gamma$ et vaut 1 pour notre modèle, γ étant le coeffi cient de la chaleur spécifi que.

En considérant $\mathcal{F}_0$ constante, l'expression obtenue pour $Z^{(N)}$ correspond à la fonction de partition de N systèmes identiques et indépendants, composés chacun de deux bandes de quasiparticules libres, dont les spectres sont donnés par $\omega_{\vec{k}}^{\pm}$. Ces deux bandes correspondent aux bandes $B^{\pm}$ (voir section 4.3), dont les paramètres r, λ_0 et μ s'adaptent pour minimiser l'énergie libre.

6.6.2 Énergie libre

L'énergie libre du système vaut :

$$\boxed{\mathcal{F}(T) = \mathcal{F}_0(T) - \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho(\omega) \frac{ln\left(1 + e^{-\beta\omega}\right)}{\beta} \qquad (6.14)}$$

6.6.3 Entropie

L'entropie du système vaut :

$$\boxed{S(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[ln\left(1 + e^{-\beta\omega}\right) + \frac{\omega}{T} n_F(\omega) \right] \rho(\omega) \qquad (6.15)}$$

En développant à basse température l'expression de l'entropie, on trouve :

$$\boxed{S(T) = \frac{\pi^2}{3} \rho(0) T + \mathcal{O}\left(T^2\right) \qquad (6.16)}$$

On obtient bien un comportement de liquide de Fermi, l'entropie s'annulant linéairement avec la température. La pente de l'entropie est proportionnelle à la densité d'états de quasiparticules au niveau de Fermi $\rho(0) = [1 + (\Delta\mu/r)^2]\rho_0(n_c + 1)$.

6.6.4 Chaleur spécifique

La chaleur spécifique $C(T)$ se déduit de l'entropie par la relation $C(T) = TdS(T)/dT$. Le coefficient γ caractéristique du régime de liquide de Fermi pour lequel $C(T) = \gamma T + \cdots$ se déduit de la relation (6.16) :

$$\boxed{\gamma = \frac{\pi^2}{3} \left[1 + \frac{(\Delta\mu)^2}{r^2} \right] \rho_0(n_c + 1) \qquad (6.17)}$$

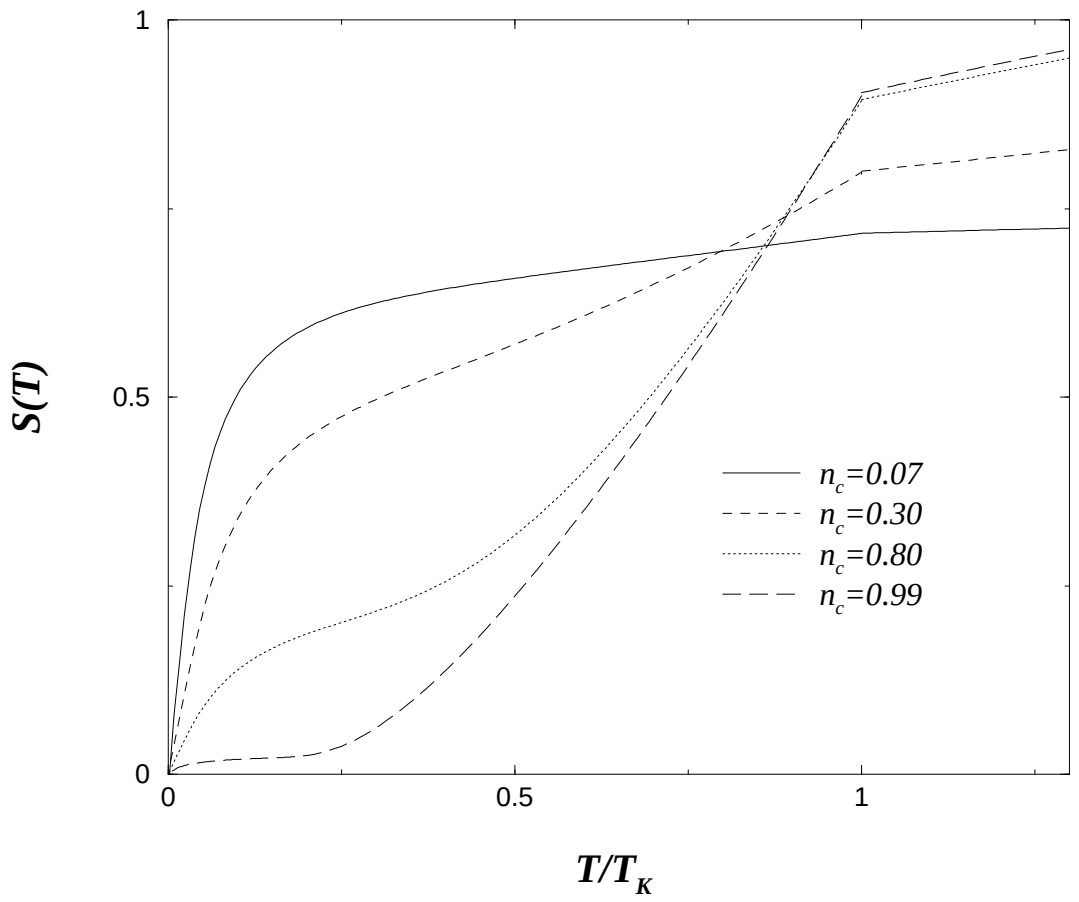
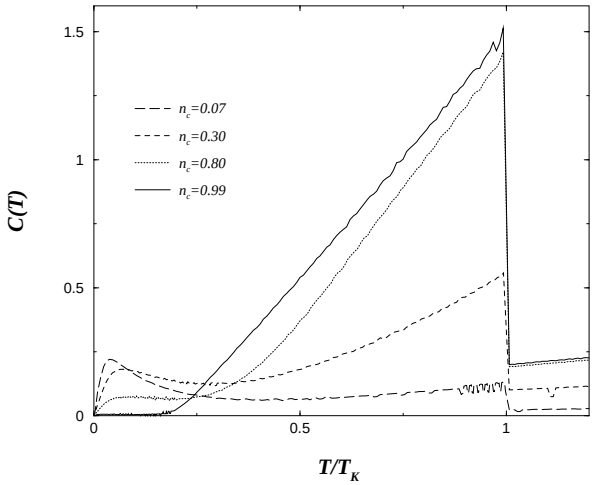


FIG. 6.17: Dépendance en température de l'entropie par composante de spin. De haut en bas, dans la phase Kondo, n_c vaut 0.07, 0.30, 0.80 et 0.99. Résultat numérique. $D = 2$ et $J_K = 1.5$.

La figure 6.17 représente l'évolution de l'entropie $S(T)$ par composante de spin. Lorsque $T < T_K$, la courbe $S(T)$ varie fortement avec n_c. Lorsque $T \approx T_K$, la contribution d'origine magnétique sature à la valeur $\ln 2 \approx 0.69$, qui correspond à l'entropie d'un spin libre.
Près du demi-remplissage, $S(T)$ reste faible jusqu'à $T \propto T_K$, les degrés de liberté du système étant pratiquement gelés en dessous de T_K par la formation des singulets Kondo.
A l'inverse, pour des valeurs de n_c faibles, $S(T)$ se rapproche de $\ln 2$ à une température très inférieure à T_K, les spins célibataires pouvant disposer de tous leurs degrés de liberté à une température nettement plus faible que T_K. Pour des densités électroniques intermédiaires, une sorte de plateau apparaît dans la courbe de $S(T)$. Celui-ci correspond à une gamme de température dans laquelle le liquide de Fermi a déjà perdu sa cohérence, mais les singulets n'ont pas encore été brisés. Le comportement linéaire pour $T > T_K$ provient de la bande de conduction ; la contribution de cette dernière est d'autant plus négligeable que la température de Kondo T_K est faible devant D.



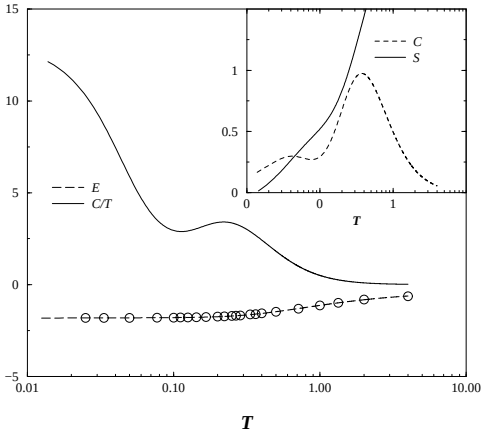


FIG. 6.18: (à gauche) Chaleur spécifique en fonction de la température normalisée T/T_K pour $n_c = 0.07$ (traits longs), $n_c = 0.30$ (traits courts), $n_c = 0.80$ (pointillés) et $n_c = 0.99$ (trait plein). Résultat numérique. $D = 2$ et $J_K = 1.5$.

FIG. 6.19: (à droite) Chaleur spécifique et énergie en fonction de la température, pour le modèle de Anderson périodique. Résultat numérique communiqué par Jarrell (résolution numérique des équations de DMFT, le problème effectif local étant traité à chaque itération par un algorithme Monte Carlo quantique). $U = 1.5$; $V = 0.6$; $n_d = 0.6$; $T_0 = 0.054$; $T_K^{imp.} = 0.46$.

La figure 6.18 présente la dépendance en température de la chaleur spécifique pour différentes valeurs du remplissage électronique. Près du demi-remplissage (courbes $n_c = 0.99$ et $n_c = 0.80$), la chaleur spécifique présente essentiellement un pic en $T \approx T_K$, et correspond à l'apparition de l'effet Kondo. A l'inverse, lorsque le système est épuisé en électrons de conduction (courbe $n_c = 0.07$), le principal pic de la chaleur spécifique correspond à $T \approx T^\star$ et caractérise la formation des quasiparticules. Pour des concentrations intermédiaires (courbe $n_c = 0.30$), les deux pics sont simultanément présents. On note que la discontinuité à $T = T_K$ est un artefact de l'approche $N \to \infty$, pour laquelle le crossover marquant l'apparition de l'-effet Kondo a été remplacé par une transition. Cependant, des simulations numériques pour le modèle de Anderson de symétrie $SU(2)$ (Jarrell, communication privée), montrent que notre analyse s'applique qualitativement au réseau Kondo de symétrie $SU(2)$ à condition de remplacer la discontinuité en $T = T_K$ par un pic plus doux, mais de taille équivalente. Ainsi, la figure 6.19 présente la chaleur spécifique du modèle de Anderson périodique pour un remplissage intermédiaire ($n_c = 0.6$). On voit nettement apparaître les deux pics, l'un, à $T \approx T_K$, caractéristique de l'effet Kondo, l'autre, à $T \approx T^\star$, caractéristique de la formation de l'état cohérent constituant le liquide de Fermi.

6.7 Conductivité optique et pic de Drude

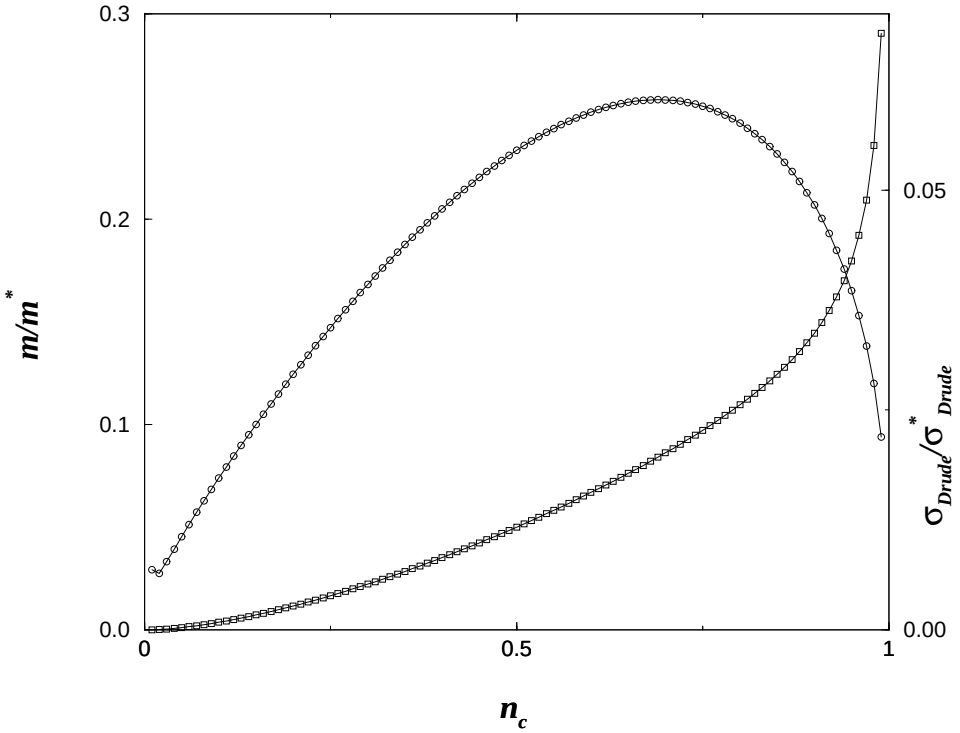


FIG. 6.20: Dépendance en n_c de la masse effective et du poids du pic de Drude. Les cercles représentent le rapport $m/m^\star$ et les carrés le rapport $\sigma_{Drude}/\sigma^\star_{Drude}$. Résultat numérique. $D = 2$ et $J_K = 1.5$.

Des expressions générales ont été dérivées dans la sous-section11.3.7 pour la conductivité optique et le poids du pic de Drude. On en déduit :

$$\boxed{\sigma_{Drude}(T=0) = \frac{e^2\pi}{Vd}\frac{\rho_0(n_c+1)}{1+\frac{(\Delta\mu)^2}{r^2}} \qquad (6.18)}$$

La figure (6.20) représente le résidu de quasiparticules $m/m^\star$ et le rapport des poids de Drude $\sigma_{Drude}/\sigma^\star_{Drude}$ en fonction du remplissage électronique. Entre ces deux quantités, on trouve la relation :

$$\frac{m}{m^\star}\frac{\sigma^\star_{Drude}}{\sigma_{Drude}} \propto \left[\frac{\rho_c^0(n_c)}{\rho_c^0(n_c+1)}\right]^2 \qquad (6.19)$$

Chapitre 7

Conclusion

L'approche "grand-N" présentée dans cette première partie nous a permis d'étudier plusieurs aspects du problème de l'épuisement du réseau Kondo.
Nous avons obtenu des expressions analytiques pour les quantités physiques telles que les densités spectrales électroniques, observables expérimentalement par des expériences de photoémission, la susceptibilité magnétique statique, les grandeurs thermodynamiques, ou les propriétés de transport.
L'approche suivie dans cette thèse fournit pour le réseau Kondo une température de Kondo rigoureusement identique à celle obtenue pour un modèle à une seule impureté, et caractéristique de l'apparition des corrélations locales de type singulet, entre le spin des ions magnétiques et la densité de spin locale des électrons de la bande de conduction.
De ces résultats, il apparaît que le réseau Kondo, contrairement au modèle à une seule impureté, nécessite l'introduction d'un deuxième paramètre énergétique, pour décrire son comportement à basse température. Il s'agit de la température de cohérence, $T^\star$, en dessous de laquelle les propriétés physiques du système suivent le comportement universel caractéristique des liquides de Fermi.
Conformément aux prédictions du modèle phénoménologique de Nozières, $T^\star$ devient très inférieure à T_K dans la limite de l'épuisement, où la concentration en électrons de conduction est plus faible que celle des moments magnétiques locaux.
Par contre, le rapport $T_K/T^\star$ que nous obtenons est indépendant de la valeur du couplage Kondo.

Deuxième partie

Réseau Kondo et frustration magnétique

Chapitre 8

Motivation

8.1 Contexte expérimental : LiV_2O_4

Le composé LiV_2O_4 a été synthétisé pour la première fois par Rogers *et al.* afin d'en étudier les propriétés de conductivité électrique [147]. Dans un premier temps, il s'est avéré intéressant pour sa transition métal-isolant, obtenue en remplaçant entre 35% et 45% du Li par du Zn [88, 143].

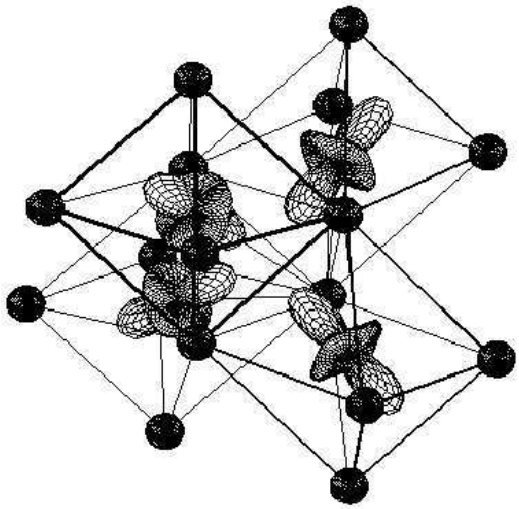
Plus récemment, des propriétés de type fermion lourd ont été mesurées pour LiV_2O_4 à basse température [93], ce qui est très surprenant[1] pour un système à électrons d. Parallèlement, une étude des propriétés de l'alliage $Li_{1-x}Zn_xV_2O_4$ a montré l'existence d'une transition vers une phase de verre de spin pour $x \approx 0.1$ [176, 105].

Ce composé possède une structure de spinelle normale cubique faces centrées, pour laquelle les ions V forment un réseau de tétrahèdres reliés par les arrêtes [16] (voir figure 8.1) . Cette structure, fortement frustrée, peut conduire à un état fondamental non conventionnel, de type liquide de spin [156], et des mesures de résonance magnétique nucléaire pratiquées sur LiV_2O_4 ont récemment mis en évidence des corrélations de type liquide de spin sur toute une gamme intermédiaire de températures [86]. Il semble ainsi clair que, pour ce composé, la forte frustration favorise un ordre de verre de spin sous jacent, qui peut ainsi apparaitre sous l'effet d'un très léger désordre (faible valeur du taux critique de substitution $Li - Zn$).

Il est donc très probable que la compétition entre un effet de type Kondo et des fluctuations de spin induites par la proximité de cette transition puissent justifier la forte masse effective de LiV_2O_4.

Johnston *et al.* ont confronté des résultats de mesure de chaleur spécifique avec quelques modèles génériques (liquide de Fermi, modèle à une impureté Kondo de spin $1/2$, certains modèles de moments magnétiques désordonnés couplés à un métal). Tous permettent de reproduire remarquablement bien le comportement à très basse température, c'est à dire le régime de liquide de Fermi, mais aucune de ces théories ne permet de décrire le régime des températures comprises entre 10K et 108K [82].

[1] LiV_2O_4 excepté, tous les composés à fermions lourds connus aujourd'hui sont constitués d'atomes de terres rares ou d'actinides, et comportant des électrons f.



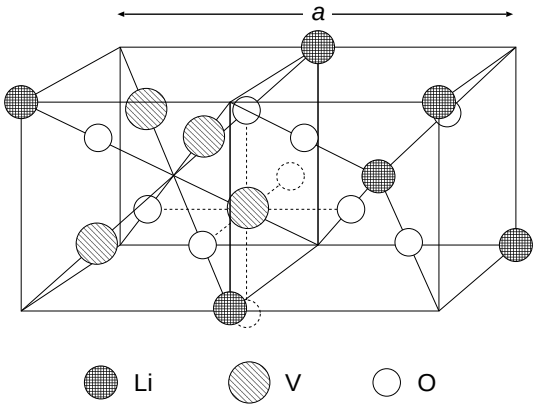


FIG. 8.1: (à gauche) Quatre atomes V à l'intérieur d'une cellule unitaire de spinelle, avec les octahèdres correspondants. La distribution angulaire de la densité d'électrons $3d$ obtenue par calculs de LDA+U est représentée (essentiellement les orbitales A_{1g} localisées). (d'après [16])

FIG. 8.2: (à droite) Portion de cellule unitaire pour le composé LiV_2O_4 de type spinelle. (d'après [116])

Tous les calculs de structure de bande effectués pour ce composé [16, 50, 116, 165] font apparaitre l'analyse suivante (d'après [16]) :

Les bandes provenant des atomes O sont pleines, alors que la valence des ions V conduit à une occupation de 1.5 électron par orbitale $3d$, dont la dégénérescence est de 5. Les atomes V sont placés dans un environnement octrahédral constitué d'atomes O (voir figure 8.2). Une telle géométrie cristalline locale favorise les orbitales électroniques pointant vers les atomes O, ce qui implique une levée de dégénérescence partielle de l'orbitale $3d$. Ainsi, les deux bandes e_g sont vides, et seules les trois orbitales t_{2g}, partiellement occupées, contribuent aux propriétés physiques à basse température. La dégénérescence de t_{2g} est levée par le champ cristallin, et il en résulte deux orbitales ; l'une, A_{1g} est non dégénérée ; l'autre, E_g, d'énergie légèrement supérieure, est doublement dégénérée. On en déduit que l'orbitale A_{1g} est toujours occupée et peut être considérée comme un moment magnétique localisé. Par contre, la double orbitale E_g n'est occupée en moyenne que par un demi-électron, et elle joue le rôle d'une bande de conduction.

Partant de cette constatation, et en s'appuyant sur des calculs de structure de bande utilisant les techniques de LDA+U, Rice *et al.* ont estimé la température de Kondo équivalente pour un modèle à une impureté [16]. Cette dernière, de l'ordre de $T_K^0 \approx 550$K, s'avère être au moins d'un ordre de grandeur supérieure à la température de cohérence du liquide de Fermi, évaluée à $T^\star \approx 25 - 40$K [93]. Le principe d'épuisement[2] de Nozières [126, 127] a alors été évoqué

[2]Voir aussi la première partie.

pour expliquer cette réduction. Il parait cependant un peu excessif de considérer l'orbitale E_g, i.e. la bande de conduction, comme étant épuisée, alors que nous venons de voir qu'elle est tout juste deux fois moins remplie que le niveau A_{1g}, i.e. le moment magnétique localisé. Cette analyse parait donc peu convaincante pour justifier une diminution de $T^\star$ supérieure à un ordre de grandeur.

Il semble ainsi indispensable, pour expliquer les propriétés de LiV_2O_4, d'utiliser un modèle plus complet qu'un simple modèle Kondo. Les interactions entre les orbitales A_{1g} et E_g ont été évaluées [16], et font apparaitre d'une part un terme de double échange local (couplage de Hund, c'est à dire une interaction de type "Kondo ferromagnétique" entre les orbitales A_{1g} et E_g d'un même site), dont la valeur du couplage a été estimée à $J_{dex} \approx 530\mathrm{K}$. D'autre part, une interaction supplémentaire, de type Kondo (couplage antiferromagnétique) apparaît entre l'orbitale A_{1g} d'un site et les états E_g des sites voisins, dont la valeur du couplage est évaluée à $J_K \approx 670\mathrm{K}$, ce qui constitue un couplage fort par rapport aux valeurs obtenues habituellement pour des composés à orbitales f. L'idée de Rice *et al.* [16], de représenter ce système par un réseau Kondo, repose sur l'hypothèse d'une renormalisation du couplage de Hund, conduisant à un couplage Kondo résiduel effectif plus faible, de l'ordre de $J_K - J_{dex} \sim 140\mathrm{K}$.

Une telle renormalisation n'est pas des plus évidentes car le couplage de Hund est local, alors que l'interaction Kondo corrèle plusieurs sites voisins, sur un réseau frustré. Toutefois, Myake *et al.* [95] ont montré numériquement que le couplage de Hund peut être renormalisé. Le système pourrait donc être décrit par un modèle de type Kondo, mais on ne peut pas déduire la valeur du couplage renormalisé par simple soustraction de la valeur du couplage de Hund. Cette façon de procéder peut renseigner qualitativement sur la nature du fondamental, mais ne peut en aucun cas servir de base à une estimation quantitative. De plus, Myake *et al.* [95] ont aussi confirmé que la forte frustration joue un rôle important pour ce composé. Un modèle simple permettant de tenir compte simultanément de l'effet Kondo et de la frustration est celui défini par le Hamiltonien (9.1), dont l'étude fait l'objet de cette partie de manuscrit.

On peut cependant noter que Lacroix [97], suivant une autre approche, a plutôt considéré que le terme Kondo se renormalise sous la forme d'une interaction de super-échange antiferromagnétique entre voisins. Alors, la frustration du réseau engendrerait, via ce super-échange, une augmentation considérable de la masse effective. Cette description du système parait effectivement plus naturelle que celle obtenue avec un modèle Kondo effectif, et il serait intéressant de pouvoir comparer les résultats obtenus par les deux approches.

8.2 Contexte théorique

8.2.1 Verre de spin longitudinal et interaction Kondo

Lorsqu'elle est suffisamment importante, l'interaction RKKY peut stabiliser un système Kondo dans un état ordonné magnétiquement. Quand le système de spin est frustré, que ce soit pour des raisons de géométrie cristalline ou de désordre, l'état fondamental de type Kondo peut laisser la place à un état de type verre de spin. Près du point critique quantique caractérisant cette transition, il a été observé pour une grande classe de matériaux, des propriétés de non liquide de Fermi [114, 106]. Ainsi, par exemple, pour le composé $Y_{1-x}U_xPd_3$, qui a été l'objet de nombreuses études expérimentales [114, 106, 159], ce comportement anormal a été

observé pour une valeur de x proche de la concentration critique $x_c \approx 0.2$ (voir figure 1.2). L'origine d'un tel comportement de non liquide de Fermi n'est pas entièrement comprise. Le cas spécifique de $Y_{0.8}U_{0.2}Pd_3$ a généré de nombreux débats pour savoir s'il résultait d'un effet lié à la structure spécifique des moments locaux, ou s'il était le fruit de cette compétition entre effet Kondo et ordre magnétique [41, 12].

Dans le cadre de ce contexte expérimental, Sengupta et Georges ont introduit un modèle très simplifié, mais contenant le minimum nécessaire pour tenir compte de cette compétition [161]. Ce modèle est une version du réseau Kondo, avec un terme additionnel introduisant un couplage désordonné (gelé) entre les composantes longitudinales[3] des spins localisés. Une hypothèse très simplificatrice a consisté à supposer que chaque spin interagit avec son propre bain d'électrons de conduction, qui est une sorte de réservoir électronique local ne communiquant pas avec les réservoirs des spins voisins. Le Hamiltonien du modèle est donc le suivant :

$$H_{GS} = \sum_{k,\alpha,i} \epsilon_k c_{k\alpha}^{(i)\dagger} c_{k\alpha}^{(i)} + J_K \sum_i \vec{S}_i.\vec{s}(i) - \sum_{i<j} J_{ij} S_i^z.S_j^z \tag{8.1}$$

Les électrons de conduction sont notés $c_{k\alpha}^{(i)}$, où $\alpha =\uparrow,\downarrow$ est l'indice de spin, k caractérise les orbitales de la bande de conduction, et l'indice de site (i) caractérise le réservoir associé au site i. Dans cette expression, $\vec{s}(i) \equiv \sum_{\alpha\beta}\sum_{kk'} \frac{1}{2} c_{k\alpha}^{(i)\dagger} \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{k'\beta}^{(i)}$ désigne la densité de spin des électrons de conduction du bain i au site i, et J_K la force du couplage Kondo entre les spins localisés et les électrons de conduction (choisi antiferromagnétique). Les J_{ij} sont des variables indépendantes gelées, données par une distribution gaussienne $P(J_{ij}) \sim \exp\left(-J_{ij}^2/4\mathcal{N}J^2\right)$. Pour $J_K = 0$, le système se réduit au modèle de Sherrington-Kirkpatrick, qui décrit un verre de spin classique pour des variables de Ising [163], dont la température de transition vaut $T_c = J$. A l'inverse, lorsque $J = 0$, on retrouve un système d'impuretés Kondo ayant chacune son propre réservoir d'électrons de conduction. Le fondamental, non magnétique, peut donc être décrit comme une superposition de nuages Kondo n'interagissant pas et constituant chacun un état singulet avec le spin localisé lui correspondant.

Sengupta et Georges se sont alors intéressés au régime intermédiaire, pour lequel l'ordre de verre de spin s'oppose à l'effet Kondo local. Pour chacun des deux effets en compétition, les modèles connus les plus simples ont été utilisés, l'interaction spin-spin étant de type Ising, et le bain électronique ne tenant pas compte des effets de réseau. Malgré cette apparente simplicité, ce modèle conduit à un diagramme de phase assez riche (voir figure 8.3) dans la proximité du point critique quantique séparant la phase Kondo de la phase de verre de spin. Dans le régime quantique critique (noté QC sur le diagramme de la figure 8.3), le coefficient obtenu pour la chaleur spécifique et la susceptibilité, présentent des corrections non-analytiques par rapport au comportement de liquide de Fermi. De même, le taux de relaxation RMN et la résistivité ont une dépendance en température non conformes à la théorie des liquides de Fermi. Le diagramme de phase obtenu reflète qualitativement très bien celui obtenu pour un composé tel que $Y_{1-x}U_xPd_3$ en faisant varier x (voir figure 1.2).

[3] Le champ cristallin génère une forte anisotropie pour les orbitales des atomes de terres rares.

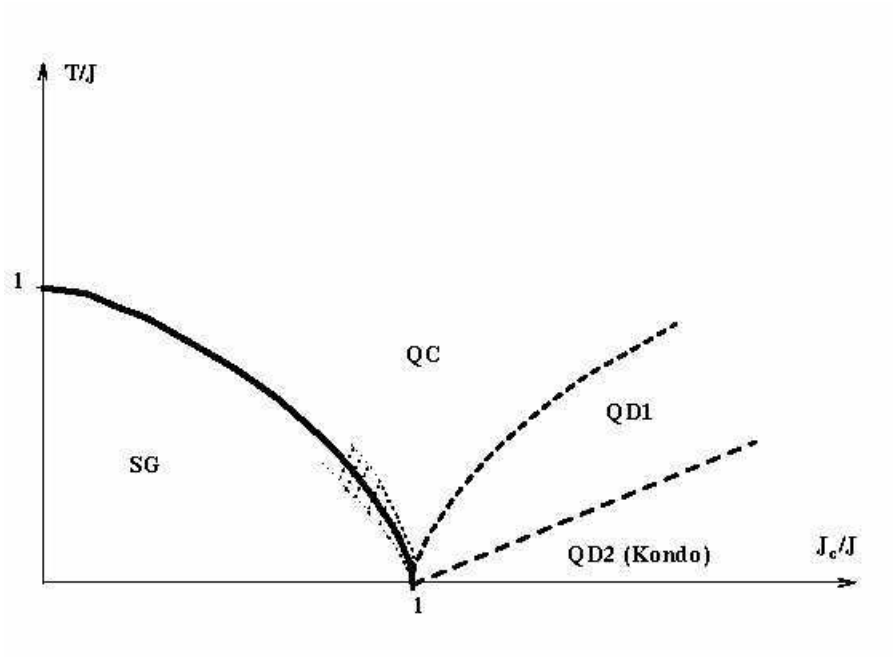


FIG. 8.3: Diagramme de phase schématique, en fonction de T/J et de J_c/J, où le couplage critique $J_c = T_K$. La ligne pleine indique la transition de verre de spin. Toutes les autres lignes désignent des crossover, correspondant à différents régimes intermédiaires. La zone hachurée correspond à un comportement classique près de la transition. (d'après [161]).

Une amélioration de ce modèle a ensuite été apportée par Grempel et Rozenberg [71], qui ont considéré une version plus réaliste du Hamiltonien H_{GS}, pour laquelle chaque impureté Kondo ne possède plus son propre réservoir électronique, mais interagit avec une bande de conduction unique et commune à tout le système, où désormais $\vec{s}_i$ désigne la densité de spin locale associée à la bande de conduction.

$$H_{GR} = \sum_{k,\alpha} \epsilon_k c^\dagger_{k\alpha} c_{k\alpha} + J_K \sum_i \vec{S}_i.\vec{s}_i - \sum_{i<j} J_{ij} S^z_i.S^z_j \tag{8.2}$$

Pour les autres termes, les définitions sont les mêmes que celles du modèle H_{GS}. L'interaction spin-spin reste, par contre, longitudinale, ce qui permet une transformation astucieuse du modèle. Trouvée par Grempel et Rozenberg [149], elle s'inspire de l'approche développée par Anderson et Yuval lors de l'étude du modèle Kondo anisotrope [10, 11]. Par une approche DMFT [65], ils ont obtenu la solution du modèle numériquement, et analytiquement près du point critique, où un comportement de NFL a une nouvelle fois pu être prédit. Cette approche s'est avérée fructueuse pour expliquer un comportement de NFL observé pour le composé $Ce(Ru_{0.5}Rh_{0.5})_2Si_2$ sous l'effet d'un très faible champ magnétique[4] [166].

[4]Le champ magnétique permet pour ce composé de supprimer des inhomogénéïtés spatiales liées à la présence de désordre.

Que ce soit dans le modèle étudié par Sengupta et Georges [161] ou dans son adaptation par Grempel et Rozenberg [71], la phase magnétique correspond toujours à un verre de spin de Ising. Cette situation nécessite donc l'existence pour les spins d'un axe privilégié, ce qui est généralement le cas des alliages composés d'atomes de terres rares. Il est très probable qu'en choisissant un couplage isotrope, le modèle change de classe d'universalité et conduise à un comportement en température différent, mais tout aussi NFL[5].

Plus récemment, Theumann, Coqblin *et al.* ont étudié par une approche de champ moyen statique, le modèle H_{GR} décrit précédemment[6] [170]. Cette approche permet de décrire la transition de verre de spin, ainsi que l'apparition de l'effet Kondo, caractérisé dans cette approche par une transition à la température T_K. La figure 8.4 présente le diagramme de phase obtenu pour ce modèle, mettant en évidence une annulation de la température de Kondo pour une valeur finie du rapport J_K/J. Il semblerait que l'effet Kondo disparaisse lorsque la valeur du couplage magnétique devient du même ordre que la température de Kondo du système "pur". Le système étudié par Theumann, Coqblin *et al.* [170], bien que moins riche du point de vue physique[7] que celui étudié par Grempel et Rozenberg [71], permet cependant d'en reproduire semi-quantitativement les principales propriétés. Ce travail permet ainsi de valider l'aptitude d'une approche de type champ moyen statique à tenir compte de la déstabilisation de l'effet Kondo par une interaction magnétique désordonnée.

On peut cependant s'étonner du fait que la température T_{sg} obtenue pour la transition de verre de spin ne soit pas affectée par l'approche du point critique quantique. Cet effet est un artefact du champ moyen, pour lequel la phase Kondo est délimitée par une transition du premier ordre, au delà de laquelle moments magnétiques et électrons de conduction sont décorrélés. Avec un modèle plus réaliste, où la transition Kondo serait remplacée par un crossover, on s'attend à obtenir une variation de T_{sg} à l'approche du QCP (comme indiqué sur la figure 8.3).

Ainsi, Kiselev *et al.* ont montré, en traitant ce même modèle par la méthode de Popov-Fedotov[8], que l'effet Kondo diminue la valeur de la température T_{sg} [89, 90].

Pour toutes les approches présentées dans cette sous-section, le couplage magnétique entre les spins est de type Ising, c'est à dire qu'il ne couple que les composantes longitudinales des spins. Les résultats obtenus par Grempel et Rozenberg [71] semblent pouvoir expliquer correctement les propriétés anormales d'un composé anisotrope en spin [166]. Cependant,

[5]On remarque d'ailleurs que la simplification du modèle obtenue par Grempel et Rozenberg et inspirée d'Anderson-Yuval, utilise l'anisotropie du couplage spin-spin. En effet, dans ce cas, seule l'interaction Kondo peut permettre un retournement du spin dans la direction longitudinale. Par contre, dans le cas d'un couplage isotrope, ce retournement peut également être engendré par l'interaction spin-spin, et l'approche d'Anderson-Yuval n'est plus généralisable.

[6]Il s'agit en réalité d'une légère variante de ce modèle pour laquelle la partie longitudinale de l'interaction Kondo a été supprimée. En champ moyen statique, celà est équivalent à une simple translation des potentiels chimiques.

[7]Il ne permet par exemple pas de décrire le régime de NFL obtenu près du QCP.

[8]La méthode de Popov-Fedotov [137] consiste à utiliser une représentation fermionique particulière des opérateurs de spin. Cette approche est très similaire à un traitement en champ moyen, à l'exception près qu'une contribution purement imaginaire $-i\pi T/2$ est rajoutée au multiplicateur de Lagrange λ_0 qui tient compte, en moyenne seulement, de la conservation de la charge des fermions f. Il convient alors de corriger d'un facteur $i^{\mathcal{N}}$ la fonction de partition ainsi obtenue, où $\mathcal{N}$ est le nombre total de spins, afin que cette dernière demeure réelle. Cette astuce permet d'annuler la contribution des états à zéro ou deux fermions f dans le calcul des quantités physiques.

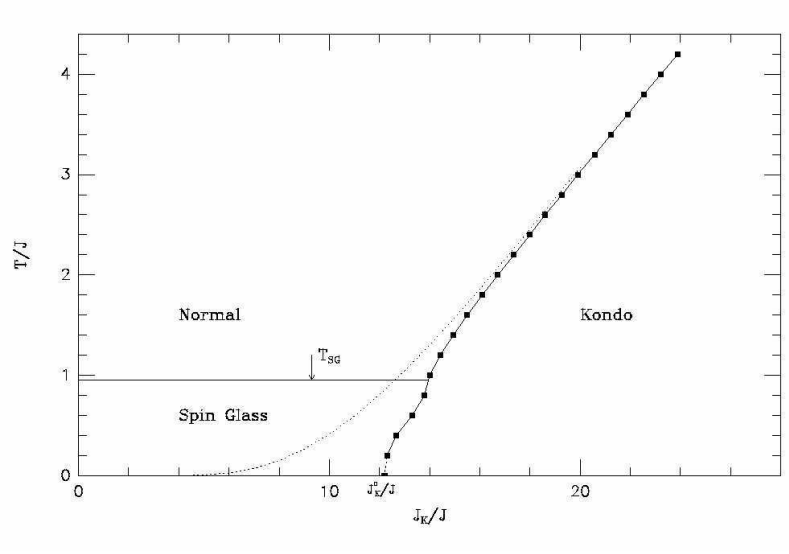


FIG. 8.4: Diagramme de phase dans le plan $T - J_K$, en fonction de T/J et de J_K/J, pour une valeur fixée de l'énergie caractéristique de l'interaction magnétique $J = 0.05D$, où D est la largeur de la bande de conduction. La ligne pointillée représente la température de Kondo sans désordre. (d'après Theumann, Coqblin *et al.* [170])

pour un composé tel que LiV_2O_4, la forte isotropie des ions V suggère de considérer une interaction magnétique isotrope[9], qui pourrait conduire à une autre classe d'universalité.

8.2.2 Correlation magnétiques isotropes

Point fixe instable décrit par Sengupta

Lorsqu'on étudie un système de spins en utilisant la théorie du champ dynamique moyen [65], on considère chaque moment magnétique local comme étant plongé dans un champ effectif fluctuant. Il s'agit d'un champ effectif auto-consistant, généré par les interactions entre le spin considéré et les autres spins du système, supposés avoir les mêmes fonctions de réponse. Outre le fait que la relation auto-consistante reliant ce champ aux fonctions de corrélation de spin dépende de la géométrie et des interactions mises en jeu, on peut aussi imaginer que le couplage entre ce champ et le moment local puisse être de nature scalaire ou vectorielle (issue par exemple d'une interaction de type Dzyaloshinski-Moriya [48]).

Sengupta s'est intéressé au cas particulier d'un couplage scalaire entre un spin et un champ magnétique effectif $\vec{h}(t)$ gaussien, distribué de manière isotrope [160]. La fonction d'auto-corrélation de ce champ est supposée décroître dans le temps, comme $\langle T\vec{h}(t).\vec{h}(0)\rangle \sim 1/t^{2-\epsilon}$, avec ϵ positif et faible. Cette situation a été réalisée notamment dans la phase paramagnétique

[9]Le terme RKKY supplémentaire correspond au modèle de verre de spin de Sherrington-Kirkpatrick [163] lorsqu'il ne couple que les composantes longitudinales des spins ; par contre, lorsque l'interaction spin-spin désordonnée est isotrope en spin, on obtient le modèle de verre de spin quantique décrit par Bray et Moore [24].

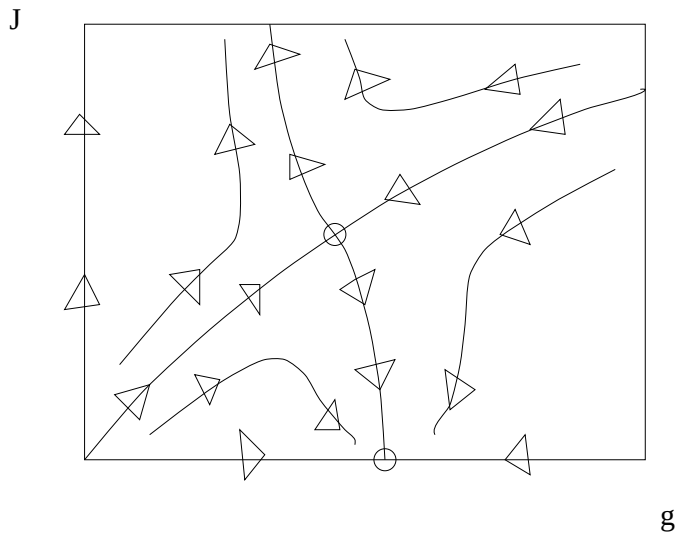


FIG. 8.5: Lignes de flux schématiques dans le plan $g - J$, où J désigne, exceptionnellement, le couplage Kondo. (d'après [160])

du modèle de verre de spin quantique décrit par Bray et Moore [24], et résolu numériquement par Grempel et Rozenberg [70]. En l'absence de couplage Kondo additionnel, Sengupta a montré que la fonction d'auto-corrélation de spin décroît comme $\langle T\vec{S}(t).\vec{S}(0)\rangle \sim 1/t^{\epsilon}$. En rajoutant à ce modèle un couplage Kondo supplémentaire entre le spin effectif local et une des électrons de conduction, il apparaît une transition entre une phase Kondo et une phase dominée par les fluctuations de spin .

Modèle de verre de spin de Sachdev

Le modèle introduit dans [153] par Sachdev et Ye, généralise à des spins de symétrie $SU(N)$ le modèle de verre de spin $SU(2)$ de Bray et Moore [24], version quantique du modèle classique de Sherrington-Kirkpatrick [163]. Ce modèle est défini par le Hamiltonien :

$$H_S = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i<j} J_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} S_{i\sigma\sigma'} S_{j\sigma'\sigma} \tag{8.3}$$

Les opérateurs de spin S_i possèdent les propriétés de symétrie du groupe $SU(N)$, et les couplages J_{ij}, aléatoires, sont distribués indépendamment selon une loi de probabilité gaussienne $P(J_{ij}) \sim \exp(-J_{ij}^2/2J^2)$. Sachdev et Ye se sont intéressés à la limite $N \to \infty$ de ce modèle [153], pour laquelle ils ont obtenu une annulation de la température de verre de spin. Des solutions symétriques en réplique existent pour des représentations particulières de $SU(N)$, bosoniques ou fermioniques. L'état obtenu à basse température caractérise une phase de type liquide de spin et pourrait permettre de décrire les propriétés dynamiques d'un système fortement frustré ne présentant pas d'ordre magnétique local. En approfondissant l'étude de ces solutions, Parcollet a montré que pour une représentation bosonique, elles deviennent

rapidement instables lorsque la densité de bosons par couleur (i.e. la composante du spin) dépasse une certaine valeur critique relativement faible [131]. D'autres solutions paramagnétiques considérées semblent reproduire assez bien les corrélations spin-spin locales obtenues pour $SU(2)$, par Grempel et Rozenberg [70]. Par la suite, Parcollet, Georges et Sachdev ont démontré que, bien que la solution de liquide de spin obtenue par Sachdev et Ye dans [153] soit valable pour une représentation fermionique des opérateurs de spin, elle est inadaptée lorsque ces même opérateurs sont décrits par une représentation bosonique. Dans ce dernier cas, une solution de verre de spin a été obtenue [66], dont la température de transition s'annule cependant avec la valeur S du spin. D'un point de vue pratique, un moyen très simple de diminuer la valeur de S consiste à écranter les spins via une interaction Kondo. Les résultats de Sengupta (voir sous-section 8.2.2 et [160]) suggèrent, dans ce cas, l'apparition d'une phase Kondo pour une valeur finie du couplage Kondo. Une généralisation des solutions de type liquide de spin obtenues par Sachdev et Ye [153] décrirait alors correctement la dynamique induite par les interactions magnétiques, dans la phase Kondo. Une telle situation peut aussi être obtenue, lorsque la frustration ne permet pas au système de s'ordonner magnétiquement. La représentation fermionique est adaptée à ces deux cas, pour lesquels, l'état fondamental du système correspond à des moments locaux écrantés, soit par effet Kondo, soit par un processus dynamique mettant en jeu les fortes corrélations avec un environnement frustré.

8.2.3 Conclusion

Si la transition, entre phase Kondo et phase de verre de spin, a été bien analysée pour un couplage longitudinal de type Ising (voir sous-section 8.2.1), peu d'études existent lorsque l'interaction magnétique désordonnée supplémentaire est de type Heisenberg, qui semble correspondre au cas de LiV_2O_4. La prise en compte de cette isotropie conduit probablement à une classe d'universalité différente de celle mise en évidence par les travaux de Georges, Sengupta, Grempel et Rozenberg [161, 71]. Parallèlement, les résultats de Theumann, Coqblin *et al.* [170], ainsi que ceux de Kiselev *et al.* [89, 90], montrent l'efficacité des approches de type champ moyen, pour étudier la compétition entre effet Kondo et ordre de verre de spin.

Dans le cadre d'une interaction magnétique de type Heisenberg, Sengupta a montré l'existence d'un point fixe instable, séparant un état fondamental de type Kondo d'un état dominé par les fluctuations de spin [160]. Il reste cependant à étudier de manière détaillée les propriétés physiques spécifiques à chaque modèle, en particulier, du modèle de Georges, Sengupta, Grempel et Rozenberg [161, 71], généralisé à une interaction magnétique désordonnée de type Heisenberg.

Le problème d'une telle généralisation consiste à pouvoir tenir compte simultanément de l'effet Kondo et de l'interaction magnétique en utilisant une description simple. Les travaux de Parcollet, Georges et Sachdev [131, 66] ont montré la richesse du modèle désordonné de symétrie $SU(N)$ introduit par Sachdev et Ye [153], ainsi que l'efficacité de la représentation fermionique pour décrire des phases non magnétiques, de type liquide de spin. Cette même représentation fermionique des opérateurs de spin ayant aussi prouvé son aptitude à tenir compte de l'effet Kondo, comme nous l'avons vu en première partie, on prévoit qu'elle soit adaptée à l'étude de transitions entre état Kondo et état de liquide de spin.

Le modèle étudié dans la suite de cette partie concerne des transitions entre phase Kondo (antiferromagnétique) et phase de liquide de spin. Il semble pertinent en tant que modèle phénoménologique permettant de justifier simultanément la masse effective importante de LiV_2O_4, et certains comportements de type liquide de spin mesurés récemment [86].

Des améliorations pourraient être apportées. Tout d'abord, en appliquant au modèle de Lacroix [97], plus naturel pour le cas précis de ce composé, les méthodes développées dans cette partie, il devrait être possible d'obtenir assez simplement le comportement des quantités physiques. Ce dernier pourrait ensuite être confronté aux résultats expérimentaux obtenus pour LiV_2O_4. Ensuite, en utilisant une représentation bosonique pour les opérateurs de spins, et en s'inspirant des méthodes développées par Parcollet [131], il pourrait être envisageable de généraliser notre étude à des transitions entre phase Kondo et phase de verre de spin.

Chapitre 9

Formulation du problème

Les considérations expérimentales et théoriques développées dans le chapitre précédent nous conduisent à nous intéresser au Hamiltonien suivant, pour lequel la symétrie $SU(2)$ des opérateurs de spin va être généralisée à une représentation fermionique du groupe $SU(N)$, afin d'accéder aux principales propriétés du système, à l'approche d'une transition entre phase Kondo et phase de type liquide de spin.

$$H = \sum_{i,j,\alpha} \bar{t}_{ij} c^{\dagger}_{i\sigma} c_{j\sigma} + \tilde{J}_K \sum_i \vec{S}_i \vec{\sigma}_i + \sum_{i,j} \bar{J}_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j \tag{9.1}$$

Ce Hamiltonien correspond à un réseau Kondo sur lequel les spins interagissent via un couplage magnétique supplémentaire, qui permet de tenir compte explicitement de l'effet des interactions de type RKKY. Nous nous intéressons ici plus particulièrement aux effets liés à la frustration induite soit par la géométrie du réseau[1], soit par la présence de désordre dans le réseau, soit les deux à la fois[2]. Dans un cas, $\bar{J}_{ij}$ est un couplage antiferromagnétique de valeur constante $\bar{J}$, et dans l'autre, $\bar{J}_{ij}$ est une variable aléatoire de valeur moyenne nulle et de variance $\bar{J}$. Traités en théorie du champ dynamique moyen [65], ces deux modèles conduisent, dans la phase paramagnétique, au même modèle effectif local. Cela nous permet de traiter la frustration indépendamment de son origine, qu'elle soit due à la géométrie ou au désordre.

9.1 Description schématique des systèmes concernés

Cette section n'est pas une démonstration mais une simple illustration de trois catégories de systèmes Kondo. Dans le premier, quelques impuretés magnétiques sont diluées sur un réseau concentré d'atomes. Les propriétés magnétiques sont données par un modèle Kondo à une impureté. Dans le deuxième, les moments magnétiques sont placés sur un réseau périodique. Cette symétrie de translation favorise la constitution d'un état cohérent qui peut être déstabilisé par la frustration magnétique. Le troisième correspond au précédent, auquel on aurait remplacé certains sites magnétiques par des sites neutres, ce qui induit un très léger désordre.

[1] Ce qui est le cas pour un composé tel que LiV_2O_4 pur.

[2] Ce qui est le cas de la série $Li_xZn_{1-x}V_2O_4$.

Atome possédant un moment magnétique :

$$|\text{Etat local}\rangle = |\text{Orbitale locale}\rangle \otimes |\text{Etat de conduction}\rangle$$

$$\bigcirc = \left|\begin{matrix}\Uparrow\\ \Downarrow\end{matrix}\right\rangle \otimes \left|\begin{matrix}\cdot\cdot\\ \uparrow\\ \downarrow\\ \uparrow\downarrow\end{matrix}\right\rangle$$

L'orbitale locale est couplée à la bande de conduction via une interaction Kondo, de couplage J_K.

Atome non magnétique :

$$|\text{Etat local}\rangle = |\text{Etat de conduction}\rangle$$

$$\bigcirc = \left|\begin{matrix}\cdot\cdot\\ \uparrow\\ \downarrow\\ \uparrow\downarrow\end{matrix}\right\rangle$$

FIG. 9.1: Légende des figures 9.2 9.3 9.4

Les interactions entre atomes sont essentiellement de deux types :

• Interaction d'échange des électrons de la bande de conduction (essentiellement entre premiers voisins, magnétiques ou non).

• Interactions magnétiques de type RKKY (uniquement entre atomes magnétiques ; oscillantes avec la distance, et pouvant avoir une portée jusqu'à quelques sites).

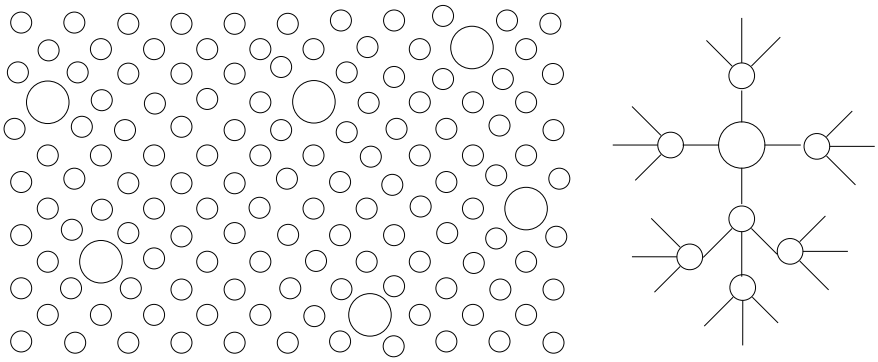


FIG. 9.2: Impuretés magnétiques diluées (schéma de gauche). Modèle à une impureté Kondo plongée dans un environnement électronique (schéma de droite). ◯ : site magnétique. ∘ : site non magnétique.

Le schéma de gauche de la figure 9.2 correspond à un alliage pour lequel les ions magnétiques sont en faible concentration. Les nuages électroniques Kondo ne se recouvrent pratiquement pas d'une impureté à l'autre, et on peut modéliser ce système par le modèle Kondo à une impureté. En dimension infinie, cela revient à considérer que chaque impureté Kondo n'est entourée que d'atomes non magnétiques, dont la dynamique électronique est simplement donnée par la structure de la bande de conduction sans interaction. Le schéma de droite de la figure 9.2 illustre ce modèle pour un réseau de Bethe de connectivité $z = 4$.

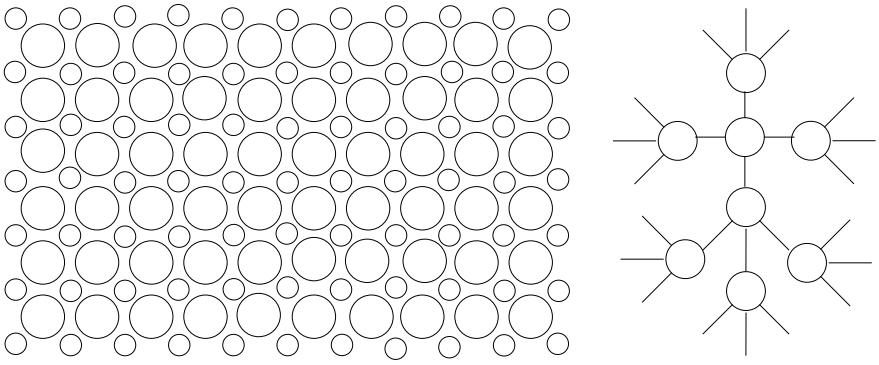


FIG. 9.3: Réseau d'impuretés magnétiques (schéma de gauche). Modèle à une impureté plongée dans un bain effectif constitué d'autres impuretés identiques (schéma de droite). ◯ : site magnétique. ∘ : site non magnétique.

Le schéma de gauche de la figure 9.3 correspond à un composé non désordonné constitué entre autres d'ions magnétiques. Les atomes non magnétiques ne nous intéressent pas directement, et on peut supposer qu'ils ne font que renormaliser les états de la bande de conduction, de sorte que le système peut être modélisé par un réseau d'ions magnétiques uniquement, possédant comme structure interne, des degrés de liberté associés à l'orbitale localisée ainsi que des degrés de liberté associés à des états de la bande de conduction (voir figure 9.1). Les nuages électroniques d'écrantage se recouvrent d'une impureté à l'autre, et ce système ne peut pas être décrit par un modèle à une seule impureté Kondo. Il faut alors utiliser un modèle sur réseau, qui tient compte des effets de corrélation entre impuretés. L'une des conséquences du chevauchement entre nuages Kondo est la présence de corrélations magnétiques de type RKKY. Comme il a été suggéré par Doniach [47], selon les valeurs du couplage Kondo et du remplissage électronique, l'échelle d'énergie caractéristique des corrélations magnétiques induites peut devenir comparable à la température de Kondo. Dans ce cas, deux situations peuvent être envisagées. D'une part, si la géométrie du réseau l'autorise, le système doit choisir entre un fondamental liquide de Fermi (du à l'effet Kondo) et un état fondamental présentant un ordre magnétique à longue distance. D'autre part, si la frustration d'origine géométrique ne permet aucun ordre à longue portée, le système doit choisir entre le même type d'état fondamental liquide de Fermi (effet Kondo) et un état fondamental de type verre de spin ou liquide de spin. Le modèle auquel nous nous intéressons s'applique à ce second cas, pour lequel le réseau est frustré (ex : LiV_2O_4). L'un des modèles les plus simples tenant compte de cette frustration est le réseau Kondo sur un arbre de Bethe (voir schéma de droite de la figure 9.3), avec une interaction antiferromagnétique supplémentaire entre premiers voisins. On peut cependant se demander pourquoi le modèle approché par un réseau de Bethe ne préférerait pas un ordre antiferromagnétique. On peut résoudre ce problème en imaginant que les différentes branches de l'arbre sont toutes reliées, à l'infini, de manière à frustrer ce réseau. Ainsi, il est légitime de chercher des solutions non magnétiques pour le modèle.

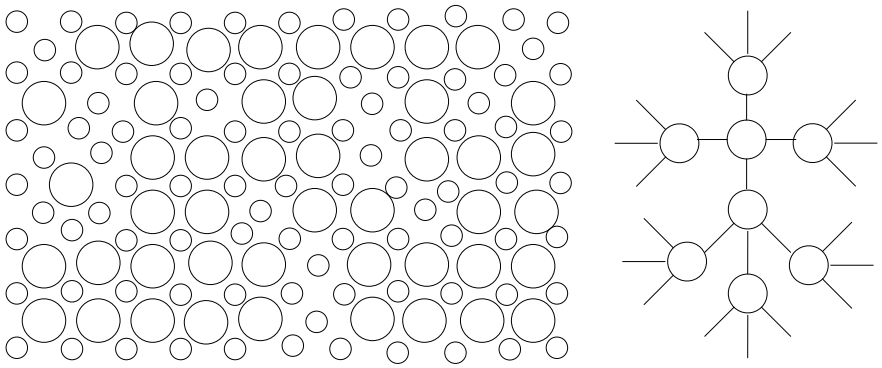


FIG. 9.4: Impuretés magnétiques concentrées avec présence de désordre (schéma de gauche). Modèle à une impureté plongée dans un bain effectif constitué d'autres impuretés identiques (schéma de droite). ◯ : site magnétique. ∘ : site non magnétique.

Le schéma de gauche de la figure 9.4 correspond à un alliage désordonné comportant une forte concentration d'ions magnétiques. Comme pour le cas d'un réseau d'ions magnétiques (voir figure 9.3), les atomes non magnétiques ne nous intéressent pas et on peut supposer que leur contribution se renormalise de sorte que le système peut être modélisé uniquement par les ions magnétiques, comme indiqué sur le schéma de droite de la figure 9.4.
Afin de traiter le problème par DMFT, on considère un site particulier du réseau d'ions magnétiques. En raison du désordre, l'environnement local du site choisi varie plus ou moins d'un site à l'autre. Quel modèle effectif local faut-il alors choisir ? Tout d'abord, l'interaction Kondo est un effet local, et il n'y a aucune raison d'imaginer une variation de la valeur du couplage J_K, qui reste constant d'un ion à l'autre. Restent le recouvrement électronique et l'interaction magnétique d'origine RKKY, qui, eux, dépendent a priori de l'environnement spécifique du site choisi. Les corrélations magnétiques de type RKKY oscillent très rapidement avec la distance (oscillations de Friedel), tandis que l'énergie d'échange électronique est beaucoup moins sensible au désordre.
On peut donc considérer que le désordre se manifeste essentiellement par une distribution des couplages magnétiques entre impuretés. Le choix d'un site particulier correspond donc au choix d'une configuration particulière pour ce désordre. Et le fait de moyenner sur toutes les configurations de désordre possible (voir sous-section 9.3.1) peut, en un sens, être vu comme une moyenne sur tous les sites possibles que l'on peut choisir pour appliquer DMFT.

9.2 Quel état fondamental pour les spins ?

A basse température, un système de spin choisit un état fondamental dont la nature dépend évidemment du type d'interaction, mais aussi fortement de la géométrie du réseau et de la présence ou non de désordre. Les modèles sont nombreux[3] et chacun peut faire l'objet d'une étude spécifique. Cependant, indépendamment de la géométrie, il est possible de distinguer différentes familles de phases pour le système, caractérisables à partir des fonctions de corrélation spin-spin $\langle \vec{S}(r,t).\vec{S}(0,0)\rangle$. Pour cela, on procède par analogie[4] avec les différents états de la matière définissables à partir des fonction de corrélation densité-densité $\langle \rho(r,t)\rho(0,0)\rangle$. On obtient ainsi :

$$\begin{array}{rcl} \langle \rho(r,t)\rho(0,0)\rangle & \Leftrightarrow & \langle \vec{S}(r,t).\vec{S}(0,0)\rangle \\ \text{gaz} & \leftrightarrow & \text{paramagnétique} \\ \text{solide cristallin} & \leftrightarrow & \text{aimant ordonné} \\ \text{verre} & \leftrightarrow & \text{verre de spin} \\ \text{liquide} & \leftrightarrow & \text{liquide de spin} \end{array}$$

En général, les transitions entre ces différentes phases peuvent être contrôlées par l'agitation thermique. Le système, cherchant à minimiser son énergie libre $\mathcal{F} = \mathcal{E} - T\mathcal{S}$, choisit toujours à température nulle ($T = 0$) un état d'énergie $\mathcal{E}$ minimale, tandis qu'à haute température, les états d'entropie $\mathcal{S}$ élevée sont favorisés. L'état paramagnétique, par son absence de corrélation spin-spin, possède une grande entropie, et correspond ainsi à un régime pour lequel la température est largement plus élevée que toutes les échelles d'énergies caractéristiques des interactions entre les spins.

Un autre type de transition peut apparaître à température nulle, lorsqu'un paramètre du système permet de changer la symétrie de l'état fondamental. De telles transitions ne sont pas contrôlées par l'entropie, le produit $T\mathcal{S}$ étant nul, mais simplement par l'énergie $\mathcal{E}$. Elles peuvent apparaître pour des systèmes classiques, un exemple simple étant la chaîne de spin classique couplés antiferromagnétiquement ; elle s'ordonne ferromagnétiquement lorsqu'on lui applique un champ magnétique supérieur au champ de saturation, dont la valeur est finie.

De manière plus générale, il est possible, pour des systèmes classiques, d'obtenir certaines transitions à $T = 0$ en augmentant la dimension du système. Pour un tel système, la phase la plus symétrique est celle qui possède la plus grande dimension. Bien sûr, augmenter la dimension d'un système peut sembler être une opération un peu formelle. Cependant, il se trouve que la prise en compte des fluctuations quantiques d'un système peut être assimilée au traitement classique du même modèle, auquel on aurait rajouté une dimension. En effet, pour un système quantique, des transitions peuvent être rendues possibles entre différents puits d'énergies, par effet tunnel. Ainsi, en augmentant un paramètre qui favorise de telles fluctuations quantiques, il est possible de voir apparaître à $T = 0$ des transitions entre un état pour lequel le système est piégé dans un puits de potentiel particulier, et un état plus symétrique, pour lequel le sys-

[3] Par exemple, pour les systèmes géométriquement frustrés, on peut entre autres citer les réseaux triangulaire, Kagomé, cubique faces centrées, Pyrochlore, ou encore diverses variantes du réseau carré.

[4] D'après Lacroix [**?**].

tème peut visiter plusieurs configurations de même énergie minimale. On parle ainsi de point critique quantique (QCP) [186].

Nous nous intéressons ici à des systèmes frustrés, de sorte que nous excluons tout ordre magnétique à longue distance (qu'il soit ferromagnétique, antiferromagnétique ou hélicoidal). De tels systèmes peuvent cependant conduire à basse température à un état de verre de spin, pour lequel le système, piégé dans des puis de potentiel très profonds, met un temps infiniment long pour atteindre l'état fondamental. Il a été montré [66] qu'une diminution de la valeur du spin S (plus S est faible plus les effets quantiques se font ressentir) peut faire fondre un verre de spin en faveur d'un état liquide de spin, plus symétrique. De manière semblable, l'interaction Kondo, en générant des corrélations de singulets locaux entre moments magnétiques et densités de spin des électrons de conduction, peut être vue comme un moyen de diminuer S, et donc d'observer une telle transition.

9.3 Action effective pour un seul site

Dans la suite de ce chapitre, je présente de manière détaillée la dérivation du modèle effectif local issu d'un traitement du Hamiltonien (8.2) par la théorie du champ dynamique moyen [65] (DMFT). Pour cela, on suppose que le réseau est un arbre de Bethe de coordination z. L'approche utilisée est exacte dans la limite $z \to \infty$, que l'on étudie sous les contraintes :

$$\boxed{\begin{aligned} \bar{t}_{ij} &= t/\sqrt{z} \qquad (9.2) \\ \bar{J}_{ij} &= \tilde{J}_{ij}/\sqrt{z} \qquad (9.3) \end{aligned}}$$

Ces dernières permettent en effet de préserver une énergie libre par site finie lorsque $z \to \infty$. On suppose que le couplage $\tilde{J}_{ij}$ est une variable aléatoire donnée par la distribution de probabilité $P(\tilde{J}_{ij})$. Cette probabilité n'est supposée non nulle que lorsque les sites i et j sont voisins directs. On suppose de plus que $\langle \tilde{J}_{ij}^2 \rangle_{\tilde{J}_{ij}} = \tilde{J}^2$, où $\langle ... \rangle_{\tilde{J}_{ij}}$ désigne la moyenne par rapport à tous les couplages $\tilde{J}_{ij}$. Cette hypothèse est vérifiée aussi bien pour le cas d'une distribution $P(\tilde{J}_{ij})$ discrète piquée en $\tilde{J}$ (i.e. couplage antiferromagnétique constant) que pour celui d'une distribution continue (i.e. modèle de verre de spin). On applique alors la méthode des répliques[5] pour tenir compte de ce désordre, que l'on suppose gelé.

9.3.1 Principe de la méthode des répliques

Le principe de la méthode méthode des répliques repose sur le fait que l'énergie libre du système est une quantité auto-moyenante. Cela signifie que dans la limite thermodynamique, l'énergie libre du système ne dépend pas de la configuration choisie par la variable $\tilde{J}_{ij}$. On en déduit que l'énergie libre reste invariante par intégration sur toutes les distributions possibles

[5] Voir, par exemple, la référence [52].

des $\tilde{J}_{ij}$, ce qui se traduit par la relation :

$$\begin{aligned}\beta\mathcal{F} &= \langle \log Z(\tilde{J}_{ij})\rangle_{\tilde{J}_{ij}} \\ &= \lim_{n\to 0} \frac{\langle Z(\tilde{J}_{ij})\rangle_{\tilde{J}_{ij}} - 1}{n} \\ &= \lim_{n\to 0} \frac{1}{n} \log \langle Z^n(\tilde{J}_{ij})\rangle_{\tilde{J}_{ij}} \end{aligned} \tag{9.4}$$

Où $\mathcal{F}$ est l'énergie libre du système, et $Z(\tilde{J}_{ij})$ la fonction de partition pour une configuration donnée des $\tilde{J}_{ij}$.

L'une des hypothèses utilisées dans la méthode des répliques consiste à supposer que $\langle Z^n(\tilde{J}_{ij})\rangle_{\tilde{J}_{ij}}$ est une fonction analytique de n. Ainsi, on exprime cette quantité pour des valeurs entières de n, en interprétant $Z^n(\tilde{J}_{ij})$ comme la fonction de partition de n répliques du système, indépendantes les unes des autres, mais toutes caractérisées par la même configuration des $\tilde{J}_{ij}$. Ensuite, en calculant $\langle Z^n(\tilde{J}_{ij})\rangle_{\tilde{J}_{ij}}$, la sommation sur les $\tilde{J}_{ij}$ engendre une action effective pour laquelle les interactions entre les spins d'une même réplique ont toutes été découplées ; en contrepartie, des corrélations entre les différentes répliques d'un même spin apparaissent, pouvant conduire à un état fondamental brisant la symétrie entre les répliques. Cet état décrit la phase de verre de spin, que nous n'avons pas étudiée. Hors de cette phase verre de spin, des corrélations spin-spin non triviales demeurent, décrivant une phase de liquide de spin.

9.3.2 Fonction de partition effective locale

Suivant les méthodes développées dans le cadre de la DMFT, partition effective locale vue depuis un site particulier du réseau. Au préalable, on introduit n répliques du système complet (défini par le Hamiltonien (8.2). On affecte d'un indice α tout opérateur agissant dans la réplique α. En introduisant les variables de Grassman, la fonction de partition du système répliqué est donnée par :

$$\begin{aligned} Z^n(\tilde{J}_{ij}) &= T_R T exp \sum_{\alpha=1}^{n} \Bigg\{ -\sum_{ij}\sum_{\sigma} \int_0^\beta d\tau c_{i\sigma}^{\dagger\alpha}(\tau) \left[\frac{t}{\sqrt{z}} + (-\partial_\tau + \mu)\delta_{ij}\right] c_{j\sigma}^{\alpha}(\tau) \\ +\mathcal{N}\mu n_c &- \sum_i \tilde{J}_K \int_0^\beta d\tau \vec{S}_i^\alpha(\tau).\vec{\sigma}_i^\alpha(\tau) - \sum_{ij} \frac{\tilde{J}_{ij}}{\sqrt{z}} \int_0^\beta d\tau \vec{S}_i^\alpha(\tau).\vec{S}_j^\alpha(\tau) \Bigg\} \end{aligned} \tag{9.5}$$

On s'intéresse alors à un site particulier du réseau, que l'on note arbitrairement $i = 0$. On calcule donc la trace partielle par rapport à tous les opérateurs n'agissant pas sur ce site. On obtient :

$$\begin{aligned} \langle Z^n(\tilde{J}_{ij})\rangle_{\tilde{J}_{ij}} &= Z_0 T_{R0} \Bigg[T\Xi_0 exp \Bigg\{ -\sum_\alpha \int_0^\beta d\tau \\ &\quad [\tilde{J}_K \vec{S}_0^\alpha(\tau).\vec{\sigma}_0^\alpha(\tau) + \sum_\sigma c_{0\sigma}^{\dagger\alpha}(\tau)[-\partial_\tau + \mu)]c_{0\sigma}^{\alpha}(\tau) - \mu n_c] \Bigg\} \Bigg] \end{aligned} \tag{9.6}$$

T_{R0} représente la trace par rapport aux opérateurs agissant sur le site $i = 0$ uniquement. La fonction de partition Z_0 correspond à la fonction de partition du même modèle (répliqué n fois), sur lequel on aurait retiré le site $i = 0$. L'opérateur composite Ξ_0, qui apparaît dans l'expression (9.7) de $\langle Z^n(\tilde{J}_{ij})\rangle_{\tilde{J}_{ij}}$, est donné par :

$$\begin{aligned}\Xi_0 &= \left\langle Texp - \sum_\alpha \sum_{j\neq 0} \int_0^\beta d\tau \left[\frac{t_{0j}}{\sqrt{z}} \sum_\sigma \left(c_{0\sigma}^{\dagger\alpha}(\tau) c_{j\sigma}^{\alpha}(\tau) + c_{j\sigma}^{\dagger\alpha}(\tau) c_{0\sigma}^{\alpha}(\tau) \right) \right.\right. \\ &+ \left.\left. \frac{\tilde{J}_{0j}}{\sqrt{z}} \sum_\sigma \vec{S}_0^\alpha(\tau).\vec{S}_j^\alpha(\tau) \right] \right\rangle_0 \end{aligned} \tag{9.7}$$

$\langle ...\rangle_0$ correspond à la valeur moyenne calculée sur tous les sites $j \neq 0$, avec intégration sur les distributions $P(\tilde{J}_{ij})$ correspondantes. On suppose que le réseau est un arbre de Bethe, ce qui revient à négliger les corrélations entre les z différentes branches du réseau, qui étaient reliées par le site $i = 0$. On peut donc factoriser Ξ_0 sous la forme :

$$\begin{aligned}\Xi_0 &= \prod_{j\neq 0} \left\langle Texp - \sum_\alpha \int_0^\beta d\tau \left[\frac{t_{0j}}{\sqrt{z}} \sum_\sigma \left(c_{0\sigma}^{\dagger\alpha}(\tau) c_{j\sigma}^{\alpha}(\tau) + c_{j\sigma}^{\dagger\alpha}(\tau) c_{0\sigma}^{\alpha}(\tau) \right) \right.\right. \\ &+ \left.\left. \frac{\tilde{J}_{0j}}{\sqrt{z}} \sum_\sigma \vec{S}_0^\alpha(\tau).\vec{S}_j^\alpha(\tau) \right] \right\rangle_0 \end{aligned} \tag{9.8}$$

On calcule alors la valeur moyenne$\langle ...\rangle_0$ à l'aide d'un développement en cumulants :

$$\Xi_0 = exp\left\{ \sum_{p=1}^{+\infty} \frac{C_p}{p!} \right\} \tag{9.9}$$

C_p est le cumulant d'ordre p, faisant intervenir des fonctions de corrélation entre p opérateurs de type c_j, $c_j^\dagger$ ou $\vec{S}_j$. La conservation du nombre de particules et l'absence supposée d'ordre magnétique impliquent la nullité de tous les cumulants C_p d'ordre p impair. De plus, on trouve que[6] $C_p = \mathcal{O}\left(z^{1-p/2}\right)$. Par conséquent, dans la limite $z \to \infty$, on a :

$$\Xi_0 = exp\left\{ C_2/2 + \mathcal{O}(1/z) \right\} \tag{9.10}$$

On trouve :

$$\begin{aligned} C_2 &= 2t^2 \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\sigma\sigma'} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' c_{0\sigma}^{\dagger\alpha}(\tau) c_{0\sigma'}^{\alpha'}(\tau') \frac{1}{z} \sum_{j\neq 0} \left\langle c_{j\sigma}^{\alpha}(\tau) c_{j\sigma'}^{\dagger\alpha'}(\tau') \right\rangle_0 \\ &+ \sum_{\nu\nu'} \sum_{\alpha\alpha'} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' S_{0\nu}^{\alpha}(\tau) S_{0\nu'}^{\alpha'}(\tau') \frac{1}{z} \sum_{j\neq 0} (\tilde{J}_{0j})^2 \left\langle S_{j\nu}^{\alpha}(\tau) S_{j\nu'}^{\alpha'}(\tau') \right\rangle_0 \end{aligned} \tag{9.11}$$

[6] On rappelle que z est le nombre de voisins du site 0.

On définit alors la fonction de partition locale à n répliques par

$$Z_{loc}^{(n)} = \frac{Z^n(\tilde{J}_{ij})}{Z_0} \tag{9.12}$$

$Z_{loc}^{(n)}$ et l'action qui lui est associée permettent d'accéder à toutes les fonctions de Green locales, que l'on suppose indépendantes du site choisi [7]. Les fonctions de corrélations intervenant dans C_2 peuvent ainsi être calculées de manière autoconcistante à partir de $Z_{loc}^{(n)}$. Les indices 0 ou j sur les opérateurs deviennent alors superflus, et il est implicite que les opérateurs agissent tous sur le même site 0. La valeur moyenne notée $\langle ... \rangle_0$ doit aussi être remplacée par une valeur moyenne $\langle ... \rangle_{loc}^{(n)}$ qui se calcule à partir de $Z_{loc}^{(n)}$. Dans la limite $z \to \infty$, on a :

$$\frac{1}{z}\sum_{j\neq 0}(\tilde{J}_{0j})^2 = \tilde{J}^2 \tag{9.13}$$

Finalement, en utilisant les relations (9.7), (9.10), (9.11) et (9.13), la fonction de partition locale s'écrit :

$$\begin{aligned} Z_{loc}^{(n)} &= T_R T exp\Bigg\{ \mathcal{O}(1/z) \qquad (9.14) \\ &- \sum_{\alpha}\int_0^{\beta} d\tau \left[\tilde{J}_K \vec{S}^{\alpha}(\tau).\vec{\sigma}^{\alpha}(\tau) + \sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger\alpha}(\tau)[-\partial_\tau + \mu)]c_{\sigma}^{\alpha}(\tau) - \mu n_c\right] \\ &+ t^2 \sum_{\alpha\alpha'}\sum_{\sigma\sigma'}\int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' c_{\sigma}^{\dagger\alpha}(\tau) c_{\sigma'}^{\alpha'}(\tau')\Big\langle c_{\sigma}^{\alpha}(\tau) c_{\sigma'}^{\dagger\alpha'}(\tau')\Big\rangle_{loc}^{(n)} \\ &+ \frac{\tilde{J}^2}{2}\sum_{\nu\nu'}\sum_{\alpha\alpha'}\int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' S_{\nu}^{\alpha}(\tau) S_{\nu'}^{\alpha'}(\tau')\Big\langle S_{\nu}^{\alpha}(\tau) S_{\nu'}^{\alpha'}(\tau')\Big\rangle_{loc}^{(n)}\Bigg\} \end{aligned}$$

Remarque : Les valeurs moyennes $\langle ... \rangle_0$ sont calculées à partir de la fonction de partition Z_0, correspondant au même modèle, sur lequel on a retiré le site $i = 0$. Puisque nous considérons un réseau de Bethe, les z ex-voisins du site $i = 0$ sont découplés les uns des autres et correspondent chacun à la même fonction de partition $(Z_0)^{1/z}$. L'énergie libre étant une grandeur extensive, en notant $\mathcal{N}$ le nombre total de sites, on obtient alors dans la limite thermodynamique $\mathcal{N} \to \infty$ la relation $\left[\langle Z^n(\tilde{J}_{ij})\rangle_{\tilde{J}_{ij}}\right]^{1/N} = \left[(Z_0)^{1/z}\right]^{\frac{1}{(N-1)/z}}$. On en déduit que $Z_0 = [Z_{loc}^{(n)}]^{N-1}$, puis que $\langle Z^n(\tilde{J}_{ij})\rangle_{\tilde{J}_{ij}} = \left[Z_{loc}^{(n)}\right]^N$. Ce résultat prouve que l'énergie libre "locale" associée à $Z_{loc}^{(n)}$ correspond bien à l'énergie libre totale divisée par le nombre de sites.

[7] Cette hypothèse exclut ainsi toute phase pour laquelle l'état fondamental aurait une symétrie plus faible que celle du réseau Ainsi, par exemple, l'ordre antiferromagnétique est exclu de cette approche, mais les liquides de spin sont autorisés.

9.3.3 Solution symétrique

On cherche, pour le problème auto-consistant local défini par la fonction de partition (9.14), une solution non magnétique et symétrique par rapport aux répliques, sous la forme :

$$\boxed{\begin{aligned} \left\langle c_\sigma^\alpha(\tau) c_{\sigma'}^{\dagger\alpha'}(\tau') \right\rangle_{loc}^{(n)} &\equiv -\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\sigma\sigma'} G_c(\tau-\tau') \quad (9.15) \\ \left\langle S_\nu^\alpha(\tau) S_{\nu'}^{\alpha'}(\tau') \right\rangle_{loc}^{(n)} &\equiv \frac{1}{3}\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\nu\nu'}\chi_{loc}(\tau-\tau') \quad (9.16) \end{aligned}}$$

On obtient ainsi une énergie libre par site et par réplique :

$$\mathcal{F} = -\beta \lim_{n\to 0} \frac{1}{n} ln[Z_{loc}^{(n)}] = -\beta ln[Z_{loc}] \tag{9.17}$$

Avec :

$$\boxed{\begin{aligned} Z_{loc} &= e^{-\beta\mu n_c} T_R T exp\left\{ \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \sum_\sigma c_\sigma^\dagger(\tau) \mathcal{G}_c^{-1}(\tau-\tau') c_\sigma(\tau') \right. \\ &+ \left. \tilde{J}_K \int_0^\beta d\tau \vec{S}(\tau).\vec{\sigma}(\tau) + \frac{\tilde{J}^2}{2} \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \chi_{loc}(\tau-\tau') \vec{S}(\tau).\vec{S}(\tau') \right\} \quad (9.18) \end{aligned}}$$

Où l'on a défini :

$$\boxed{\mathcal{G}_c^{-1}(\tau-\tau') = (-\partial_\tau + \mu)\delta(\tau-\tau') - t^2 G_c(\tau-\tau') \qquad (9.19)}$$

Lorsque $\tilde{J}_K = 0$, la bande de conduction est complètement découplée du système de spin, et on trouve $\mathcal{G}_c(\omega) = G_c(\omega) \equiv G_c^0(\omega+\mu)$, solution de l'équation auto-consistante (9.19), qui se réduit dans ce cas particulier à une équation du second degré. La contrainte $G_c^0(i\omega_n) \propto 1/i\omega_n$ lorsque $i\omega_n \to \infty$ et l'analyticité de la fonction de Green suffisent, dans ce cas, pour déterminer complètement G_c^0 :

$$G_c^0(i\omega_n) = \frac{i\omega_n}{2t^2}\left[1 - \sqrt{1 - 4\left(\frac{t}{i\omega_n}\right)^2}\right] \tag{9.20}$$

Cette fonction de Green correspond à la densité spectrale semi-elliptique associée au réseau de Bethe libre

$$\rho_c^0(\omega) = -\frac{\theta(2t-|\omega|)}{2\pi t^2}\sqrt{4t^2-\omega^2} \tag{9.21}$$

Lorsque $\tilde{J}_K$ est non nul, l'effet Kondo ne peut pas être traité perturbativement à basse température. Par conséquent, $\mathcal{G}_c$ diffère fortement de G_c (et donc de G_c^0). En effet, comme nous l'avons vu dans la première partie, pour laquelle nous avions $\tilde{J} = 0$, les impuretés magnétiques (que représente le spin $\vec{S}$) participent à basse température à l'élargissement de la surface de Fermi du système, affectant de manière non triviale la fonction de Green des électrons de conduction.

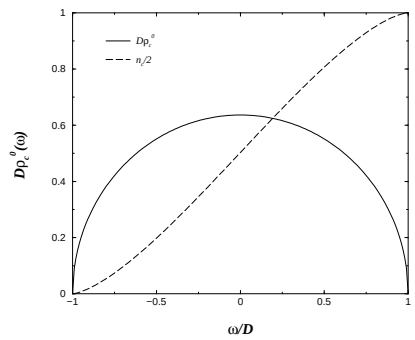


FIG. 9.5: Densité d'états semi-circulaire $D\rho_c^0(\omega/D)$ (trait plein), normalisée par la demi-largeur de bande D. Les pointillés représentent le niveau de remplissage électronique par composante de spin, $n_c/2$, en fonction de la position du potentiel chimique normalisé μ_0/D.

9.4 Représentation fermionique des spins

Nous utilisons une représentation fermionique des opérateurs de spin, dont on a généralisé le groupe de symétries à $SU(N)$. L'action locale correspondant à la fonction de partition Z_{loc} se généralise à partir de l'expression (9.18), selon les règles suivantes :

$$\boxed{\begin{aligned} SU(2) &\leftrightarrow SU(N) \\ \vec{S}.\vec{\sigma} &\leftrightarrow \sum_{\sigma\sigma'}[f_\sigma^\dagger f_{\sigma'} - \delta_{\sigma\sigma'}/2][c_{\sigma'}^\dagger c_\sigma - \delta_{\sigma\sigma'}/2] \\ \vec{S}(\tau).\vec{S}(\tau') &\leftrightarrow \sum_{\sigma\sigma'}[f_\sigma^\dagger(\tau) f_{\sigma'}(\tau) - \delta_{\sigma\sigma'}/2][f_{\sigma'}^\dagger(\tau') f_\sigma(\tau') - \delta_{\sigma\sigma'}/2] \\ \tilde{J}_K &\leftrightarrow J_K/N \\ \tilde{J} &\leftrightarrow J/\sqrt{N} \end{aligned}} \qquad (9.22)$$

On impose aux fermions d'Abrikosov la contrainte suivante :

$$\boxed{\sum_\sigma f_\sigma^\dagger f_\sigma = \frac{N}{2} \qquad (9.23)} \qquad \rightarrow \qquad \lambda(\tau)$$

De même, on impose aux électrons de conduction d'avoir une concentration moyenne n_c par composante de spin qui soit indépendante de N :

$$\boxed{\sum_\sigma \langle c_\sigma^\dagger c_\sigma \rangle = N\frac{n_c}{2} \qquad (9.24)} \qquad \rightarrow \qquad \mu$$

Pour tenir compte de ces contraintes, on introduit le potentiel chimique μ (électrons de conduction) et le multiplicateur de Lagrange $\lambda(\tau)$ (fermions d'Abrikosov). Les termes en $\delta_{\sigma\sigma'}$ ne contribuent pas aux propriétés dynamiques du système. Leurs contributions à l'action généralisée prend la même forme que les termes liés aux contraintes ; on les élimine donc de notre modèle généralisé, modulo une redéfinition de μ et de $\lambda(\tau)$. On note $Z_{loc}^{(N)}$ la fonction de partition généralisée. L'action locale $\mathcal{A}$, définie par $Z_{loc}^{(N)} = T_R T exp\mathcal{A}$, prend donc la forme suivante :

$$\begin{aligned}
\mathcal{A} &= \sum_\sigma \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' c_\sigma^\dagger(\tau)\mathcal{G}_c^{-1}(\tau-\tau')c_\sigma(\tau') + \sum_\sigma \int_0^\beta d\tau f_\sigma^\dagger(\tau)[-\partial_\tau + i\lambda(\tau)]f_\sigma(\tau') \\
&+ \frac{J_K}{N}\sum_{\sigma\sigma'}\int_0^\beta d\tau f_\sigma^\dagger(\tau)f_{\sigma'}(\tau)c_{\sigma'}^\dagger(\tau)c_\sigma(\tau) \qquad (9.25)\\
&+ \frac{J^2}{N}\sum_{\sigma\sigma'}\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \chi_{loc}(\tau-\tau')f_\sigma^\dagger(\tau)f_{\sigma'}(\tau)f_{\sigma'}^\dagger(\tau')f_\sigma(\tau') + \frac{i}{2}\lambda(\tau) + \frac{n_c}{2}
\end{aligned}$$

χ_{loc} étant déterminée de manière auto-consistante par la relation :

$$\chi_{loc}(\tau-\tau') = \sum_{\sigma\sigma'}\left\langle (f_\sigma^\dagger(\tau)f_{\sigma'}(\tau) - \delta_{\sigma\sigma'}/2)(f_{\sigma'}^\dagger(\tau')f_\sigma(\tau') - \delta_{\sigma\sigma'}/2)\right\rangle_{\mathcal{A}} \qquad (9.26)$$

Dans cette action (9.25), le terme Kondo tout comme l'interaction d'origine magnétique font intervenir simultanément quatre opérateurs fermioniques. Une résolution exacte du modèle semble ainsi peu envisageable pour N quelconque. Une méthode de type champ moyen nous permet d'approcher le modèle par un modèle effectif dont l'action est quadratique en opérateurs fermioniques et selon les méthodes développées lors des traitements séparés du modèle Kondo seul (Cf. première partie et [140]) et de l'interaction magnétique spin-spin [153]. Ces deux interactions sont alors traitées par des transformations de Hubbard-Stratonovitch [8]. On obtient :

$$\boxed{\begin{aligned}
Z_{loc}^{(N)} &= \int \mathcal{D}B(\tau)\int \mathcal{D}\eta(\tau,\tau')T_R T exp\left[N\mathcal{S}_0 + \sum_\sigma \mathcal{S}_\sigma\right] \qquad (9.27)\\
&\times\ T exp\left\{-\frac{N}{J_K}\int_0^\beta d\tau B^*(\tau)B(\tau) - N\int_0^\beta d\tau\int_0^\beta d\tau'\eta^*(\tau,\tau')\eta(\tau,\tau')\right\}
\end{aligned}}$$

Avec :

$$\boxed{\begin{aligned}
\mathcal{S}_\sigma &= \int_0^\beta d\tau\int_0^\beta d\tau'\left[c_\sigma^\dagger(\tau)\mathcal{G}_c^{-1}(\tau-\tau')c_\sigma(\tau') + f_\sigma^\dagger(\tau)\mathcal{G}_f^{-1}(\tau,\tau')f_\sigma(\tau')\right] \\
&+ \int_0^\beta d\tau\left[B(\tau)f_\sigma^\dagger(\tau)c_\sigma(\tau) + B^*(\tau)c_\sigma^\dagger(\tau)f_\sigma(\tau) - \mu\frac{n_c}{2} - \frac{i}{2}\lambda(\tau)\right] \qquad (9.28)
\end{aligned}}$$

[8] Le découplage de l'interaction spin-spin est donné en annexe F, comme exemple.

et

$$\boxed{\mathcal{S}_0 \propto -J^2 \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' G_f(\tau-\tau')G_f(\tau'-\tau) \qquad (9.29)}$$

et

$$\boxed{\mathcal{G}_f^{-1}(\tau,\tau') = (-\partial_\tau + i\lambda(\tau))\delta(\tau-\tau') + J[\eta^*(\tau,\tau') + \eta(\tau',\tau)]G_f(\tau-\tau') \qquad (9.30)}$$

Dans la limite $N \to \infty$, les intégrales sur $B(\tau)$ et $\eta(\tau,\tau')$ sont dominées par leurs valeurs au point de col. $B(\tau)$ devient alors statique, et $\eta(\tau,\tau')$ ne dépend plus que de $\tau - \tau'$. Le potentiel $\lambda(\tau)$ prend aussi une valeur statique, donnée par $i\lambda(\tau) = \mu + \lambda_0$. Alors, on a :

$$B(\tau) = B^*(\tau) = -J_K G_{fc}(\tau = 0^-) \equiv r \qquad (9.31)$$

$$\eta(\tau,\tau') = \eta^*(\tau,\tau') = -JG_f(\tau-\tau')G_f(\tau'-\tau) \qquad (9.32)$$

On en déduit que $\mathcal{G}_f(\tau,\tau')$ ne dépend que de $\tau - \tau'$. L'action $\mathcal{S}_\sigma$ est alors diagonale en fréquences, et on trouve :

$$G_c(i\omega_n) = \frac{\mathcal{G}_f^{-1}(i\omega_n)}{\mathcal{G}_f^{-1}(i\omega_n)\mathcal{G}_c^{-1}(i\omega_n) - r^2} \qquad (9.33)$$

$$G_f(i\omega_n) = \frac{\mathcal{G}_c^{-1}(i\omega_n)}{\mathcal{G}_f^{-1}(i\omega_n)\mathcal{G}_c^{-1}(i\omega_n) - r^2} \qquad (9.34)$$

$$G_{fc}(i\omega_n) = \frac{-r}{\mathcal{G}_f^{-1}(i\omega_n)\mathcal{G}_c^{-1}(i\omega_n) - r^2} \qquad (9.35)$$

Avec les relations d'auto-consistance :

$$\boxed{\begin{aligned}
\mathcal{G}_c^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n + \mu - t^2 G_c(i\omega_n) && (9.36)\\
\mathcal{G}_f^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n + \mu + \lambda_0 - \Sigma_{loc}(i\omega_n) && (9.37)\\
-\Sigma_{loc}(\tau) &= J^2 G_f^2(\tau) G_f(-\tau) && (9.38)\\
-r/J_K &\equiv G_{fc}(\tau = 0^-) && (9.39)\\
n_c/2 &= G_c(\tau = 0^-) && (9.40)\\
1/2 &= G_f(\tau = 0^-) && (9.41)
\end{aligned}}$$

En utilisant l'équation (9.36), on peut mettre les fonctions de Green (9.33), (9.34) et (9.35) sous la forme :

$$\boxed{\begin{aligned}
G_c(i\omega_n) &= G_c^0\left(i\omega_n + \mu - r^2\mathcal{G}_f(i\omega_n)\right) && (9.42)\\
G_f(i\omega_n) &= \mathcal{G}_f(i\omega_n)\left[1 + r^2\mathcal{G}_f(i\omega_n)G_c(i\omega_n)\right] && (9.43)\\
G_{fc}(i\omega_n) &= r\mathcal{G}_f(i\omega_n)G_c(i\omega_n) && (9.44)
\end{aligned}}$$

Où $\mathcal{G}_f$ est donnée par la relation (9.37) et G_c^0 désigne la fonction de Green définie par la relation (9.20), associée à une densité d'états semi-elliptique (voir figure 9.5). On montre très facilement que les expressions (9.42), (9.43) et (9.44) des fonctions de Green locales constituent un résultat assez général ne dépendant pas de la forme spécifique de G_c^0. Nous avons utilisé ici un réseau de Bethe afin de tenir compte de manière simple de l'interaction magnétique. Une fois l'action locale dérivée, on peut ensuite reconsidérer un modèle sur réseau quelconque, dont l'action correspond au réseau Kondo de symétrie $SU(N)$ avec une contribution spin-spin locale supplémentaire. Dans la limite $N \to \infty$, pour une représentation fermionique des opérateurs de spin, la corrélation spin-spin induit simplement une self-énergie locale Σ_{loc}. L'action généralisée, diagonale en couleur de spin, prend la forme :

$$\mathcal{A}_{\text{généralisée}} = \mathcal{A}_{\text{Réseau Kondo}} + \sum_i \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' f_{i\sigma}^\dagger(\tau)\Sigma_{loc}(\tau-\tau')f_{i\sigma}(\tau') \tag{9.45}$$

$\mathcal{A}_{\text{Réseau Kondo}}$ est l'action (3.23) correspondant au réseau Kondo, traitée dans la première partie. Avec un tel modèle, on retrouve exactement le même jeu d'expressions (9.42), (9.43) et (9.44), analogues des relations (4.6), (4.7) et (4.8), dans lesquelles G_c^0 désigne la fonction de Green libre des électrons sans couplage Kondo, et ρ_c^0 la densité spectrale associée. Cela prouve donc que, si la géométrie spécifique du réseau considéré peut affecter quantitativement les résultats, elle ne change absolument rien aux résultats qualitatifs et semi-quantitatifs que nous pouvons déduire de ces équations. De même, nous nous sommes intéressés à la forme spécifique de Σ_{loc}, donnée par la relation (9.38), qui provient de l'interaction spin-spin dans le Hamiltonien (8.2). Plusieurs des résultats de cette partie ne dépendent en réalité pas de la forme particulière de Σ_{loc}, mais seulement du fait que la partie imaginaire de cette self-énergie introduit à basse fréquence un cut-off (pour le cas présent, il s'agit de J) pour la fonction $\mathcal{G}_f(\omega + i0^+)$, atténuant ainsi la divergence logarithmique caractéristique de l'effet Kondo (voir sous-section 11.1.2).
Exprimées en fréquences réelles, les équations de col (9.38), (9.39), (9.40) et (9.41) deviennent :

$$\left\{-\frac{r}{J_K}, \frac{1}{2}, \frac{n_c}{2}\right\} = -\int_{-\infty+i0^+}^{+\infty+i0^+} \frac{d\omega}{\pi}\mathcal{I}m\left[\{G_{fc}(\omega), G_f(\omega), G_c(\omega)\}\right] n_F(\omega) \tag{9.46}$$

$$\mathcal{I}m\Sigma_{loc}(\omega+i0^+) = -\pi J^2 \int_0^\omega d\omega_1 \int_0^{\omega-\omega_1} d\omega_2 \rho_f(\omega_1)\rho_f(\omega_2)\rho_f(\omega_1+\omega_2-\omega) \tag{9.47}$$

Chapitre 10

Cas particulier : le modèle de Sachdev

Hors de la phase Kondo, les fermions f et les électrons de la bande de conduction sont entièrement découplés. Les propriétés des électrons de conduction sont alors celles d'un métal normal, caractérisé par la densité spectrale ρ_c^0. Le système constitué par les fermions f correspond alors à la représentation fermionique du liquide de spin décrit par Sachdev et Ye dans [153]. La fonction de Green G_f des fermions f vaut alors G_S, solution des équations (9.37) et (9.38), avec $\mathcal{G}_f = G_f$ et $r = \mu + \lambda_0 = 0$:

$$\boxed{\begin{aligned} G_S^{-1}(i\omega_n) &= i\omega_n - \Sigma_S(i\omega_n) \quad (10.1) \\ \Sigma_S(\tau) &= J^2 G_S^3(\tau) \quad (10.2) \end{aligned}}$$

La condition de symétrie particule-trou $G_S(\tau = 0^-) = 1/2$ (eq. (9.41)) est automatiquement vérifiée par la condition $\mu + \lambda_0 = 0$. Exprimée en fréquences réelles, la relation entre $\mathcal{I}m\Sigma_S$ et ρ_S est formellement identique à celle reliant $\mathcal{I}m\Sigma_{loc}$ et ρ_f (équation (9.47)). Sachdev et Ye ont montré que ce système n'admet pas de solution présentant un gap au niveau de Fermi [153]. On s'en convainc facilement en raisonnant par l'absurde. En effet, la présence d'un tel gap sur le spectre de $\rho_S(\omega)$ impliquerait l'existence d'un gap trois fois plus large sur le spectre de $\mathcal{I}m\Sigma_S(\omega)$ (d'après l'équation (9.47)), ce qui serait incohérent avec l'équation de Dyson (10.1). Ils ont cherché une solution divergente au niveau de Fermi, sous la forme $\rho_S(\omega) \propto \omega^\alpha$ (avec $\alpha < 0$). Une telle divergence implique à basse fréquence une annulation de la self-énergie, $\Sigma_S(\omega) \propto \omega^{2+3\alpha}$. L'équation de Dyson (10.1) peut ainsi être vérifiée pour $\alpha = -1/2$.
Parcollet et Georges ont montré que dans le régime $max(|\omega|, T) << J$, la fonction de Green peut se mettre sous la forme $G_S(\omega) = 1/(\sqrt{JT})\Phi(\omega/T)$, où $\Phi(x)$ est une fonction d'échelle universelle [132]. On peut ainsi obtenir le régime asymptotique suivant :

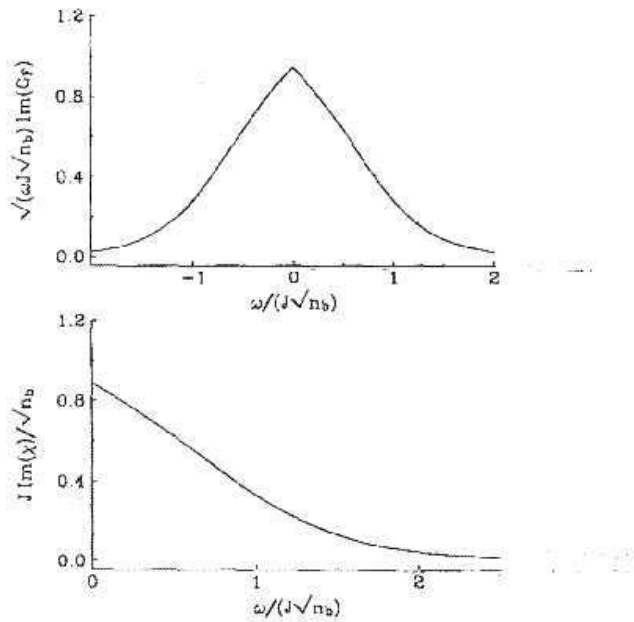


FIG. 10.1: Poids spectraux de G_S (en haut) et de χ^S_{loc} (en bas). n_B est relié à χ^S_{loc} par la règle de somme $\int_0^\infty d\omega \mathcal{I}m[\chi^S_{loc}(\omega)] = \pi n_B/4$ (d'après [153]).

$$\boxed{G_S(\omega) \approx \begin{cases} \frac{\Gamma[1/4]^2}{2\pi^{5/4}} \frac{\omega/2T - i}{\sqrt{JT}}, & |\omega| < T << J, \\ \left(\frac{\pi}{4}\right)^{1/4} \frac{sign(\omega) - i}{\sqrt{J|\omega|}}, & T < |\omega| << J, \\ 1/\omega, & T \text{ ou } |\omega| \gtrsim J \end{cases}} \tag{10.3}$$

La figure 10.1 présente les poids spectraux de G_S et de χ^S_{loc} (susceptibilité magnétique). La linéarité de $\sqrt{J\omega}G_S(\omega)$ à basse fréquence illustre le comportement asymptotique (10.3).

Une généralisation de ce modèle a été étudiée par Parcollet et Georges [132], pour laquelle une dispersion a été rajoutée pour la bande f, et l'effet d'un léger dopage en trous a été étudié. On obtient ainsi un modèle $t - J$ présentant certaines similitudes avec notre modèle Kondo désordonné. De façon imagée, les trous du modèle $t - J$ étudié par Parcollet et Georges pourraient être les singulets Kondo de notre modèle, et le liquide de spin décrit dans [132] serait dans notre cas une sorte de liquide de spin célibataires. L'analogie est cependant à considérer avec prudence, dans la mesure où la bande de singulets renormalisée dépendrait du paramètre auto-consistant r. Par conséquent, s'il est possible d'extrapoler les résultats de [132] en considérant r comme constant, la simplification de notre modèle par un modèle $t - J$ ne permet pas d'étudier la transition $r = 0$ et le QCP qui s'y rapporte (voir chapitre 11).

Chapitre 11

Diagramme de phase de notre modèle

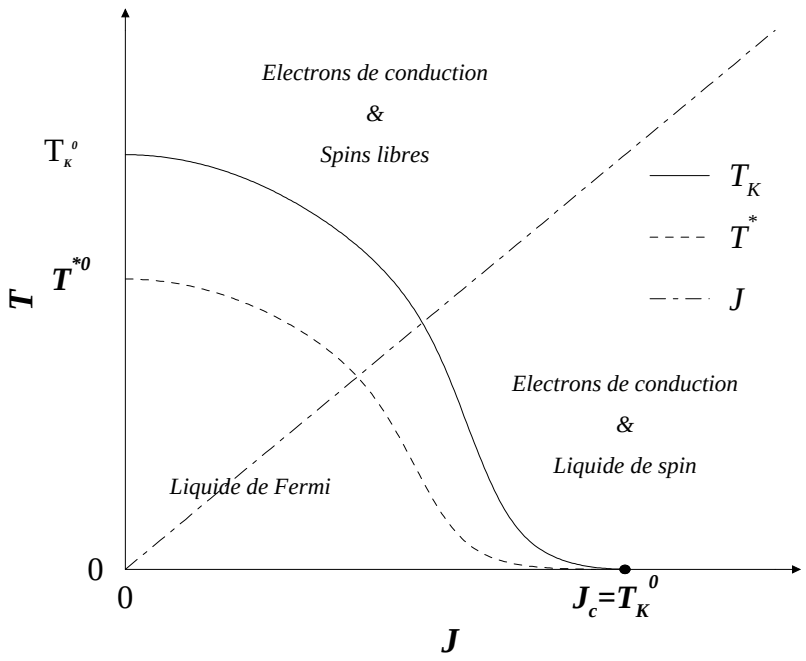


FIG. 11.1: Diagramme de phase schématique du modèle dans le plan $J - T$. Température de Kondo (trait pleins) et température de cohérence (pointillés) en fonction de J, pour J_K et n_c fixés.

La figure 11.1 représente schématiquement le diagramme de phase du modèle. Le système possède les propriétés d'un liquide de Fermi en dessous de $T^\star(J)$. Au dessus de $T_K(J)$, les spins, décorrélés des électrons de conduction, sont soit libres soit dans un état de liquide de spin, selon que T est supérieure ou inférieure à la température de crossover ($\propto J$).

11.1 Température de Kondo généralisée

En l'absence de l'interaction magnétique ($J = 0$), le modèle redevient un simple réseau Kondo, étudié dans la première partie de ce manuscrit. L'apparition de l'effet Kondo est marqué par un crossover, à la température T_K, pour lequel des corrélations singulets apparaissent entre moments localisés et densités de spin locales des électrons de conduction. Nous avons vu que ce crossover devient une transition dans la limite $N \to \infty$, définie par l'annulation du paramètre d'ordre r. Nous généralisons ainsi au cas $J \neq 0$ la définition de T_K comme étant la température pour laquelle le paramètre r s'annule.
L'équation pour T_K s'obtient à partir du premier membre des équations de col (9.46) :

$$\frac{1}{J_K} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{\pi} n_F(\omega) \mathcal{I}m \left[G_c^{(0)}(\mu + \omega) G_S(\omega) \right] \tag{11.1}$$

Dans cette expression, généralisation de la relation (5.2) obtenue dans la première partie, $G_S(\omega)$ désigne la fonction de Green solution du modèle de Sachdev, décrite au chapitre 10.

11.1.1 Limite réseau Kondo seul

En prenant $J = 0$, on retrouve $G_S(\omega) = 1/\omega$. Alors, l'équation pour $T_K(J = 0) \sim T_K^0$ devient l'équation (5.2) obtenue dans la première partie et étudiée dans l'annexe B. Mathématiquement, le comportement de $G_S(\omega) = 1/\omega$ induit une divergence logarithmique de l'intégrale du membre de droite de l'équation (11.1). Cette divergence est coupée à hautes fréquences, par le cut-off D de la bande de conduction, et à basses fréquences par la température Kondo T_K, via la fonction de Fermi n_F. Dans la limite $J_K \to 0$, à D fixé, l'intégrale doit diverger comme $1/J_K$, et on retrouve que $T_K/D \propto exp(-1/\rho_c^0(\mu) J_K)$, le préfacteur ne s'écartant de 1 que pour tenir compte de l'asymétrie spectrale de $G_c^{(0)}(\mu+\omega)$ autour de $\omega = 0$.

11.1.2 Conséquences de la frustration

Le couplage J définit un cut-off énergétique à basse fréquence, où l'on a $G_S(\omega) = 1/(\omega - \Sigma_{loc}(\omega)) \propto 1/\Sigma_{loc}(\omega) \propto 1/\sqrt{J\omega}$. Ainsi, la divergence logarithmique de l'équation (11.1) est coupée pour $|\omega| << J$ tandis qu'elle est préservée à haute fréquence (du moins tant que $J << D$). On en déduit que J et T_K peuvent être tous deux considérés comme des cut-off à basse fréquence. Alors, en considérant μ, J_K et D fixés, on en déduit que T_K est une fonction décroissante de J.

Lorsque J est faible par rapport à T_K et D, le principal cut-off de l'équation (11.1) reste la température de Kondo, et on pourrait tenir compte de ce couplage par un développement perturbatif. La relation d'auto-consistance reliant $\Sigma_{loc}(\omega)$ à $G_S(\omega)$ dépend uniquement de J^2, et on s'attend à ce qu'un tel développement fournisse un écart $T_K(J) - T_K^0$ assez doux, d'ordre au moins J^2/T_K^0.

A l'inverse, pour une valeur de J nettement supérieure à T_K (bien que très inférieure à D), le cut-off à basse fréquence est contrôlé entièrement par J. Pour une telle situation, l'intégrale dans l'équation (11.1) converge indépendemment de T_K, ce qui interdit à J_K de prendre

des valeurs trop faibles. Cela suggère l'existence d'une ligne de points critiques quantiques (J_K^c, J_c), pour laquelle la température Kondo s'annule.

11.2 Caractérisation du point critique quantique (QCP)

Le couplage Kondo critique J_K^c s'obtient très facilement à partir de J_c, en prenant $T_K = 0$ dans l'équation (11.1).

$$\frac{1}{J_K^c} = \int_{-\infty}^{0} \frac{d\omega}{\pi} \mathcal{I}m \left[G_c^{(0)}(\mu+\omega) G_S(\omega) \right] \tag{11.2}$$

Lorsque $J \neq 0$, la convergence de l'intégrale permet d'obtenir une valeur de J_K^c finie. Dans la limite couplages faibles (i.e. $J, J_K << D$), la relation entre J_c et J_K^c se simplifie. En effet, la relation (11.2) n'est satisfaite dans cette limite que si le membre de droite diverge comme $1/J_K$. Considérant la limite couplages faibles à μ et D fixés, la divergence du membre de droite est contrôlée par le cut-off de basses fréquences J, qui adoucit la fonction de Green G_S. A l'ordre le plus bas, on trouve $1/J_K = -\rho_c^0(\mu) ln[J/D] + \cdots$; pour obtenir l'exponentiation de cette expression, il faut calculer le développement à l'ordre suivant. On s'attend cependant à trouver pour J_c la même dépendance exponentielle que T_K^0, par rapport au couplage Kondo (voir expression (5.3) et annexe B). C'est une conséquence du fait que les deux échelles J et T_K jouent le même rôle de cut-off, empêchant la divergence logarithmique de l'équation de col. Nous avons conduit le développement de l'équation (11.2) à l'ordre suivant, afin de calculer le préfacteur de l'exponentielle. Pour cela, on introduit les densités spectrales ρ_c^0 (de cut-off D) et ρ_S. L'équation (11.2) pour le QCP prend alors la forme suivante :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{J_K^c} &= \rho_c^0(\mu) \int_{-D-\mu}^{0} d\omega \mathcal{R}e[G_S(\omega)] + \int_{-\infty}^{0} d\omega \rho_S(\omega) \mathcal{R}e[G_c^{(0)}(\mu+\omega)] \\ &+ \int_{-D-\mu}^{0} d\omega \frac{\rho_c^0(\mu+\omega) - \rho_c^0(\mu)}{\omega} \\ &+ \int_{-D-\mu}^{0} d\omega [\rho_c^0(\mu+\omega) - \rho_c^0(\mu)][\mathcal{R}e[G_S(\omega)] - 1/\omega] \end{aligned} \tag{11.3}$$

Pour évaluer le premier terme du développement (11.3), on décompose le domaine d'intégration en deux contributions : $\omega < -J$, où $\mathcal{R}e[G_S(\omega)] \approx 1/\omega$, et $-J < \omega < 0$, où $\mathcal{R}e[G_S(\omega)] \propto 1/\sqrt{J|\omega|}$. Lorsque $J \to 0$, on trouve que ce premier terme diverge comme $\rho_c^0(\mu) ln[J/(D+\mu)]$, la première correction étant d'ordre 1 (indépendante de D, J ou μ). On calcule la limite du second terme de (11.3) en remplaçant simplement ρ_S par une fonction de Dirac. Le troisième terme étant indépendant de J et le dernier tendant vers zéro, on obtient, lorsque $J \to 0$:

$$-\frac{1}{J_K} = \rho_c^0(\mu) ln \left(\frac{J}{D+\mu} \right) + \mathcal{R}e[G_c^{(0)}(\mu)] + \int_{-D-\mu}^{0} d\omega \frac{\rho_c^0(\mu+\omega) - \rho_c^0(\mu)}{\omega} + \mathcal{O}(1) \tag{11.4}$$

En calculant $\mathcal{R}e[G_c^{(0)}(\mu)]$ à l'aide des relations de Kramers-Krönig, on trouve :

$$J_c(n_c) = F_c(n_c)\left(D^2 - \mu_0^2\right)^{1/2} exp\left[-\frac{1}{J_K\rho_0(\mu_0)}\right] \tag{11.5}$$

Avec

$$F_c(n_c) = \alpha' exp\left[\int_{-(D+\mu_0)}^{D-\mu_0} \frac{d\omega}{|\omega|}\frac{\rho_0(\mu_0+\omega)-\rho_0(\mu_0)}{2\rho_0(\mu_0)}\right] \tag{11.6}$$

α' est un facteur numérique.

En comparant ce résultat avec celui obtenu pour $J = 0$ (expression (5.3) et annexe B), on obtient un couplage magnétique critique proportionnel à la température de Kondo sans interaction :

$$\boxed{J_c(n_c) \propto T_K^0(n_c) \qquad (11.7)}$$

Dans la limite couplage faible, le facteur de proportionnalité entre ces deux échelles est purement numérique, c'est à dire indépendant du remplissage n_c et de la forme spécifique de la bande libre ρ_0. Nous avions déjà obtenu une exacte identité entre la température de Kondo du réseau et celle d'un modèle à un seul moment magnétique (voir sous-section 5.2.1). Désormais, nous trouvons que l'échelle Kondo $T_K^0(n_c)$ correspond aussi exactement à la valeur critique du couplage magnétique J_c qu'il faut appliquer au système pour que l'effet Kondo disparaisse à température nulle. Ce résultat confirme l'interprétation de $T_K^0(n_c)$ comme étant l'échelle d'énergie ou de température caractéristique de l'effet Kondo, c'est à dire de l'apparition d'une corrélation singulet $r \neq 0$.

On remarque que ce résultat ne dépend pas de la forme spécifique de G_S à basse température et ne dépend donc pas non plus de la forme spécifique de la self-énergie Σ_{loc}. Pour obtenir un QCP en $J_c = T_K^0$, il suffit, dans la limite couplage faible, que la self-énergie Σ_{loc} induise un cut-off J, à basse fréquence, pour la fonction de Green G_S. un tel cut-off est absent d'une fonction de Green correspondant à des fermions libres. Par contre, il apparaît dès que l'on rajoute aux orbitales f une self-énergie dont la partie réelle est non nulle au niveau du potentiel chimique, ou s'annule moins vite que ω (ce qui est ici le cas de $\Sigma_S \propto \sqrt{J\omega}$). Une self-énergie différente de Σ_S mais induisant un QCP pour la même valeur de cut-off pourrait être générée par une interaction magnétique éventuellement différente de celle que nous avons considérée ; on pourrait aussi envisager d'obtenir des corrections à Σ_S en étudiant la même interaction magnétique (de type RKKY frustré), et en tenant compte d'un ordre plus élevé dans le développement en en cumulants que l'on utilise pour le traitement en DMFT (voir expressions (9.9) et (9.11)). Cette remarque souligne la stabilité du résultat $J_c = T_K^0$ par rapport à la méthode de calcul utilisée.

11.3 Phase Kondo : liquide de Fermi

Nous venons de voir que la compétition entre interaction Kondo et interaction magnétique frustrée engendre un point critique quantique entre une phase de type Kondo et une phase décrite par un liquide de spin entièrement décorrélé des électrons de conduction. La phase Kondo est définie par une valeur non nulle du paramètre r. Elle correspond donc à un état présentant un renforcement des corrélations singulets entre les orbitales f et les électrons de conduction, par rapport aux corrélations singulets purement statistiques d'origine thermique. Il n'est a priori pas du tout évident que le liquide de Fermi, qui caractérise les propriétés du système à $J = 0$, survive jusqu'au point critique où r s'annule. On pourrait très bien imaginer une phase intermédiaire, pour laquelle l'effet Kondo serait encore présent, mais où des corrélations magnétiques à longue distance conduiraient à une dynamique différente de celle d'un liquide de Fermi.

Le but de cette section est tout d'abord de prouver que pour notre modèle, la phase Kondo possède nécessairement les propriétés d'un liquide de Fermi, puis, d'exprimer, à partir des paramètres du modèle, certaines grandeurs générales caractéristiques des liquides de Fermi.

Le modèle considéré conduit à des propriétés de liquide de Fermi dès lors que la fonction de Green G_f prend une valeur finie au niveau de Fermi. Les seules déviations envisageables proviendraient, soit d'une divergence de G_f au niveau de Fermi (ce qui est le cas dans la phase de liquide de spin), soit de la présence d'un gap au niveau de Fermi (ce qui est le cas de l'isolant Kondo).

Bien sûr, d'autres phénomènes peuvent aussi permettre d'obtenir des propriétés non conformes à la théorie des liquides de Fermi, comme l'apparition d'un ordre magnétique à longue distance, ou également la présence d'une entropie résiduelle à température nulle, mais il est évident que de tels effets ne sont pas présents dans le modèle que nous étudions.

11.3.1 ρ_f ne diverge pas

La phase $r = 0$ conduit pour les fermions f à une solution $G_f(\omega)$ divergeant à basse fréquence comme $1/\sqrt{J\omega}$ (voir chapitre10). Il est alors naturel de se demander si un tel type de solution est compatible avec l'effet Kondo. Suivant la même approche que Sachdev [153], on recherche une solution ρ_f divergente. Pour cela, on commence par supposer qu'il existe une fréquence ω_0 et un exposant $\alpha < 0$ tels que $\rho_f(\omega) \propto (\omega - \omega_0)^\alpha$ lorsque $\omega \to \omega_0$. La divergence supposée de ρ_f induit des singularités pour les parties réelle et imaginaire de la self-énergie en ω_0 (d'après la relation (9.47)), telles que $\Sigma_{loc}(\omega) \approx (A + iB)(\omega - \omega_0)^{2+3\alpha}$, A et B étant des réels non nuls et indépendants de ω. On en déduit (d'après (9.37)) dans la limite $\omega \to \omega_0$ le comportement asymptotique $\mathcal{G}_f^{-1}(\omega) \approx \omega + \mu + \lambda_0 - (A + iB)(\omega - \omega_0)^{2+3\alpha}$.

Lorsque $r = 0$, l'égalité (9.43) entre G_f et $\mathcal{G}_f$ autorise ce type de solution à condition d'avoir $-\omega_0 = \mu + \lambda_0$ et $\alpha = -1/2$.

Par contre, lorsque $r \neq 0$, la relation auto-consistante (9.43) vérifiée par G_f est plus compliquée, du fait que les orbitales localisées f s'hybrident (de manière effective) avec les électrons de conduction.
La fonction de Green libre $G_c^{(0)}$ des électrons de conduction ne diverge pas, quelque soit son argument ; alors, toute éventuelle divergence de G_f ne pourrait provenir que d'une divergence

de $\mathcal{G}_f$. Cependant, si $\mathcal{G}_f(\omega)$ diverge, alors, l'argument de $G_c^{(0)}$ diverge ; or son statut de fonction de Green garantit que $G_c^{(0)}(z) \sim 1/z$ lorsque $|z| \to \infty$. Alors, on trouve $G_f(\omega) \approx -(\omega + \mu)/r^2$, et la fonction $G_f(\omega)$ ainsi obtenue ne diverge pas, ce qui est incohérent.

En conclusion, le système auto-consistant pour la fonction de Green $G_f(\omega)$, formé par les équations (9.37), (9.43) et (9.47), ne possède de solution divergente que lorsque $r = 0$. Dans ce cas, il s'agit de la solution du modèle étudié par Sachdev, et dont certaines des principales propriétés ont été présentées au chapitre 10.

11.3.2 Isolant ou conducteur ?

On s'intéresse ici à la possibilité d'obtenir une solution isolante. Supposons pour cela que ρ_f possède un gap au niveau de Fermi, de largeur Δ_{gap}. Alors, on en déduit que $\mathcal{I}m[\Sigma_{loc}(\omega)]$ possède aussi un gap, de largeur $3\Delta_{gap}$ (d'après (9.47)).

Lorsque $r = 0$, ρ_f et $\mathcal{I}m[\Sigma_{loc}]$ possèdent le même support (d'après (10.1)), ce qui implique $\Delta_{gap} = 0$ [153].

Lorsque $r \neq 0$, la relation de self consistance pour G_f est donnée par l'équation (9.43). La fonction intermédiaire $\mathcal{G}_f$ ayant le même support que $\mathcal{I}m[\Sigma_{loc}]$ (d'après (9.37)), on en déduit qu'elle possède un gap de largeur $3\Delta_{gap}$ autour du niveau de Fermi. Par conséquent, sous cette hypothèse, $\mathcal{G}_f(\omega)$ est purement réelle pour ω appartenant à ce gap, l'expression (9.43) se mettant alors sous la forme $\rho_f(\omega) = r^2\mathcal{G}_f^2(\omega)\rho_c^0(\omega + \mu - r^2\mathcal{G}_f(\omega))$. Il est concevable d'imaginer que $\mathcal{G}_f(\omega)$ puisse s'annuler en certains points du voisinage de $\omega = 0 + i0^+$; mais l'analyticité de cette fonction lui interdit de s'annuler sur un domaine compact entourant ce point (cela impliquerait la nullité de $\mathcal{G}_f$ dans tout le demi-plan complexe supérieur). Par conséquent, le gap de ρ_f ne peut pas provenir d'une annulation de $\mathcal{G}_f(\omega)$, dont la partie imaginaire est déjà nulle. Seul un gap de la fonction $\rho_c^0(\omega + \mu - r^2\mathcal{G}_f(\omega))$ pourrait donc le justifier. Un tel gap apparaît lorsque l'argument de la densité ρ_c^0 atteint la valeur du cut-off $\pm D$ pour une valeur finie de ω. Lorsque $J = 0$, ce gap est présent et provient de l'hybridation entre les bandes électroniques c et f. Cependant, il ne conduit dans ce cas à une solution isolante que lorsque la bande c est à demi-remplie, ce qui correspond à l'isolant Kondo. Lorsque $J \neq 0$ on s'attend à ce que la partie imaginaire de la self-énergie Σ_{loc} transforme ce gap en pseudo-gap. Cependant, nous n'avons pas étudié cet effet car, hors du demi-remplissage, le gap d'hybridation, bien que proche, ne se trouve pas directement au niveau de Fermi et fait intervenir des excitations d'énergie supérieure à l'échelle de cohérence du liquide de Fermi. De plus, on s'attend intuitivement à ce que J, en rajoutant une self-énergie à l'orbitale f, ait tendance à diminuer la largeur de ce gap d'hybridation plutôt qu'à l'augmenter. Quoi qu'il en soit, pour que le niveau de Fermi appartienne au gap d'hybridation, il est nécessaire d'avoir $|\mu - r^2\mathcal{G}_f(\omega = 0)| \geq D$. Nous allons voir que le théorème de Luttinger interdit cette relation hors du demi-remplissage.

Au demi-remplissage, la symétrie des fonctions de Green permet d'obtenir une relation simple entre la largeur du gap et les différents paramètres du système [1] : $(\Delta_{gap}/2+D)(\Delta_{gap}/2+\Sigma_{loc}(\Delta_{gap}/2)) = r^2$. Nous n'avons pas cherché à exploiter la possibilité d'une solution

[1] Le gap de $\mathcal{I}m\Sigma_{loc}$ ayant une largeur trois fois supérieure à celle du gap de ρ_f, on en déduit que $\Sigma_{loc}(\Delta_{gap}/2)$ est purement réelle.

isolante, qui permettrait pourtant de tester la stabilité de l'isolant Kondo par rapport au désordre magnétique.

11.3.3 Théorème de Luttinger

Le théorème de Luttinger fournit une relation simple et primordiale reliant les potentiels chimiques des deux bandes c et f aux autres paramètres caractéristiques des interactions entre ces bandes. Le principe du calcul que nous présentons ici généralise les dérivations initialement établies par Parcollet *et al.* [131]. L'idée est la suivante :

La démonstration utilise l'invariance de la trace de la fonction de Green du système sous changement de base. Concrètement, si l'on décrit le système à partir des états de la bande de conduction et de ceux des fermions f, la trace obtenue sera la même que celle que l'on calculerait à partir des états propres du Hamiltonien. Il en résulte que $(n_c+1)/2$ est le nombre total de quasiparticules par site et composante de spin, et que ce nombre est égal à la trace de la fonction de Green. Les détails des calculs sont présentés dans l'annexe G. Il apparaît dans les calculs que la self-énergie Σ_{loc} apporte à cette trace une contribution non trivialement nulle.

La principale hypothèse permettant la dérivation du théorème de Luttinger est l'existence de la fonctionnelle de Luttinger-Ward $\Phi_{LW}([G_f])$, invariante sous transformation $G_f(\omega) \to G_f(\omega+\nu)$, et telle que Σ_{loc} soit exactement la dérivée fonctionnelle de $\Phi_{LW}([G_f])$ par rapport à G_f. Cette hypothèse est vérifiée pour le modèle que nous étudions, la fonctionnelle de Luttinger-Ward étant explicitée en annexe G. En supposant que $n_c < 1$ (ce qui n'est pas restrictif en raison de la symétrie particule-trou), on obtient la relation générale :

$$\boxed{\mu - \frac{r^2}{\mu + \lambda_0 - \Sigma_{loc}(0)} = \mu_0(n_c+1) \qquad (11.8)}$$

Ce résultat constitue une relation fondamentale entre les paramètres du système en interaction et le potentiel chimique $\mu_0(n_c+1)$ correspondant à n_c+1 fermions sans interaction, placés sur le même réseau.

11.3.4 densités d'états au niveau de Fermi

Le théorème de Luttinger (relation (11.8) permet d'exprimer très simplement à $T=0$ les densités spectrales des électrons de conduction et des fermions f au niveau de Fermi. La densité spectrale de la bande de conduction renormalisée se déduit de la fonction de Green (9.42) :

$$\boxed{\rho_c(\omega=0) = \rho_c^0(n_c+1) \qquad (11.9)}$$

Et la densité spectrale des orbitales localisées s'exprime à partir de la fonction de Green (9.43) :

$$\boxed{\rho_f(\omega=0) = \frac{(\Delta\mu)^2}{r^2}\rho_c^0(n_c+1) \qquad (11.10)}$$

Il est remarquable que l'expression de $\rho_c(\omega=0)$ ne dépende absolument pas de Σ_{loc}, et que celle de $\rho_f(\omega=0)$ n'en dépendent qu'implicitement, via le paramètre r. On retrouve aussi

de manière continue l'annulation de ces densités spectrales à l'approche du demi-remplissage, pour lequel le potentiel chimique entre dans le gap d'hybridation.

11.3.5 Taux de relaxation RMN

La fonction d'auto-corrélation de spin locale s'obtient à partir des fonctions de Green des fermions f :

$$\chi_{loc}(\tau) = G_f(\tau)G_f(\beta - \tau) \tag{11.11}$$

Exprimée en fréquences réelles, cette relation devient :

$$\frac{\mathcal{I}m[\chi_{loc}(\nu)]}{\pi} = \begin{cases} \int_0^\nu d\omega \rho_f(\omega)\rho_f(\omega - \nu) & \text{pour } \nu > 0 \\ -\int_{-\nu}^0 d\omega \rho_f(\omega)\rho_f(\omega - \nu) & \text{pour } \nu < 0 \end{cases} \tag{11.12}$$

Le temps de relaxation RMN s'obtient s̀ basse température à partir de la relation :

$$\frac{1}{T_1 T} = \lim_{\nu \to 0} \frac{\mathcal{I}m[\chi_{loc}(\nu)]}{\nu} \tag{11.13}$$

On obtient alors :

$$\boxed{\frac{1}{T_1 T} = \pi \rho_f^2(\nu = 0) \qquad (11.14)}$$

11.3.6 Quantités thermodynamiques

Au col, la fonction de partition locale (9.27) peut être considérée comme la fonction de partition d'un modèle effectif sur réseau[2]. La fonction de partition par composante de spin, pour le problème reformulé sur un réseau, est donnée par :

$$\boxed{Z = \exp\{-\beta \mathcal{F}_0\} T_R T exp \left\{ \sum_{\vec{k}} \sum_{i\omega_n} \left(c^\dagger_{\vec{k}}(i\omega_n), f^\dagger_{\vec{k}}(i\omega_n) \right) \overline{\overline{G}}^{-1}(\epsilon_{\vec{k}}, i\omega_n) \begin{pmatrix} c_{\vec{k}}(-i\omega_n) \\ f_{\vec{k}}(-i\omega_n) \end{pmatrix} \right\} \qquad (11.15)}$$

Où l'expression de la fonction de Green effective, dans l'espace des moments, est donnée par la matrice suivante :

$$\overline{\overline{G}}^{-1}(\epsilon_{\vec{k}}, \omega) = \begin{pmatrix} \omega + \mu - \epsilon_{\vec{k}} & r \\ r & \omega + \mu + \lambda_0 - \Sigma_{loc}(\omega) \end{pmatrix} \tag{11.16}$$

[2]Une telle généralisation est évoquée à la fi n de la section 9.4.

Les niveaux d'énergie $\epsilon_{\vec{k}}$ sont distribués selon la densité spectrale ρ_c^0. Alors, l'énergie libre $\mathcal{F} = -\ln(Z)/\beta$ vaut :

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 - \frac{1}{\beta}\sum_{\vec{k}}\sum_{i\omega_n} \ln\det \overline{\overline{G}}(\epsilon_{\vec{k}}, i\omega_n) \tag{11.17}$$

Où $\det \overline{\overline{G}}\epsilon_(\vec{k}, i\omega_n) = (i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}})(i\omega_n + \mu + \lambda_0 - \Sigma_{loc}(i\omega_n)) - r^2$.
On calcule la somme sur les fréquences de Matsubara selon les méthodes habituelles, par intégration dans le plan complexe :

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 - \sum_{\vec{k}}\left[\int_{\mathcal{C}_1}\frac{dz}{2i\pi}\ln\det\overline{\overline{G}}_R(\epsilon_{\vec{k}}, z)n_F(z) + \int_{\mathcal{C}_2}\frac{dz}{2i\pi}\ln\det\overline{\overline{G}}_A(\epsilon_{\vec{k}}, z)n_F(z)\right] \tag{11.18}$$

Où $\overline{\overline{G}}_R$ (respectivement $\overline{\overline{G}}_A$) désigne la fonction de Green retardée (respectivement avancée) associée à $\overline{\overline{G}}$. Le contour $\mathcal{C}_1$ (respectivement $\mathcal{C}_2$) contourne le demi-axe imaginaire positif (respectivement négatif) dans le sens trigonométrique.

$\mathcal{F}_0$ est une quantité scalaire, fonction de r, λ_0 et μ, mais aussi fonctionnelle de G_f. Ce terme apporte une contribution qui permet de retrouver les équations de col (9.39), (9.40) et (9.41) et la relation auto-consistante (9.38) par minimisation de l'énergie libre. La dépendance de $\mathcal{F}_0$ par rapport à r, λ_0 ou μ est la même que celle décrite dans la première partie[3]. Sa dépendance par rapport à G_f est un peu plus subtile, car la relation auto-consistante (9.38) reliant Σ_{loc} à G_f provient en réalité de la minimisation de l'énergie libre par rapport à deux champs $Q(\tau)$ et $\eta(\tau, \tau')$.

Le premier, $Q(\tau)$, provient du traitement de l'interaction magnétique par la méthode des répliques (voir section 9.3 et référence [24]). Pour des spins de symétrie $SU(2)$, ce terme est aussi le corrélateur de l'action effective spin-spin locale. Il apporte à $\beta\mathcal{F}_0$ une contribution $3J^2/2\int_0^\beta d\tau\int_0^\beta d\tau' Q^2(\tau - \tau')$, et traduit la contribution à l'énergie libre des effets de fluctuations collectives des spins. La minimisation de $\mathcal{F}$ par rapport à ce champ fournit l'équation auto-consistante $Q(\tau) = \chi_{loc}(\tau)/3$ (i.e. la relation (9.16) obtenue par DMFT), où χ_{loc} est la fonction d'auto-corrélation de spin. Cette équation peut aussi être obtenue directement par le traitement DMFT décrit dans la section 9.3).

Le second, $\eta(\tau, \tau')$, provient du découplage des différentes composantes de spin[4], pour le modèle dont les opérateurs de spin ont été généralisés à une représentation fermionique de $SU(N)$. Il apporte à $\beta\mathcal{F}_0$ une contribution $\int_0^\beta d\tau\int_0^\beta d\tau'\eta(\tau, \tau')\eta^\star(\tau, \tau')$. La subtilité provient du fait que le découplage que nous effectuons par transformation de Hubbard-Stratonovitch utilise la relation $Q(\tau) \propto G_f(\tau)G_f(-\tau)$, qui n'est valable que lorsque $Q(\tau)$ et $\eta(\tau, \tau')$ minimisent simultanément l'énergie libre. L'utilisation de cette relation de col n'affecte en rien les propriétés dynamiques du système, obtenues exclusivement à partir des fonctions de Green. Par contre, il faut la manipuler avec une grande prudence lors du calcul des propriétés thermodynamiques. En effet, il est tentant d'absorber les degrés de liberté caractéristiques des fluctuations collectives des spins, en remplaçant $Q(\tau)$ par son expression en fonction de $G_f(\tau)$,

[3] Voir par exemple la contribution scalaire à l'action (3.23).
[4] voir section 9.4 et annexe F.

dans la contribution $3J^2/2\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' Q^2(\tau-\tau')$. Une telle substitution permettrait alors de simplifier l'expression de $\mathcal{F}_0$, qui serait exprimée en fonction uniquement de G_f (et, bien évidemment, des autres paramètres du modèle). Cependant, en dérivant l'énergie libre par rapport à la température, on obtiendrait une contribution supplémentaire à l'entropie, provenant du terme de fluctuations collectives.

Une manière plus rigoureuse de résoudre ce problème consiste à remplacer dans un premier temps le champ $Q(\tau)$ par un champ auxiliaire $G(\tau)$, tel que $Q(\tau) = G(\tau)G(-\tau)$, substitution permise par la parité de $Q(\tau)$. Sans geler les degrés de liberté du champ $G(\tau)$, on peut alors généraliser la symétrie $SU(2)$ du modèle à une symétrie $SU(N)$, puis, effectuer le découplage des composantes de spin par transformation de Hubbard-Stratonovitch en remplaçant la fonction de Green G_f par le champ G. En procédant ainsi, on obtient dans $\mathcal{F}_0$ une contribution provenant du champ $G(\tau)$, caractéristique des excitations collectives (du point de vue spatial), et une autre contribution provenant du champ $\eta(\tau.\tau')$, caractéristique des excitations communes aux N composantes d'un même spin.

L'expression complète de $\mathcal{F}_0$, en fonction des paramètres r, μ et λ_0, ainsi que des champs G et η peut être obtenue sans difficulté. Les degrés de liberté supplémentaires liés à G n'ont volontairement pas été pris en compte dans le reste de ce manuscrit, qui concerne la dynamique et pour laquelle ils ne jouent aucun rôle.

Il faut simplement retenir que, si l'on tient compte correctement de ces deux champs, l'entropie du système, qui vaut $S = -d\mathcal{F}/dT$ peut s'obtenir en dérivant simplement l'énergie libre partiellement par rapport à T, sans tenir compte de la dépendance implicite en température des divers champs introduits. A basse température on obtient alors uniquement la contribution de quasiparticules, qui s'exprime en dérivant simplement les fonctions de Fermi dans l'expression de $\mathcal{F}$, indépendemment de $\mathcal{F}_0$. On remarque alors que $\partial n_F(z)/\partial T = -(z/T)\partial n_F(z)/\partial z$, fonction s'annulant exponentiellement dans la limite $|z| \to +\infty$. Alors, comme $\overline{\overline{G}}_R$ (respectivement $\overline{\overline{G}}_A$) ne possède ni zéro ni pôle dans le demi-plan complexe strictement supérieur (respectivement inférieur), on remplace l'intégrale sur le contour $\mathcal{C}_1$ (respectivement $\mathcal{C}_2$) par une intégrale de $-\infty + i0^+$ à $+\infty + i0^+$ (respectivement de $+\infty + i0^+$ à $-\infty + i0^+$). On obtient donc l'expression suivante pour l'entropie, valable quelle que soit la température :

$$\boxed{S = -\sum_{\vec{k}} \int_{-\infty+i0^+}^{+\infty+i0^+} \frac{d\omega}{2i\pi}\frac{\omega}{T}\frac{\partial n_F(\omega)}{\partial\omega}\left[\ln\det\overline{\overline{G}}_R(\epsilon_{\vec{k}},\omega) - \ln\det\overline{\overline{G}}_A(\epsilon_{\vec{k}},\omega)\right]} \tag{11.19}$$

Dans la limite $T \to 0$, on effectue un développement de Sommerfeld de cette expression, et on trouve à l'ordre le plus bas en température :

$$S \approx \frac{\pi T}{6i}\sum_{\vec{k}}\left[\det\overline{\overline{G}}_R^{-1}(\epsilon_{\vec{k}},\omega)\frac{\partial\det\overline{\overline{G}}_R(\epsilon_{\vec{k}},\omega)}{\partial\omega} - \det\overline{\overline{G}}_A^{-1}(\epsilon_{\vec{k}},\omega)\frac{\partial\det\overline{\overline{G}}_A(\epsilon_{\vec{k}},\omega)}{\partial\omega}\right]_{\omega=0} \tag{11.20}$$

Alors, puisque $\overline{\overline{G}}_R(\epsilon_{\vec{k}},\omega) = \overline{\overline{G}}^{\star}_A(\epsilon_{\vec{k}},\omega)$ lorsque ω est réel, on trouve :

$$S = \frac{\pi T}{3}\sum_{\vec{k}} \mathcal{I}m\left(\det \overline{\overline{G}}_R^{-1}(\epsilon_{\vec{k}},0)\ \frac{\partial \det \overline{\overline{G}}_R(\epsilon_{\vec{k}},\omega)}{\partial\omega}\bigg|_{\omega=0}\right) \tag{11.21}$$

Le théorème de Luttinger (11.8) permet de simplifier légèrement l'expression obtenue.
De plus, la relation auto-consistante (9.47) implique à basse fréquence une annulation de $\mathcal{I}m[\Sigma_{loc}(\omega)]$ comme ω^2 dès que la densité spectrale $\rho_f(\omega=0)$ est finie (i.e. dès que $r \neq 0$, d'après la sous-section 11.3.1). On en déduit que $\partial\Sigma_{loc}(\omega)/\partial\omega$ est purement réelle en $\omega = 0$, ce qui donne, en remplaçant la somme sur $\vec{k}$ par une intégrale sur la densité libre ρ_c^0 :

$$\boxed{S = \frac{\pi^2}{3}T\left[1 + \frac{(\Delta\mu)^2}{r^2}\left(1 - \frac{\partial\mathcal{R}e\Sigma_{loc}(\omega)}{\partial\omega}\bigg|_{\omega=0}\right)\right]\rho_c^0(n_c+1) + \cdots} \tag{11.22}$$

Le terme entre crochets rassemble trois contributions.

- La première, égale à 1 correspond aux électrons de conduction.
- La deuxième, en $(\Delta\mu)^2/r^2$ provient de la composante des orbitales f, nettement plus importante que la précédente dans la limite $r/\Delta\mu \to 0$, c'est à dire dans la limite couplage faible et/ou à l'approche du QCP.
- La troisième est une contribution explicite de l'interaction magnétique, et se présente comme un résidu de quasiparticules Z_f qui n'affecterait que les orbitales f renormalisées, via la self-énergie Σ_{loc}.

11.3.7 Conductivité optique et pic de Drude

La conductivité optique pour un réseau de connectivité infinie est donnée par la relation suivante [65]

$$\sigma_{opt}(\omega) = \frac{e^2\pi}{Vd}\int_{-\infty}^{+\infty} d\nu \frac{n_F(\nu) - n_F(\nu+\omega)}{\omega}\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \rho_c^0(\epsilon) A_c(\epsilon,\nu) A_c(\epsilon,\nu+\omega) \tag{11.23}$$

Avec

$$\begin{cases} A_c(\epsilon,\nu) & = & -\frac{1}{\pi}\mathcal{I}m[G_c(\epsilon,\nu)] \\ G_c^{-1}(\epsilon,\nu) & = & \nu + \mu - \epsilon - \Sigma_c(\nu) \\ r^2\Sigma_c^{-1}(\nu) & = & \nu + \mu + \lambda_0 - \Sigma_{loc}(\nu) \end{cases} \tag{11.24}$$

La conductivité optique est ici définie à partir de la seule contribution des électrons de conduction. En effet, nous avons vu que, par notre approche, les quasiparticules sont décrites par une superposition d'états de la bande c et d'orbitales localisées f. Rappelons que les orbitales f n'ont été introduites que pour représenter les spins localisés, et doivent, pour un modèle physique de symétrie $SU(2)$, respecter des contraintes liées à la conservation locale de la charge. Il est possible que notre approche fasse apparaître des fluctuations locales de la charge

de ces orbitales f. Cependant, on ne peut en aucun cas utiliser ces fluctuations directement comme moyen de transport d'un courant électrique dans le système. A basse température, la conductivité optique se décompose en deux contributions :

$$\boxed{\sigma_{opt}(\omega) = \sigma_{Drude}(T)\delta(\omega) + \sigma_{reg.}(\omega) \qquad (11.25)}$$

Le premier terme, en $\sigma_{Drude}(T)\delta(\omega)$ représente le pic de Drude, qui correspond à la partie élastique de la conductivité. Il tient compte de la contribution des quasiparticules aux propriétés de transport du système. Plus précisément, il s'agit de la composante "électrons de conduction" de ces quasiparticules, la composante "orbitales localisés" ne contribuant qu'à la stabilisation de l'état cohérent. Le second terme, $\sigma_{reg.}(\omega)$ tient compte de tous les autres processus, incohérents, pouvant donner naissance à un courant électrique pour la bande c, moyennant un éventuel apport énergétique. En l'absence d'interaction magnétique, Σ_{loc} est nulle, et Σ_c purement réelle. Dans ce cas, on montre que $\sigma_{reg.}(\omega)$ présente un gap au niveau de Fermi. Dès que $J \neq 0$, Σ_c acquiert une partie imaginaire, et $\sigma_{reg.}(\omega)$ devient non nulle autour du niveau de Fermi. On peut ainsi considérer que l'interaction magnétique diminue peut-être le temps de vie des quasiparticules, mais qu'en contrepartie, elle génère aussi des processus de transport d'électrons, non conventionnels et de faible énergie.

Ces effets n'ont pas été étudiés ici, et nous nous sommes concentrés sur l'étude du pic de Drude. On trouve :

$$\boxed{\sigma_{Drude}(T) = -\frac{e^2\pi}{Vd}\int_{-\infty}^{+\infty} d\nu \left(\frac{\partial n_F(\nu)}{\partial \nu}\right) \frac{\rho_c^0(\mu+\nu-\Sigma_c(\nu))}{1-\frac{\partial \Sigma_c(\nu)}{\partial \nu}} \qquad (11.26)}$$

On trouve alors, à température nulle,

$$\boxed{\sigma_{Drude}(T=0) = \frac{e^2\pi}{Vd}.\frac{\rho_c^0(n_c+1)}{1+\frac{(\Delta\mu)^2}{r^2}\left(1-\frac{\partial \mathcal{R}e\Sigma_{loc}(\omega)}{\partial\omega}\Big|_{\omega=0}\right)} \qquad (11.27)}$$

Le dénominateur dans l'expression de $\sigma_{Drude}(T=0)$, comme la pente de l'entropie, se décompose en plusieurs contributions, provenant de la bande de conduction, des orbitales f, ou de la self-énergie Σ_{loc}.

11.3.8 Energies caractéristiques du liquide de Fermi

Les quantités physiques accessibles pour un système de type réseau Kondo peuvent être classées en trois catégories, selon qu'elles concernent les propriétés spécifiques aux orbitales localisées f (il s'agit typiquement des propriétés magnétiques, comme le taux de relaxation RMN), celles spécifiques aux électrons de la bande de conduction (il s'agit alors des propriétés de transport, comme la conductivité optique), ou celles spécifiques à l'ensemble des quasiparticules (propriétés thermodynamiques, comme la chaleur spécifique).

A basse température, nous obtenons un comportement de liquide de Fermi pour chacune de ces trois catégories de quantités physiques, et nous pouvons ainsi définir a priori trois échelles de cohérence du liquide de Fermi, $T^\star_{magn.}$, $T^\star_{trans.}$ et $T^\star_{therm.}$, les indices spécifiant le type

d'approche expérimentale (propriétés magnétiques, de transport, ou thermodynamiques) qui permettrait de mesurer la température de cohérence du liquide de Fermi.

Le rapport de Wilson $W = \chi_{loc}(T=0)/\gamma$ permet de comparer $T^{\star}_{magn.}$ et $T^{\star}_{therm.}$.

On constate que le produit entre le poids du pic de Drude à $T = 0$ et le coefficient γ de la chaleur spécifique prend une forme très simple :

$$\boxed{\gamma.\sigma_{Drude}(T=0) = \frac{e^2\pi^3}{3Vd}\left[\rho_c^0(n_c+1)\right]^2 \qquad (11.28)}$$

Cette identité ne dépend ni du couplage Kondo ni de l'interaction magnétique. Elle pourrait constituer un moyen très simple d'accéder à partir des données expérimentales $\sigma_{Drude}(T=0)$ et γ, à la densité $\rho_c^0(n_c+1)$ d'électrons au niveau de Fermi, qui constitue l'un des paramètres du modèle.

Chapitre 12

Proximité du point critique quantique

Le point critique quantique (QCP) à été défini comme le point du diagramme de phase pour lequel la température de Kondo s'annule (voir section 11.2). D'un autre point de vue, il correspond aussi à une annulation continue de r à température nulle. Il a été montré au chapitre 11 que le système possède les propriétés d'un liquide de Fermi dès que r est non nul. Par conséquent, le QCP marque aussi l'annulation de la température de cohérence du liquide de Fermi.

12.1 Température de Kondo

On s'intéresse à l'équation (11.1) de la température de Kondo. Dans cette équation, la température intervient explicitement, via la fonction de Fermi, mais aussi implicitement, via la fonction de Green G_S. On décompose alors cette équation en différentes contributions :

$$\frac{1}{J_K} - \frac{1}{J_K^c} = \Delta_{impl.} + \Delta_{expl.} \tag{12.1}$$

Avec

$$\Delta_{impl.} = \int_{-\infty}^{0} d\omega [\rho_{hybr.}(\omega, T_K) - \rho_{hybr.}(\omega, T=0)] \tag{12.2}$$

$$\Delta_{expl.} = \int_{0}^{+\infty} d\omega [\rho_{hybr.}(\omega, T_K) - \rho_{hybr.}(-\omega, T_K)] n_F(\omega) \tag{12.3}$$

La fonction $\rho_{hybr.}$ correspond à la densité spectrale d'hybridation entre l'orbitale f et la bande c (divisée par r puis exprimée pour $r = 0$) :

$$\rho_{hybr.}(\omega, T) = -\frac{1}{\pi} \mathcal{I}m \left[G_c^{(0)}(\mu + \omega + i0^+) G_S(\omega + i0^+) \right] \tag{12.4}$$

Avant de développer les expressions de $\Delta_{expl.}$ et $\Delta_{impl.}$ en fonction de la température, rappelons que pour $|\omega|, T << J$, la fonction de Green du modèle de Sachdev peut se mettre sous la forme $G_S(\omega, T) = \Phi(\omega/T)/\sqrt{JT} + \cdots$, où Φ est une fonction universelle [131].

L'expression de $\Delta_{expl.}$ suggère d'évaluer sa dépendance en température par un développement de type Sommerfeld. La fonction de Green $G_S(\omega)$ étant singulière en $\omega = 0$, on en déduit que $\rho_{hybr.}(\omega)$ l'est aussi, et n'admet pas de développement de Taylor en $\omega = 0$. Par contre, la forme asymptotique (10.3), obtenue pour G_S à basse fréquence, permet tout de même un développement généralisé de $\rho_{hybr.}(\omega)$. La fonction de Green $G_C^{(0)}(\mu + \omega + i0^+)$ étant analytique sur le domaine d'intégration, on en effectue un développement de Taylor autour de $\omega = 0$. On obtient alors, en utilisant la parité de G_S et en effectuant le changement de variable $\omega = Tx$:

$$\Delta_{expl.} = \frac{2}{\pi}\frac{T^{3/2}}{\sqrt{J}}\mathcal{I}m\left[\left.\frac{dG_c^{(0)}(\omega)}{d\omega}\right|_{\omega=\mu}\int_0^{+\infty} dx\frac{x\Phi(x)}{1+e^x}\right] + \cdots \tag{12.5}$$

Par ailleurs, l'expression de $\Delta_{impl.}$ suggère d'évaluer sa dépendance en température à l'aide de l'équivalence $\rho_{hybr.}(\omega, T) - \rho_{hybr.}(\omega, T = 0) \sim T\partial\rho_{hybr.}(\omega, T)/\partial T$, exacte dans la limite $T \to 0$. A basse température, $\partial\rho_{hybr.}(\omega, T)/\partial T$ est entièrement dominée par la contribution divergente qui provient de G_S, la dérivée du potentiel chimique μ par rapport à T n'apportant qu'une contribution linéaire et s'annulant lorsque $T \to 0$.
On exprime ce terme dominant en utilisant la fonction universelle Φ. On trouve $\partial G_S(\omega)/\partial T \sim -\Phi(\omega/T)/(2T\sqrt{JT}) - \Phi'(\omega/T)\omega/(T^2\sqrt{JT}) + \cdots$, où $\Phi'(x)$ désigne la dérivée de $\Phi(x)$. Alors, en utilisant un développement de Taylor pour $G_C^{(0)}(\mu + \omega + i0^+)$, et en effectuant le changement de variable $\omega = Tx$, on obtient :

$$\Delta_{impl.} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{D}\sqrt{\frac{T}{J}}\right) \tag{12.6}$$

Alors, dans la limite $T << J << D$, on trouve $\Delta_{expl.} << \Delta_{impl.}$. On en déduit une relation indiquant le comportement asymptotique de la température T_K a l'approche de la ligne de QCP (J_c, J_K^c).

$$\frac{1}{J_K} - \frac{1}{J_K^c} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{D}\sqrt{\frac{T_K}{J_c}}\right) \tag{12.7}$$

On rappelle le résultat (11.7), qui prévoit dans la limite couplage faible un couplage magnétique critique proportionnel à la température de Kondo non frustrée ($J_c \propto T_K^0$). On peut considérer d'une part que T_K s'annule sous l'effet d'une variation du couplage Kondo J_K, à J, D et n_c fixés. Dans ce cas, on obtient :

$$\boxed{T_K \propto T_K^0\left(\frac{D}{J_K}\right)^2\left(\frac{J_K}{J_K^c} - 1\right)^2 \qquad (12.8)}$$

On a de plus $D/J_K - D/J_K^c \propto ln(J_c/J) \propto 1 - J/T_K^0$. Alors, on en déduit le comportement de T_K lorsque J s'approche de sa valeur critique $J_c = T_K^0$, avec J_K, D et n_c fixés. On obtient :

$$\boxed{T_K \propto T_K^0\left(1 - \frac{J}{T_K^0}\right)^2 \qquad (12.9)}$$

12.2 Ansatz pour la densité spectrale

12.2.1 Point de départ

La fonction de Green locale des fermions f est donnée par la relation (9.43) :

$$\boxed{\begin{aligned} G_f(\omega) &= \underbrace{\mathcal{G}_f(\omega)} + \underbrace{r^2\mathcal{G}_f^2(\omega)G_c^{(0)}\left[\mu+\omega-r^2\mathcal{G}_f(\omega)\right]} \\ &\equiv G_{HF}(\omega) + G_{BF}(\omega) \end{aligned}} \tag{12.10}$$

$$\text{avec}^1 \quad \begin{cases} \mathcal{G}_f^{-1}(\omega) = \omega+\mu+\lambda_0-\Sigma_{loc}(\omega) \\ \Sigma_{loc}(\tau) = -J^2G_f^2(\tau)G_f(-\tau) \end{cases}$$

Afin de résoudre ce système de manière approchée, nous allons dans un premier temps essayer de comprendre le rôle joué par les différents termes intervenant dans la définition précédente. Pour cela, nous considérons dans un premier temps les deux cas extrêmes $J = 0$ et $r = 0$, pour lesquels la solution G_f est entièrement connue.

Tout d'abord, examinons le système pour $J = 0$, ce qui correspond au réseau Kondo non frustré. Nous savons que dans ce cas, $\mu + \lambda_0 = \mathcal{O}(r^2/D)$ (d'après le théorème de Luttinger). Par conséquent, en considérant n_c fixé, deux échelles énergétiques ressortent du modèle : D (terme cinétique) et r^2/D (effet Kondo). On se place dans la limite d'un couplage Kondo inférieur à D.

- Lorsque $|\omega| >> D >> r^2/D$, on trouve $\mathcal{G}_f(\omega) \sim 1/\omega$, puis $|G_{HF}(\omega)| \sim 1/|\omega| >> r^2/|\omega|^3 \sim |G_{BF}(\omega)|$. La fonction de Green G_f est alors dominée entièrement par sa contribution G_{HF}, et se comporte comme $1/\omega$, ce qui correspond à des fermions libres.
- Lorsque $|\omega| \sim D >> r^2/D$, on trouve $\mathcal{G}_f(\omega) \sim 1/D$ puis on en déduit que $|G_{HF}(\omega)| \sim 1/D >> r^2/D^3 \sim |G_{BF}(\omega)|$. Par conséquent, aux énergies de l'ordre de D, la fonction de Green des fermions f est encore dominée par G_{HF}, qui demeure caractérisée essentiellement par un régime de fermions libres, en $1/\omega$. On note toutefois que dans ce même régime énergétique ($|\omega| \sim D$), la fonction de Green de la bande de conduction s'obtient à partir de l'expression (9.42), et vaut essentiellement $G_c(\omega) \sim G_c^{(0)}(\mu+\omega)$, les effets liés à la structure du réseau se faisant déjà sentir, mais l'effet Kondo n'apparaissant pas.
- Un régime intermédiaire prend place pour des énergies telles que $D >> |\omega| \sim r^2/D$. On a alors deux possibilités, selon que ω est proche ou non du pôle de $\mathcal{G}_f$. Si ω est proche de ce pôle, alors l'argument de $G_c^{(0)}$ diverge comme $-r^2\mathcal{G}_f(\omega)$, puis on trouve $G_{HF}(\omega) \approx -G_{BF}(\omega)$. Les deux contributions à G_f se compensent, et donnent naissance à un gap

dans la densité spectrale associée (il s'agit du gap d'hybridation). Si par contre, ω est à une distance $\mathcal{O}(r^2/D)$ de ce pôle, on obtient $|G_f(\omega)| \sim |G_{HF}(\omega)| \sim |G_{BF}(\omega)| \sim D/r^2$.

- Lorsque $D >> r^2/D >> |\omega|$, la fonction de Green $G_f(\omega)$ sature à une valeur dont le module est en $\mathcal{O}(D/r^2)$, qui provient simultanément des contributions G_{HF} et G_{BF}. Cette saturation caractérise le régime de liquide de Fermi.

Examinons maintenant le cas $r = 0$, qui correspond au modèle étudié par Sachdev [153], et dont certains résultats ont été rappelés dans le chapitre 10. Dans ce cas, G_{BF} est strictement nulle, de même que les potentiels μ et λ_0, et une seule énergie (J), caractérise le système.

- Pour les hautes fréquences ($|\omega| >> J$), on obtient $G_f(\omega) \sim 1/\omega$.
- Pour $|\omega| \sim J$, on trouve un régime de crossover pour lequel $|\omega| \sim |\Sigma_{loc}(\omega)|$. Dans ce régime intermédiaire, $|\mathcal{G}_f(\omega)|$ reste finie, sa seule divergence étant en $\omega = 0$.
- Pour $|\omega| << J$, on a $|\omega| << |\Sigma_{loc}(\omega)|$, et on retrouve le régime basse fréquence décrit au chapitre 10, qui donne $|G_f(\omega)| \sim 1/|\Sigma_{loc}(\omega)| \propto 1/\sqrt{J|\omega|}$.

En comparant les deux cas extrêmes que nous venons de commenter, il est possible d'extrapoler le comportement de G_f lorsque r et J sont simultanément non nuls. Nous nous plaçons tout de même dans la limite où les interactions Kondo et magnétiques sont faibles devant la largeur de la bande de conduction (i.e. $J, r^2/D << D$). Afin de ne pas compliquer le problème, nous supposons aussi que le remplissage n_c est arbitraire mais fixé. A très haute fréquence ($|\omega| >> D >> J, r^2/D$), on retrouve le comportement de fermions libres, avec $G_f(\omega) \sim 1/\omega$. La contribution de $G_{HF}(\omega)$theseparcollet domine alors complètement $G_f(\omega)$, et on s'attend à ce que la première déviation par rapport à ce régime intervienne pour $|\omega| \sim max(J, r^2/D)$.
Lorsque $|\omega|$ atteint ce régime de crossover, deux cas extrêmes peuvent se produire, selon la valeur du rapport entre les échelles r^2/D et J :

- Pour $J << r^2/D$ (réseau Kondo très légèrement frustré), on trouve que les deux contributions $G_{HF}(\omega)$ et $G_{BF}(\omega)$ deviennent du même ordre lorsque $|\omega| \lesssim r^2/D$, et la résonance Kondo, provenant de la contribution G_{BF}, commence a apparaître. On note que Σ_{loc}, que l'on peut considérer dans cette limite comme une perturbation, apporte une partie imaginaire à $\mathcal{G}_f$, transformant le gap d'hybridation de la densité spectrale en pseudo-gap.
- Pour $J >> r^2/D$ (proximité du point critique quantique), on s'attend à ce que la première déviation par rapport au régime de hautes fréquences provienne du terme Σ_{loc}. Pour $|\omega| \sim J >> r^2/D$, on trouve donc que $|\mathcal{G}_f(\omega)| \sim 1/J$ puis on en déduit que $|G_{HF}(\omega)| \sim 1/J >> r^2(DJ^2) \sim |G_{BF}(\omega)|$. Alors, $G_f(\omega) \approx G_{HF}(\omega) = \mathcal{G}_f(\omega)$. La rupture par rapport à ce régime intermédiaire n'intervient que pour des fréquences suffisamment basses pour avoir $|G_{HF}(\omega)| \sim |G_{BF}(\omega)|$, ce qui se produit en dessous d'une énergie de crossover $\omega^\star$ d'autant plus faible que r^2/D est petite devant J. Dans tout le régime $|\omega| >> \omega^\star$, on a $G_f(\omega) \approx \mathcal{G}_f(\omega)$. On peut donc supposer que l'on est suffisamment proche du QCP pour avoir $\omega^\star << J$. Alors, excepté pour les très basses fréquences, G_f est très proche de la solution des équations du modèle de Sachdev. Pour les fréquences $\omega^\star << |\omega| << J$, on obtient donc $|\mathcal{G}_f(\omega)| \approx |G_S(\omega)| \sim 1/\sqrt{J|\omega|}$. On

en déduit $|G_{HF}(\omega)| \sim 1/\sqrt{J|\omega|}$ alors que $|G_{BF}(\omega)| \sim r^2/(D\sqrt{J|\omega|})$. L'hypothèse $|G_{BF}(\omega)| << |G_{HF}(\omega)|$ est donc bien vérifiée tant que $|\omega| >> r^4/(JD^2) = \omega^\star$, de même que la valeur de $\omega^\star$ ainsi obtenue est nettement inférieure à J lorsque $r^2/D << J$. Aux fréquences $|\omega| \lesssim \omega^\star$, le module de la fonction de Green des fermions f entre dans le régime de liquide de Fermi, saturant à la valeur $|G_f(\omega)| \sim 1/\sqrt{J\omega^\star} \sim D/r^2$.

En conclusion, dans la limite couplage faible, avec n_c fixé :
- Pour $J = 0$, la densité spectrale ρ_f présente essentiellement un pic autour de $\omega = 0$; il s'agit de la résonance Kondo, de largeur $\propto r^2/D$, de hauteur $\propto D/r^2$. Dans ce pic apparaît un gap, de largeur $\propto r^2/D$.
- Pour $J << r^2/D$, la partie imaginaire de Σ_{loc} transforme le gap en pseudo-gap.
- Pour $r^2/D << J$, la densité spectrale ρ_f est essentiellement la solution du modèle de Sachdev (à savoir un pic de largeur $\sim J$), dont la divergence en $1/\sqrt{J|\omega|}$ est coupée à la fréquence $\omega^* \propto r^4/(JD^2)$, en dessous de laquelle ρ_f sature à la valeur $\sim 1/\sqrt{J\omega^\star} \sim D/r^2$, signature de la formation du liquide de Fermi.

12.2.2 Ansatz

Les considérations précédentes renseignent sur le comportement semi-quantitatif de la fonction de Green des orbitales f. Il semble assez difficile de la calculer analytiquement lorsque J et r^2/D sont du même ordre, car il faudrait pour cela parvenir à distinguer plusieurs sous-structures caractéristiques de G_f, telles que le pseudo-gap, la résonance Kondo, le régime liquide de Fermi, et le comportement induit par $\Sigma_{loc}(\omega)$, qui ne devrait pas se comporter en $\sqrt{J|\omega|}$ de manière très nette.

Évidemment, un développement perturbatif semble envisageable pour $J << r^2/D$, mais on ne s'attend pas à en faire ressortir des propriétés physiques vraiment différentes de celles obtenues pour le réseau Kondo seul, excepté la transformation du gap d'hybridation en pseudo-gap.

Par contre, la proximité du point critique quantique semblerait donner lieu à un comportement assez original, caractérisé par un régime de type liquide de spin pour des énergies moyennes, et de liquide de Fermi, induit par l'effet Kondo à basse fréquence. Afin de quantifier un peu mieux cette analyse, nous proposons de calculer G_f au moyen de l'ansatz suivant, qui suppose $r^2/D << J << D$:

$$\boxed{\mathcal{I}m\Sigma_{loc}(\omega + i0^+) = \begin{cases} A\omega^2 & \text{si } \omega_-^\star < \omega < \omega_+^\star \\ \mathcal{I}m\Sigma_S(\mu + \lambda_0 + \omega + i0^+) & \text{sinon} \end{cases}} \tag{12.11}$$

Cet ansatz constitue l'hypothèse minimale pour décrire quantitativement l'approche du QCP. La fonction de Green exacte du système, $G_f(\omega)$, doit présenter une légère asymétrie spectrale dans la phase Kondo. En effet, hors du demi-remplissage électronique, l'absence de symétrie électron-trou se répercute sur la bande f, via l'hybridation effective. Cette asymétrie se manifeste sous deux contributions. La première est prise en compte directement dans l'expression (12.10) de G_f, pour laquelle l'argument du second terme (en G_c^0) dépend linéairement de μ, ce qui implique que la résonance Kondo apparaît "à peu près" au niveau du potentiel

chimique de la bande de conduction.

Une légère asymétrie supplémentaire permet de décaler un peu le potentiel de la bande f, de manière à ce que cette dernière reste à demi-remplie pendant que la bande de conduction s'épuise. Cet effet est pris en compte par le terme en $\mu + \lambda_0$ qui apparaît dans l'expression (9.37) de $\mathcal{G}_f(\omega)$, ainsi que par une éventuelle asymétrie de $\Sigma_{loc}(\omega)$. Lorsque $J = 0$, $\mathcal{G}_f$ est la fonction de Green d'un fermion libre, simplement translatée du potentiel $\mu + \lambda_0$, énergie de l'ordre de r^2/D, qui correspond dans ce cas à l'échelle de cohérence. Lorsque $J \neq 0$, une petite translation supplémentaire pour $\mathcal{G}_f(\omega)$ provient de la self-énergie Σ_{loc}. Le théorème de Luttinger (voir la sous-section 11.3.3) garantit cependant un décalage total $\mathcal{G}_f^{-1}(0) = \mu + \lambda_0 - \Sigma_{loc}(0) \propto r^2/D$. Or, à l'approche du QCP, il semblerait que l'énergie de cohérence du liquide de Fermi $\omega^\star$ soit de l'ordre de $r^4/(JD^2)$. Par conséquent, l'échelle énergétique caractéristique de l'asymétrie de $\mathcal{G}_f(\omega)$ s'avère être beaucoup plus importante que l'énergie de cohérence du liquide de Fermi. Même si cette asymétrie s'annule au QCP, il est légitime de se demander quel pourrait être son effet sur la valeur de $\omega^\star$.

Nous allons voir dans un premier temps qu'en tenant compte de cet effet, la valeur de $\omega^\star$ est affectée d'un facteur qui dépend uniquement du remplissage électronique. Laissant de coté les effets liés à l'épuisement, dont la prise en compte risquerait alors de devenir extrêmement complexe, on pourra alors se contenter d'évaluer $\omega^\star$ à ce préfacteur près, en négligeant l'asymétrie spectrale de Σ_{loc}.

Le modèle de Sachdev dopé a été étudié par Parcollet et Georges [132]. La brisure de symétrie particule-trou pour la bande f conduit dans ce cas à une asymétrie spectrale, $\rho_S(\omega)$ ayant encore un comportement en $1/\sqrt{|\omega|}$ lorsque $|\omega| << J$, mais avec un poids dépendant du signe de ω. Cette manière de tenir compte du dopage est assez originale, dans la mesure où habituellement, il suffit de translater de la valeur du potentiel chimique la solution non dopée pour en déduire la solution dopée. Pour le cas du modèle de Sachdev dopé, le comportement de basse fréquence conduit à une véritable singularité de $\rho_S(\omega)$, qui diverge en $\omega = 0$. Dans la dérivation du théorème de Luttinger (voir annexe G), la trace de la fonction de Green, égale au nombre de quasiparticules, se calcule en utilisant le théorème des résidus, en choisissant un contour d'intégration qui évite la singularité en $\omega = 0$. Alors, la fonctionnelle de Luttinger-Ward invoquée dans le calcul n'est plus vraiment invariante sous translation en fréquence, du fait que le domaine d'intégration qui permet de la définir dépend justement de la position de cette singularité. Hors du demi-remplissage, la trace de la fonction de Green présente donc une contribution supplémentaire, peu habituelle, liée à la non-invariance de la fonctionnelle de Luttinger-Ward sous translation en fréquence.

Pour notre modèle, la singularité de G_f apparaît seulement asymptotiquement lorsque $r \to 0$. Tant que le système est dans la phase Kondo ($r \neq 0$) la fonctionnelle de Luttinger-Ward invoquée dans la dérivation du théorème de Luttinger reste parfaitement invariante sous translation en fréquence. Le problème est donc en ce sens différent de celui du modèle de Sachdev dopé, et on peut tenir compte de l'asymétrie spectrale en translatant tout simplement de $\mu + \lambda_0$ la fonction de Green G_S décrite au chapitre 10, comme nous l'avons fait dans l'ansatz (12.11). Il suffit alors de vérifier que la singularité de G_S n'est pas translatée au-delà

des fréquences $\omega^\star_\pm$. On cherche donc une solution telle que

$$\omega^\star_\pm = \alpha^\pm \omega^\star \tag{12.12}$$
$$\mu + \lambda_0 = \alpha^0 \omega^\star \tag{12.13}$$

avec $|\alpha^-| \sim |\alpha^0| \sim |\alpha^+| \sim \mathcal{O}(1)$. L'ansatz possède ainsi 5 paramètres (A, $\omega^\star$, et les trois paramètres sans dimension α^-, α^+ et α^0) que l'on détermine à partir des relations suivantes :

Dans le régime de liquide de Fermi, le préfacteur A du terme en ω^2 provient du développement à basse fréquence de la relation (9.47) :

$$\boxed{A = -\frac{\pi J^2}{2}\frac{(\Delta\mu)^6}{r^6}\left[\rho_c^0(n_c+1)\right]^3 \qquad (12.14)}$$

La continuité de $\mathcal{I}m(\Sigma_{loc})$ en $\omega^\star_\pm$ implique deux autres relations :

$$\boxed{(\omega^\star)^3 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\frac{J}{A^2}\frac{|\alpha^\pm + \alpha^0|}{(\alpha^\pm)^4} \qquad (12.15)}$$

Enfin, le théorème de Luttinger (11.8) s'écrit :

$$\boxed{\Sigma_{loc}(\omega=0) - \alpha^0\omega^\star = \frac{r^2}{\Delta\mu} \qquad (12.16)}$$

Cette dernière relation permet de bien comprendre la nécessité de chercher une solution asymétrique. En effet, si l'on avait choisi une fonction $\mathcal{I}m\Sigma_{loc}$ parfaitement paire, alors, on en aurait déduit $\Sigma_{loc}(\omega=0) = 0$, puis $\alpha^0\omega^\star \propto r^2/D$ alors que les relations (12.14) et (12.15) impliquent $r^2/D \propto \sqrt{J\omega^\star}$. Il y aurait donc incohérence.

On suppose donc que la très légère asymétrie spectrale est suffisante pour obtenir $\Sigma_{loc}(\omega = 0) = r^2/\Delta\mu + \mathcal{O}(\omega^\star)$. On déduit Σ_{loc} de $\mathcal{I}m\Sigma_{loc}$ à partir des relations de Kramers-Kronig, et on trouve :

$$\Sigma_{loc}(\omega=0) = \mathcal{R}e\Sigma_S(\alpha^0\omega^\star) - \int_{\alpha^-\omega^\star}^{\alpha^+\omega^\star}\frac{d\epsilon}{\pi}\frac{\mathcal{I}m\Sigma_S(\epsilon+\alpha^0\omega^\star) - A\epsilon^2}{\epsilon} \tag{12.17}$$

Dans l'intégrale de l'expression précédente, on remplace A en utilisant la condition de continuité (12.15), et on effectue le changement de variable $\epsilon = x\omega^\star$. On en déduit :

$$\Sigma_{loc}(\omega=0) = \frac{\sqrt{J\omega^\star}}{(4\pi)^{1/4}}\left[-sgn(\alpha^0)\sqrt{|\alpha^0|} - \frac{\sqrt{|\alpha^0+\alpha^+|} - \sqrt{|\alpha^0+\alpha^-|}}{2\pi} + \int_{\alpha^-}^{\alpha^+}\frac{dx}{\pi}\frac{\sqrt{|x+\alpha^0|}}{x}\right] \tag{12.18}$$

Ce résultat devient tout à fait compatible avec le théorème de Luttinger (12.16). Il montre ainsi que les trois échelles d'énergie $\omega^\star_+$, $\omega^\star_-$ et $\mu + \lambda_0$ n'en sont en réalité qu'une seule, à des préfacteurs numériques près. Dans toute la suite de ce rapport, on laisse donc de coté les degrés de liberté $\alpha^\pm$ et α^0, et on définit l'énergie de cohérence $\omega^\star$ par :

$$\boxed{\omega^\star = \frac{2^{1/3}}{\pi^{5/6}} \frac{r^4}{J(\Delta\mu)^4[\rho_c^0(n_c+1)]^2} \qquad (12.19)}$$

Cette définition correspond à l'ansatz symétrique suivant :

$$\boxed{\mathcal{I}m\Sigma_{loc}(\omega + i0^+) = \begin{cases} -(\omega/\omega^\star)^2\sqrt{J\omega^\star}/(4\pi)^{1/4} & \text{si } |\omega| < |\omega^\star| \\ \mathcal{I}m\Sigma_S(\omega + i0^+) & \text{sinon} \end{cases} \qquad (12.20)}$$

Il faut retenir que cet ansatz, symétrique, ne permet pas de vérifier le théorème de Luttinger. Cependant, nous venons de montrer que ce théorème peut être vérifié en translatant $\mathcal{I}m\Sigma_S$ de la valeur du potentiel chimique $\mu + \lambda_0$, proportionnelle à $\omega^\star$. La prise en compte de cette asymétrie pourrait servir pour étudier en détail des effets liés au remplissage électronique. Nous ne tenons pas compte de tels effets dans cette partie.

12.3 Echelle de cohérence du liquide de Fermi

A l'approche du QCP, nous venons de dériver une expression simple de l'échelle de cohérence du liquide de Fermi, $\omega^\star$, en fonction de r, J et D (expression (12.19)). Laissant de coté les facteurs numériques, ainsi que la dépendance en n_c, on a $\omega^\star \propto r^4/(JD^2)$. Alors, en utilisant l'ansatz (12.20), nous allons étudier l'annulation de r lorsque $J \to J_c$, et en déduire le comportement limite de $\omega^\star$. Pour cela, on s'intéresse à l'équation de col (9.39). On retranche à cette équation, exprimée à $T = 0$, la contribution divergente en couplage faible, donnée par l'équation (11.2) du couplage critique J_K^c, et on s'intéresse à l'annulation de cette différence lorsque $r \to 0$ (i.e. lorsque $\omega^\star \to 0$ et $J_K \to J_K^c$). On a

$$\boxed{\frac{1}{J_K} - \frac{1}{J_K^c} = \int_{-\infty+i0^+}^{0+i0^+} \frac{d\omega}{\pi} \mathcal{I}m\left[\mathcal{G}_f(\omega)G_c^0\left(\mu+\omega-r^2\mathcal{G}_f(\omega)\right) - G_S(\omega)G_c^0\left(\mu+\omega\right)\right] \qquad (12.21)}$$

On décompose alors le domaine d'intégration en trois contributions, selon la valeur de $|\omega|$ par rapport à J et $\omega^\star$. On trouve que les intervalles $[-\omega^\star, 0]$ et $[-\infty, -J]$ fournissent une contribution d'ordre $\sqrt{\omega^\star/J}/D$. L'intervalle $[-J, -\omega^\star]$ apporte la contribution la plus importante, et conduit à la relation (voir annexe H) :

$$\boxed{\frac{1}{J_K} - \frac{1}{J_K^c} = \mathcal{O}\left(\frac{1}{D}\sqrt{\frac{\omega^\star}{J}} \ln\frac{\omega^\star}{J}\right) \qquad (12.22)}$$

On note que cette relation transcendante dépend fortement de l'ansatz effectué, pour lequel, sur tout le domaine $[-J, -\omega^\star]$, la fonction $\mathcal{G}_f$ est remplacée par G_S, elle même remplacée par son asymptote à basse fréquence. Le terme qui domine cette relation provient d'un développement de Taylor de la fonction $G_c^0\left(\mu+\omega-r^2\mathcal{G}_f(\omega)\right)$ autour de $\mu+\omega$. Il apparaît donc dans l'expression de $1/J_K - 1/J_K^c$, une contribution en $[\mathcal{G}_f(\omega)]^2$, que nous remplaçons par une fonction proportionnelle à $1/(J\omega)$ sur l'intervalle $[-J, -\omega^\star]$. Cela conduit au terme logarith-

mique de l'expression (12.22). Contrairement à d'autres résultats obtenus dans cette partie, celui-ci est donc fortement sensible à la forme de la self-énergie Σ_{loc}. Il suffirait par exemple que pour $\omega^\star < |\omega| < J$, on ait $\Sigma_{loc}(\omega = Jx) \sim Jx^\alpha$ avec $\alpha \neq 1/2$, et le terme en $ln(\omega^\star/J)$ serait alors remplacé par $(\omega^\star/J)^{1-2\alpha}$. La valeur $\alpha = 1/2$ est donc un cas limite, et il est très probable qu'une self-énergie plus douce ($\alpha < 1/2$) conduise à une échelle de cohérence $\omega^\star$ proportionnelle à la température de Kondo T_K jusqu'au QCP (à n_c fixé) ; à l'inverse, une self-énergie plus importante à basse fréquence ($\alpha > 1/2$) conduirait à un rapport $\omega^\star/T_K$ plus faible près du QCP.

12.4 Quantités physiques

L'ansatz (12.20) permet d'exprimer le résidu de quasiparticules associé à la bande f :

$$\boxed{Z_f^{-1} = 1 - \left.\frac{\partial \mathcal{R}e\Sigma_{loc}(\omega)}{\partial\omega}\right|_{\omega=0} = 1 + \frac{2^{4/3}}{\pi^{5/6}}\frac{(\Delta\mu)^2}{r^2}J\rho_c^0(n_c+1) \qquad (12.23)}$$

On voit dans cette expression l'effet de l'interaction magnétique (couplage J) sur les paramètres du liquide de Fermi qui caractérisent le système à très basse énergie. Les corrélations magnétiques entre les spins se traduisent par une augmentation du résidu de quasiparticules spécifique aux orbitales f renormalisées. Ce résidu s'annule au QCP, et Z_f^{-1} domine les expressions de l'entropie, de la susceptibilité magnétique et de la conductivité optique à l'approche de la transition.

12.4.1 Chaleur spécifique

On trouve (d'après (11.22)) :

$$\frac{S(T)}{T} \approx \frac{\pi^{7/6}2^{4/3}}{3}J\left(\frac{(\Delta\mu)^2}{r^2}\rho_c^0(n_c+1)\right)^2 + \cdots \qquad (12.24)$$

Puis,

$$\boxed{S(T) \approx \frac{4}{3}\left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/3}\frac{T}{\omega^\star} + \cdots \qquad (12.25)}$$

On en déduit que le coefficient γ de la chaleur spécifique est proportionnel à $1/T^\star$.

12.4.2 Dynamique de spin locale

L'expression (11.14) du taux de relaxation RMN devient :

$$\boxed{\frac{1}{T_1T} = \frac{(2\sqrt{\pi})^{1/3}}{J\omega^\star} \qquad (12.26)}$$

12.4.3 Propriétés de transport

Le poids du pic de Drude (conductivité optique) à $T = 0$ vaut, près du QCP (d'après (11.27)) :

$$\boxed{D_{Drude}(T=0) = \frac{e^2\pi}{Vd}\left(\frac{\pi}{2}\right)^{5/3}\left[\rho_c^0(n_c+1)\right]^2\omega^\star \qquad (12.27)}$$

12.4.4 Conclusion

La masse effective caractéristique du liquide de Fermi, est donnée par :

$$m^\star = 1 + \frac{\rho_f(\omega=0)}{\rho_c(\omega=0)}Z_f^{-1} \qquad (12.28)$$

Dans la limite couplage faible, on a $\rho_f(\omega = 0) >> \rho_c(\omega = 0)$, et l'importance de $m^\star$ est essentiellement liée à la composante f de la densité de quasiparticules. En présence de l'interaction magnétique spin-spin, la masse effective est encore dominée par la contribution de ρ_f, qui est d'ordre D^2/r^2. Près du QCP, cette contribution est multipliée par un facteur JD/r^2, qui provient du résidu Z_f de la bande f renormalisée. Par cette approche, on peut interpréter l'interaction magnétique comme un moyen d'augmenter la masse effective des fermions f. Il s'agit bien sûr d'un abus de langage, car pour un modèle à symétrie de spin $SU(2)$, les orbitales f sont toujours localisées et la véritable bande f possède une masse effective infinie indépendamment de l'interaction magnétique supplémentaire. Cependant, ρ_f reflète, en champ moyen, des processus d'écrantage des spins à distance, par des interactions de type RKKY, c'est à dire portées par les électrons de la bande de conduction. Cette "augmentation de la masse effective de la bande f" à l'approche du point critique doit donc s'interpréter comme une réduction de cet écrantage cohérent, en faveur d'un écrantage incohérent. L'écrantage cohérent est porté par les électrons de conduction, tandis que le second est issu d'une interaction magnétique directe. Pour le modèle que nous étudions, cet effet résulte de la frustration ou du désordre, et conduit à une diminution de Z_f.

Chapitre 13

Conclusion

L'approche "grand-N" présentée dans cette deuxième partie nous a permis d'étudier les effets induits par la frustration et/ou le désordre sur un système de type réseau Kondo.
Nous avons ainsi mis en évidence, pour de tels systèmes, l'existence d'un point critique quantique (QCP) entre une phase de liquide de Fermi, induite par l'interaction Kondo, et une phase de liquide de spin.
Cette dernière apparaît lorsque l'énergie J, caractéristique du couplage RKKY entre les moments magnétiques, devient du même ordre que la température de Kondo T_K^0 qu'aurait le même modèle sans frustration ni désordre.
L'approche de ce QCP s'accompagne d'une forte diminution de la température de cohérence $T^\star$ et de la température de Kondo généralisée, qui s'annulent à la transition.
Il apparaît un régime de températures intermédiaires $T^\star \ll T \ll J$ pour lesquelles les propriétés physiques du système peuvent s'interpréter comme provenant d'une diffusion incohérente des électrons sur le liquide de spins.

Troisième partie

Réseau Kondo et ordre magnétique

Chapitre 14

Diagramme de phase magnétique du réseau Kondo

14.1 Présentation

Le problème du réseau Kondo présente certaines similitudes avec l'étude du système constitué par les spins des noyaux atomiques dans un métal. Dans ce cas, les spins localisés $\vec{S}_i$ sont les spins des noyaux, et le couplage Kondo correspond au "hyperfine coupling". Frölich et Nabarro [57] ont discuté dès 1940 de l'apparition d'un ordre ferromagnétique pour les spins des noyaux. Plus tard, Ruderman et Kittel [151] ont dérivé l'interaction nucléaire spin-spin indirecte par un développement en théorie de perturbation au deuxième ordre[1] :

$$H_{RKKY} = -\frac{9\pi}{8} n_c^2 \frac{J_K^2}{\epsilon_F} \sum_{\langle ij \rangle} \frac{\vec{S}_i.\vec{S}_j}{r_{ij}^3} \left[2k_F \cos\left(2k_F r_{ij}\right) - \frac{\sin\left(2k_F r_{ij}\right)}{r_{ij}} \right] \tag{14.1}$$

où n_c est la densité d'électrons de conduction, et k_F le vecteur d'onde au niveau de Fermi. Cette interaction spin-spin est à longue portée, et change de signe avec la distance r_{ij} séparant deux spins $\vec{S}_i$ et $\vec{S}_j$. Elle est aujourd'hui bien connue sous le nom d'interaction de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY). Le comportement sinusoïdal provient des oscillations de Friedel de la polarisation du spin des électrons de conduction induite par le spin localisé [181]. Les propriétés magnétiques des métaux de terres rares ont été discutées par Kasuya [87], dont la structure magnétique peut essentiellement être expliquée par ce mécanisme. L'apparition d'un ordre magnétique s'oppose au processus de retournement de spin à l'origine de la résonance Kondo. On s'attend donc à ce que l'interaction RKKY s'oppose à l'effet Kondo. Or, l'échelle d'énergie caractéristique de l'échange RKKY est de l'ordre de $J_{RKKY} \sim J_K^2/\epsilon_F$. Doniach [47] a comparé cette énergie à la température de Kondo $T_K \sim \epsilon_F \exp\left(-1/J_K \rho_0(\epsilon_F)\right)$ et il a prévu que l'ordre magnétique peut être énergétiquement favorable au système, particulièrement dans la limite d'un couplage faible ou d'une faible concentration électronique, qui impliquent $J_K \rho_0(\epsilon_F) << 1$.

[1] D'après Tsunetsugu *et al.* [174].

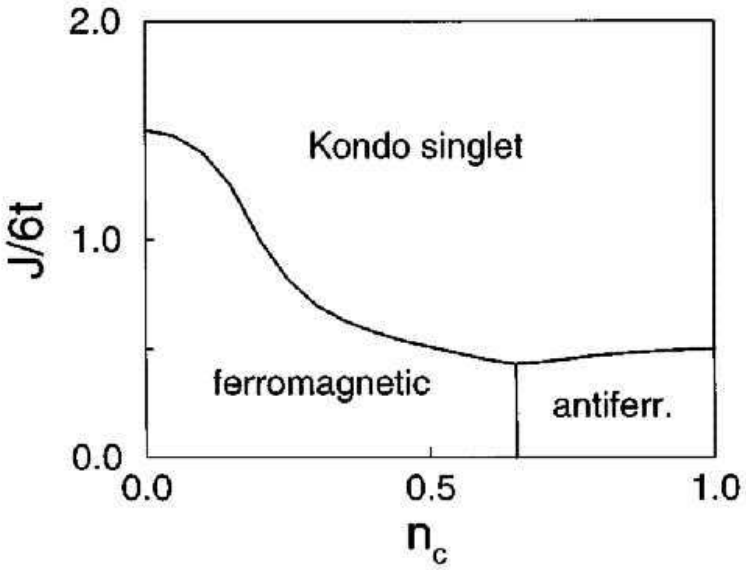


FIG. 14.1: Diagramme de phase schématique dans le plan $n_c - J_K$, obtenu par un traitement Hartree-Fock du réseau Kondo tridimensionnel. Figure d'après Lacroix et Cyrot [98].

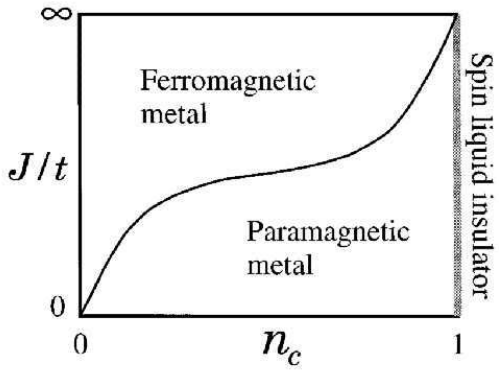
14.1.1 Réseau Kondo seul

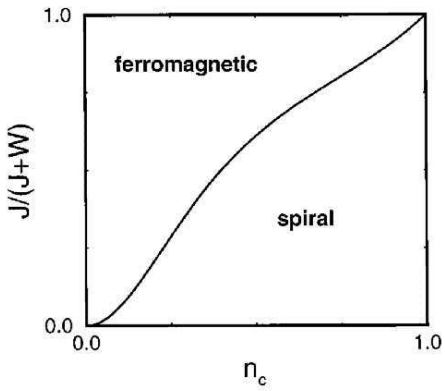
Approche champ moyen

Un traitement Hartree-Fock[2] a été appliqué au réseau Kondo tridimensionnel par Lacroix et Cyrot [98] pour une densité électronique variable. Ils ont comparé la stabilité relative de trois types d'état fondamental, un état Kondo non magnétique, et des états ordonnés ferromagnétiquement ou antiferromagnétiquement. Ils en ont déduit un diagramme de phase en fonction du couplage Kondo J_K/t et du remplissage électronique n_c (voir figure 14.1). En accord avec l'argument de Doniach, il est prédit que le régime de couplage faible soit ordonné magnétiquement. Pour les faibles valeurs de remplissage électronique, cet ordre est ferromagnétique, et devient antiferromagnétique près du demi-remplissage. Lorsque le couplage Kondo est fort, l'état fondamental du système est caractérisé par des singulets Kondo non magnétiques.

Plus récemment, ce traitement de champ moyen a été réexaminé par Fazekas et Müller-Hartmann [51] pour le cas de réseaux Kondo uni et bidimensionnels (voir figure 14.3). Contrairement au résultat obtenu par Lacroix et Cyrot, leur diagramme de phase comprend exclusivement des phases ordonnées magnétiquement. L'ordre ferromagnétique obtenu aux faibles concentrations électroniques est un état propre du Hamiltonien et il peut correspondre à l'état fondamental du réseau Kondo. Par contre, l'ordre spiral qui caractériserait la proximité du demi-remplissage a été obtenu en négligeant la formation des singulets Kondo. On peut donc s'attendre à ce que le véritable état fondamental soit différent.

[2]Très proche de la méthode "grand$-N$" utilisée dans les première et deuxième parties de ce manuscrit.





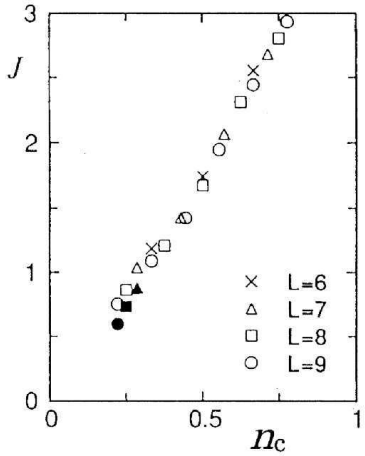


FIG. 14.2: (en haut) Diagramme de phase schématique à température nulle pour le réseau Kondo unidimensionnel. Figure d'après Tsunetsugu *et al.* [174, 173].

FIG. 14.3: (en bas à gauche) Diagramme de phase obtenu en champ moyen pour le réseau Kondo unidimensionnel. L'axe pour le couplage Kondo utilise une échelle particulière, pour laquelle W dénote la largeur totale de la bande électronique. Figure d'après Fazekas et Müller-Hartmann [51].

FIG. 14.4: (en bas à droite) Diagramme de phase du réseau Kondo unidimensionnel déterminé par diagonalisation exacte pour un système de taille L. La région au dessus de la ligne supérieure est une phase ferromagnétique de moment magnétique $(1 - n_c)/2$ par site, tandis que la région en dessous de la ligne inférieure est une phase paramagnétique. La région entre les deux lignes est une phase ferromagnétique avec un moment plus faible. Figure et description d'après Tsunetsugu *et al.* [174, 173].

Diagonalisation exacte du réseau unidimensionnel

Le diagramme de phase du réseau Kondo unidimensionnel a été déterminé complètement par Tsunetsugu *et al.* [174, 173] par diagonalisation exacte pour des systèmes de taille finie. Le diagramme de phase obtenu est reproduit sur la figure 14.4 ; une représentation schématique est donnée sur la figure 14.2. Conformément aux résultats de Fazekas et Müller-Hartmann, les faibles concentrations électroniques favorisent la formation d'un état ferromagnétique. Cependant, les effets de corrélations sont indispensables pour décrire la véritable nature de cette phase. En effet, les électrons forment des états singulets avec certains spins localisés, et le ferromagnétisme se forme uniquement à partir des spins célibataires [174]. La phase paramagnétique semble par contre plus difficile à caractériser. Cependant, Tsunetsugu *et al.* ont mis en évidence de fortes corrélations spin-spin locales, comparables qualitativement à l'ordre spiral suggéré par Fazekas et Müller-Hartmann.

Limite couplage fort

Dans la limite couplage fort, le réseau Kondo est équivalent à un modèle de Hubbard effectif avec répulsion coulombienne infinie, les spins célibataires jouant le rôle des quasiparticules[3]. En utilisant les résultats obtenus pour le modèle de Hubbard, Lacroix [96] est parvenue à décrire qualitativement différents diagrammes de phases magnétiques envisageables pour le réseau Kondo en couplage fort.

14.1.2 Réseau Kondo et interaction magnétique supplémentaire

La prise en compte de l'effet Kondo sur un réseau nécessite l'utilisation d'approximations ou de méthodes qui ne sont pas toujours compatibles avec la prise en compte de l'interaction RKKY. Laissant de coté le problème résolu du réseau unidimensionnel, on peut se demander si le réseau Kondo seul peut expliquer l'apparition d'un ordre antiferromagnétique observé pour des composés de type fermions lourds[4]. Il semblerait que la phase Kondo soit toujours stable indépendemment de la valeur du couplage lorsque l'on considère uniquement un hamiltonien d'échange intra-site [37, 84]. L'interaction RKKY est ainsi généralement prise en compte sous la forme d'une interaction magnétique supplémentaire. Le Hamiltonien est formellement identique à celui étudié dans la deuxième partie de ce manuscrit[5], avec un couplage $J_{ij} \equiv J_{RKKY}$ antiferromagnétique. L'obtention d'un ordre antiferromagnétique suppose par contre que le réseau ne soit pas frustré[6].

Andrei et Coleman [14] ont montré par une approche "grand$-N$" que ce modèle peut faire apparaitre un ordre ferromagnétique ou supraconducteur[7]. Laissant de coté le problème de la

[3]Cette équivalence, démontrée par Nozières et Lacroix [126, 96], est décrite dans la sous-section 2.1.1.

[4]On peut par exemple citer l'alliage $CeRu_2Si_{2-x}Ge_x$, non magnétique lorsque $x < 3-4\%$. Pour des valeurs de x plus élevées, les atomes Ce de ce composé présentent un ordre magnétique à longue portée, avec un effet Kondo résiduel. Cet ordre est essentiellement antiferromagnétique pour $x < 1$, et présente une légère composante ferromagnétique lorsque $1 < x < 2$. Pour $x = 2$, le système devient purement ferromagnétique [142, 44].

[5]Hamiltonien (9.1).

[6]Le problème de la frustration est abordé en deuxième partie.

[7]Pistolesi et Nozières se sont interrogés récemment au sujet de la pertinence physique de cet ordre supracon-

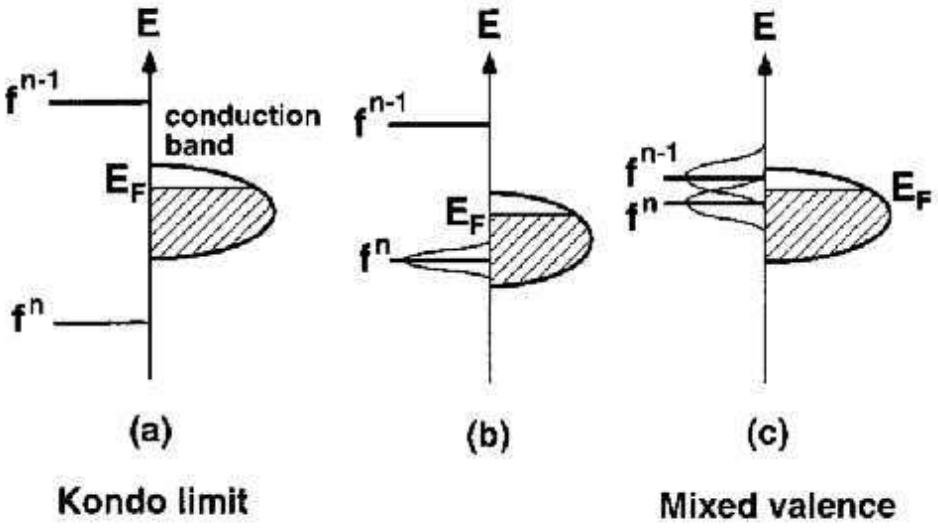


FIG. 14.5: Représentation shématique des niveaux d'énergie des orbitales localisées et de la bande de conduction pour le modèle de Anderson. Figure d'après [174].

supraconductivité des fermions lourds, qui n'a pas été étudié pendant cette thèse, on peut se limiter à l'étude de la compétition entre effet Kondo et ordre antiferromagnétique.

Iglesias, Lacroix et Coqblin [76] ont montré en utilisant une approche de champ moyen que l'interaction magnétique supplémentaire diminue la température de Kondo du réseau par rapport à celle obtenue pour une seule impureté. Pour J_{RKKY} suffisamment élevé, ils ont obtenu une température de Néel[8] supérieure à la température de Kondo.
Par la suite, Ruppenthal *et al.* [152] ont étudié pour le même modèle la compétition entre deux paramètres d'ordre, l'un caractéristique de l'effet Kondo, et l'autre des corrélations spin-spin à courte porté. A basse température, les corrélations spin-spin sont toujours présentes, l'effet Kondo pouvant apparaitre pour une valeur suffisamment élevée du couplage Kondo et du remplissage électronique.
En décomposant le système en deux sous-réseau, il est aussi possible d'étudier l'ordre antiferromagnétique par une approche de champ moyen. Ainsi, Coqblin *et al.* [37] viennent récemment de mettre en évidence pour ce modèle une transition entre un régime Kondo et un ordre antiferromagnétique. Il ne semble cependant pas clair que la transition soit du premier ou du deuxième ordre. Il est d'ailleurs possible qu'une approche de champ moyen ne fournisse pas forcément la bonne réponse, dans la mesure où elle remplace déjà le crossover définissant la température de Kondo par une transition.

ducteur [136]. En particulier, cette approche permet d'obtenir une supraconductivité des orbitales localisées même en l'absence de couplage Kondo. Un contrôle des fluctuations de charges semblerait être indispensable pour ce problème.

[8]Caractéristique de l'apparition de l'ordre antiferromagnétique.

14.1.3 Limite Kondo du modèle de Anderson périodique

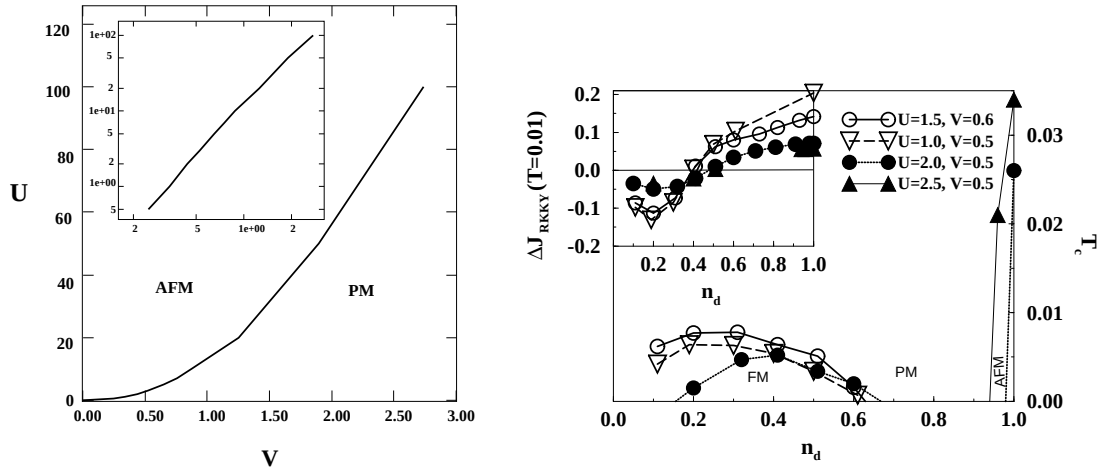


FIG. 14.6: (à gauche) Diagramme de phase du modèle de Anderson périodique symétrique (bande de conduction et orbitales locales à demi-remplies). La transition entre une phase paramagnétique (PM) et une phase ordonnée antiferromagnétiquement (AFM) caractérise l'état fondamental. U représente la répulsion coulombienne pour les orbitales locales, et V l'hybridation entre ces orbitales et la bande de conduction. L'incrustation présente la ligne de transition de second ordre en coordonnées logarithmiques, qui vérifie la relation $U_c \approx V_c^2$ lorsque U devient élevée. $N_S = 6$. Figure d'après Rozenberg [148].

FIG. 14.7: (à droite) Diagramme de phase du modèle de Anderson périodique au demi-remplissage des orbitales locales, et pour différentes valeurs des autres paramètres. n_d représente le remplissage électronique. FM, PM, et AFM correspondent respectivement aux phases ferromagnétique, paramagnétique et antiferromagnétique. Figure d'après Jarrell *et al.* [167].

Un autre moyen d'accéder au diagramme de phase du réseau Kondo consiste à étudier le modèle de Anderson périodique dans la limite Kondo[9]. La figure 14.5 décrit la bande de conduction et les niveaux des orbitales localisées correspondant à un modèle de Anderson.

Lors d'une première étude par résolution numérique des équations de DMFT, Jarrell[10] *et al.* [79] ont mis en évidence l'existence d'une transition antiferromagnétique lorsque la bande de conduction est à demi-remplie. Par la suite, Rozenberg [148] a pu comparer numériquement la stabilité d'un ordre antiferromagnétique par rapport à une solution paramagnétique (voir figure 14.6). Le résultat de Rozenberg a été obtenu par DMFT, le problème effectif local étant résolu pas diagonalisation exacte.

[9]Le second se déduit du premier par la transformation de Schrieffer-Wolff [157], qui revient à fi xer à un électron le niveau d'occupation de l'orbitale localisée, toute fluctuation de charge lui étant interdite.

[10]L'algorithme étant implémenté par une approche de Monte Carlo Quantique.

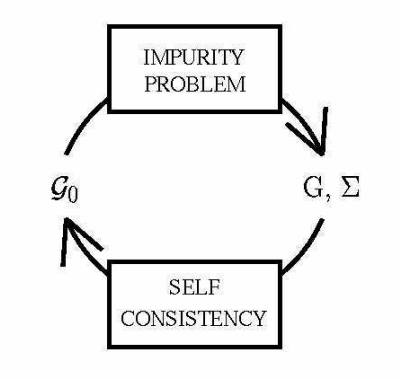


FIG. 14.8: Pour $\mathcal{G}_0$ donné, la fonction de Green G associée est obtenue en résolvant le modèle à une impureté. Cette fonction est alors utilisée dans la relation auto-consistante (14.7) pour calculer le nouveau bain effectif $\mathcal{G}_0$. Figure d'après Georges, Kotliar, Krauth et Rozenberg [65].

Par la suite, Jarrell *et al.* [167] ont dérivé un diagramme de phase en fonction du remplissage de la bande de conduction. Pour cela, il ont traité numériquement le problème effectif local (dérivé de DMFT) en utilisant un algorithme de Monte Carlo Quantique. Le diagramme de phase présenté sur la figure 14.7 fait apparaitre un état fondamental antiferromagnétique au demi-remplissage de la bande de conduction, ce qui est compatible avec le résultat de Rozenberg (figure 14.6). De plus, il confirme en partie l'idée de Doniach [47], que des transitions magnétiques puissent être induites par une variation du remplissage électronique.

Le problème de l'apparition d'un ordre ferromagnétique pour le modèle de Anderson périodique a aussi été abordé par Meyer et Nolting [119] qui ont résolu numériquement par théorie de perturbation modifiée le modèle effectif local issu de DMFT. Cependant, ils se sont plutôt intéressé au régime de valence intermédiaire (voir figure 14.5).

14.1.4 Conclusion

Le diagramme de phase du réseau Kondo a été déterminé complètement par Tsunetsugu *et al.* [174, 173] dans le cas unidimensionnel. Cette approche ne permet pas vraiment de justifier l'apparition de l'ordre antiferromagnétique observé pour de nombreux composés de fermions lourds.

Des traitements en champ moyen ont été utilisés, assez proches des méthodes présentées dans les première et deuxième parties de ce manuscrit, et elles sembleraient mettre en évidence une transition antiferromagnétique, sous réserve de rajouter au Hamiltonien du réseau Kondo une contribution magnétique supplémentaire, semblable à celle que nous avons considérée en deuxième partie[11].

Une autre approche consiste à étudier le modèle de Anderson périodique dans sa limite Kondo. La théorie du champ dynamique moyen [65] (DMFT) réduit le problème du réseau en un problème effectif local auto-consistant, qui peut être résolu numériquement par diverses méthodes.

[11] Hamiltonien (9.1) sans désordre ni frustration.

14.2 Formulation du problème par DMFT

Le modèle qui nous intéresse est le modèle de Anderson périodique, défini par l'action suivante :

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= -\sum_{\vec{k},\sigma} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \psi^\dagger_{\vec{k}\sigma}(\tau) \overline{\overline{G}}_0^{-1}(\tau-\tau') \psi_{\vec{k}\sigma}(\tau') \\ &+ U \sum_i \int_0^\beta d\tau (n_{if\uparrow}(\tau) - \frac{1}{2})(n_{if\downarrow}(\tau) - \frac{1}{2}) \end{aligned} \tag{14.2}$$

Où $\psi_{\vec{k}\sigma} \equiv (c_{\vec{k}\sigma}, f_{\vec{k}\sigma})$ est défini à partir des opérateurs d'anihilation $c_{\vec{k}\sigma}$ et $f_{\vec{k}\sigma}$ associés respectivement aux électrons de la bande de conduction et des niveaux f localisés. $\vec{k}$ décrit la zone de Brilloin, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ est la composante du spin, et U est la répulsion coulombienne locale pour les électrons f. Le propagateur $\overline{\overline{G}}_0$ est donné par la matrice :

$$\overline{\overline{G}}_0^{-1}(\vec{k}, i\omega) = \begin{pmatrix} i\omega + \mu - \epsilon_{\vec{k}} & V_{\vec{k}} \\ V_{\vec{k}} & i\omega + \mu + \epsilon_f \end{pmatrix} \tag{14.3}$$

Pour simplifier, on choisit une hybridation $V_{\vec{k}} \equiv V$ indépendante de $\vec{k}$. Le potentiel chimique μ et le niveau d'énergie de l'orbitale f correspondent à des densités électroniques moyennes par site et composante de spin :

$$\langle c^\dagger_{i\sigma} c_{i\sigma} \rangle = \frac{n_{ci\sigma}}{2} \tag{14.4}$$

$$\langle f^\dagger_{i\sigma} f_{i\sigma} \rangle = \frac{n_{fi\sigma}}{2} \tag{14.5}$$

La limite Kondo de ce modèle s'obtient par la transformation de Schrieffer-Wolff [157], et peut être obtenue numériquement selon les deux étapes suivantes :
Tout d'abord, on règle les paramètres μ, ϵ_f et U du modèle de manière à respecter les contraintes locales $n_{fi\uparrow} + n_{fi\downarrow} = 1$ et $n_{ci\uparrow} + n_{ci\downarrow} = n_c$.
Ensuite, on fait tendre la répulsion coulombienne U vers des valeurs suffisamment élevées pour limiter les fluctuations locales de la charge f.

Les phases paramagnétique ou ferromagnétique ne brisent pas la symétrie du réseau initial et peuvent être déterminées par l'approche DMFT "standard" à un seul site effectif. Par contre, la caractérisation d'un ordre antiferromagnétique nécessite au moins deux sous réseaux et nécessite donc la prise en compte de deux sites effectifs A et B dans le formalisme DMFT. Applicant cette idée, Rozenberg [148] a dérivé les équations de DMFT relatives à un réseau de Bethe de densité d'état libre ρ_c^0 semi-circulaire de largeur $4t$ (voir expression (9.20)). La dérivation du problème effectif local est similaire à celle développée dans la sous-section 9.3.2, et on obtient l'action effective locale[12] :

$$\mathcal{S}_{loc} = -\sum_\sigma \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \psi^\dagger_\sigma(\tau) \overline{\overline{\mathcal{G}}}_{0\sigma}^{-1}(\tau-\tau') \psi_\sigma(\tau') + U \int_0^\beta d\tau (n_{f\uparrow}(\tau) - \frac{1}{2})(n_{f\downarrow}(\tau) - \frac{1}{2}) \tag{14.6}$$

[12] Seuls le potentiel chimique μ et le niveau ϵ_f sont à prendre en compte par rapport au cas symétrique traité par Rozenberg [148]

Où $\psi_\sigma \equiv (c_\sigma, f_\sigma)$ est l'opérateur associé à un site d'un des deux sous-réseaux, choisi comme origine[13]. Les deux propagateurs $\overline{\overline{\mathcal{G}}}_{0\sigma}$ sont donnés par les relations auto-consistantes :

$$\overline{\overline{\mathcal{G}}}^{-1}_{0\sigma A}(i\omega) = \begin{pmatrix} i\omega + \mu - t^2 G_c^{\sigma B}(i\omega) & V \\ V & i\omega + \mu + \epsilon_f \end{pmatrix} \tag{14.7}$$

Lorsque la coordination z du réseau de Bethe est infinie, G_c est la fonction de Green électronique locale. La représentation du système en deux sous-réseaux implique :

$$G_c^{\sigma B} = G_c^{-\sigma A} \tag{14.8}$$

Cette dernière relation permet d'éliminer le sous-réseau B des équations, et de considérer un problème effectif local couplant les composantes de spin $\uparrow$ et $\downarrow$.

La résolution du problème effectif local n'est pas triviale, et un nombre croissant de méthodes numériques se sont développées à partir du schémas de la figure 14.8. Certaines de ces méthodes ont été décrites de manière détaillée par Georges, Kotliar, Krauth et Rozenberg [65], mais la liste s'est élargie depuis[14].

Dans le cadre de cette thèse, je me suis intéressé plus particulièrement à l'adaptation de deux algorithmes utilisant les méthodes de diagonalisation exacte. Les deux sections suivantes traitent de l'adaptabilité de ces algorithmes pour l'étude du diagramme de phase du réseau Kondo.

14.3 Algorithme de Rozenberg

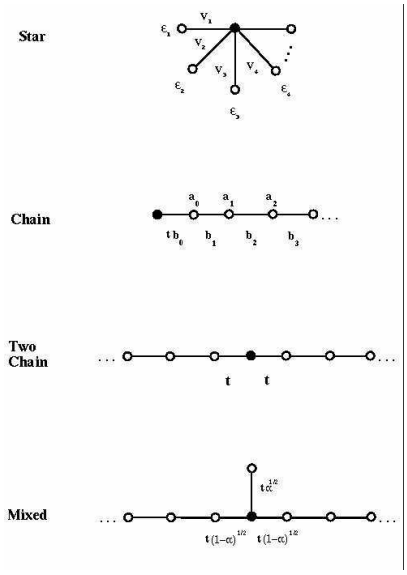
Le diagramme de phase magnétique du modèle de Anderson périodique à demi-rempli (voir figure 14.6) a été déterminé numériquement par Rozenberg [148]. L'algorithme utilisé calcule la fonction de Green de l'impureté à chaque itération (voir figure 14.8) par diagonalisation exacte. Pour cela, le bain effectif $\mathcal{G}_0(\omega)$ est développé en fraction continue tronquée à l'ordre N_S. Le bain effectif approché ainsi obtenu est formellement équivalent à un bain calculé à partir d'une chaîne de N_S sites électroniques (voir figure 14.10). Les niveaux d'énergie électroniques et les énergies d'échange relatifs à cette chaîne effective sont donnés par le développement en fraction continue. Un algorithme de diagonalisation exacte calcule alors les fonctions de Green et la boucle peut recommencer jusqu'à la convergence.

D'un point de vue théorique, plusieurs approches assez similaires peuvent être envisagées pour projeter le bain électronique effectif[15]. Pour ce problème, Rozenberg a utilisé une double chaîne, chacune des deux branches représentant les excitations de particules ($\omega > 0$) ou de trous ($\omega < 0$) associées au bain effectif. Cette décomposition a notamment permis à Rozenberg d'exploiter la symétrie particule-trou du modèle qu'il a étudié. Une étude approfondie de l'algorithme de Rozenberg m'a convaincu que s'il fournit de très bons résultats pour le modèle à demi-rempli, il n'est pas le plus approprié pour faire varier la concentration électronique. Ainsi, par exemple, l'algorithme ne permet pas de suivre une solution en faisant décroître continuellement le potentiel chimique. De manière imagée, il faudrait pour cela donner une

[13] Il existe une action effective $\mathcal{S}_{loc}$ par sous-réseau, mais l'indice A ou B a été omis pour simplifi er les notations.

[14] Pour ce qui concerne le modèle de Anderson périodique, une brève énumération est donnée dans la sous-section2.3.2.

[15] Voir fi gure 14.9.



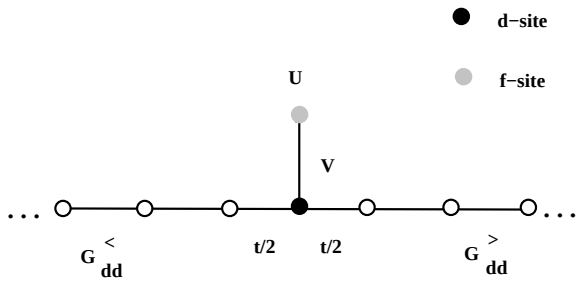


FIG. 14.9: (à gauche) Plusieurs géométries possibles utilisées pour représenter le bain de conduction effectif dans l'algorithme de diagonalisation exacte. L'impureté, en noir, peut contenir une seule orbitale (modèle de Hubbard) ou plusieurs (modèle de Anderson). Figure d'après Georges, Kotliar, Krauth et Rozenberg [65].

FIG. 14.10: (à droite) Double chaîne effective pour le modèle de Anderson. Elle est constituée d'une impureté centrale, comportant un site f et un site c (noté d sur la figure) connecté à un bain électronique effectif. U est la répulsion coulombienne pour le site f, V est l'hybridation $f - c$, et t est l'énergie de recouvrement de la bande de conduction. Figure d'après Rozenberg [148].

souplesse supplémentaire au programme, qui permettrait à des sites de la branche de gauche de passer sur la branche de droite (voir figure 14.10). On pourrait bien sûr envisager d'adapter le programme dans ce sens, mais la logique utilisée pour labeller les sites serait dans ce cas à revoir entièrement, ce qui reviendrait pratiquement à écrire un nouveau programme.

Une autre possibilité est d'utiliser un réseau effectif en étoile (voir figure 14.9). Pour cela, il "suffit" d'adapter la relation d'auto-consistance du programme de Krauth [65], écrite pour un modèle de Hubbard. En effet, en intégrant les électrons de la bande de conduction, le modèle de Anderson périodique se renormalise en un modèle de Hubbard effectif.

14.4 Equivalence avec un modèle de Hubbard effectif

14.4.1 Modèle de Hubbard en DMFT

Le modèle effectif local dérivé à partir du modèle de Hubbard est donné par l'action suivante [65] :

$$\mathcal{S}_H = -\sum_\sigma \int_0^\beta d\tau f_\sigma^\dagger(\tau)\mathcal{G}_{0f}^{-1}(\tau-\tau')f_\sigma(\tau') + U\int_0^\beta d\tau(n_{f\uparrow}(\tau)-\frac{1}{2})(n_{f\downarrow}(\tau)-\frac{1}{2}) \quad (14.9)$$

Pour un réseau de Bethe, la relation auto-consistante vérifiée par le bain effectif $\mathcal{G}_{0f}$ est la suivante :

$$\mathcal{G}_{0f}^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu + \epsilon_f - t^2 G_f(i\omega) \quad (14.10)$$

14.4.2 Modèle de Anderson périodique en DMFT

L'action effective locale correspondant au modèle de Anderson périodique est donnée par l'expression (14.6). La répulsion coulombienne contribue à cette action sous la forme d'une self-énergie locale $\Sigma_{f\sigma}$. On en déduit les fonctions de Green

$$G_{c\sigma}^{-1}(i\omega) = \mathcal{G}_{c\sigma}^{-1}(i\omega) - V^2\mathcal{G}_{f\sigma}(i\omega) \quad (14.11)$$
$$G_{f\sigma}^{-1}(i\omega) = \mathcal{G}_{f\sigma}^{-1}(i\omega) - V^2\mathcal{G}_{c\sigma}(i\omega) \quad (14.12)$$

Avec les relations d'auto-consistance :

$$\mathcal{G}_{c\sigma}^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu - t^2 G_{c\sigma}(i\omega) \quad (14.13)$$
$$\mathcal{G}_{f\sigma}^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu + \epsilon_f - \Sigma_{f\sigma}(i\omega) \quad (14.14)$$

Afin de généraliser au modèle de Anderson la relation auto-consistante (14.10) obtenue pour le modèle de Hubbard, on définit le bain effectif $calG_{0f\sigma}$ par :

$$\mathcal{G}_{0f\sigma}^{-1}(i\omega) = G_{f\sigma}^{-1}(i\omega) + \Sigma_{f\sigma}(i\omega) \quad (14.15)$$

On en déduit une relation similaire à eq.(14.10) :

$$\boxed{\mathcal{G}_{0f\sigma}^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu + \epsilon_f - V^2\mathcal{G}_{c\sigma}(i\omega) \quad (14.16)}$$

En éliminant $\mathcal{G}_{f\sigma}$, $\Sigma_{f\sigma}$ et $G_{c\sigma}$ des relations (14.11), (14.12), (14.13) et (14.14), on obtient :

$$\boxed{t^2V^2G_{f\sigma}(i\omega)\mathcal{G}_{c\sigma}^3(i\omega) + t^2\mathcal{G}_{c\sigma}^2(i\omega) - (i\omega+\mu)\mathcal{G}_{c\sigma}(i\omega) = -1 \quad (14.17)}$$

Cette équation du troisième degré, couplée à la relation (14.16), permet de retrouver quelques limites bien connues.

- Pour $t = 0$, l'équation (14.17) devient simplement $\mathcal{G}_{c\sigma}^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu$. Effectivement, le système se réduit à une hybridation de couplage V entre deux orbitales atomiques c et f, la première ayant l'énergie μ, la deuxième l'énergie $\mu + \epsilon_f$, avec une répulsion coulombienne U.

- Pour $V = 0$, l'orbitale f est décorrélée de la bande de conduction, et eq. (14.16) devient simplement $\mathcal{G}_{0f\sigma}^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu + \epsilon_f$. Parallèlement, l'équation (14.17) devient l'équation du second degré dont la solution est une fonction de Green $\mathcal{G}_c$ semi-circulaire (voir expression (9.20)), caractéristique d'électrons de conduction sur un arbre de Bethe sans interaction.

- Pour $U = 0$, le problème se réduit à une simple hybridation entre des niveaux f localisés, d'énergie $\mu + \epsilon_f$, et une bande de conduction de densité semi-elliptique G_c^0. On trouve que $G_{f\sigma} = \mathcal{G}_{0f\sigma}$, puis que $G_f(i\omega) = \frac{1}{i\omega+\mu+\epsilon_f}[1 + \frac{V^2}{i\omega+\mu+\epsilon_f} G_c^0(i\omega + \mu - \frac{V^2}{i\omega+\mu+\epsilon_f})]$. Cette dernière relation permet de mettre en évidence l'apparition d'un gap d'hybridation pour la densité spectrale associée à G_f, qui devrait devenir un pseudo-gap sous l'effet d'une faible répulsion coulombienne U.

Ainsi, il semblerait que les relations (14.16) et (14.17) reproduisent qualitativement bien les trois régimes limites $t = 0$, $V = 0$ et $U = 0$. Ainsi, en les substituant à la relation (14.10), il est théoriquement possible de transformer un algorithme de résolution du modèle de Hubbard par DMFT en un algorithme de résolution du modèle de Anderson.

Un problème important reste cependant à résoudre. En effet, pour $i\omega$ et $G_{f\sigma}(i\omega)$ donnés, l'équation (14.17) possède trois solutions $\mathcal{G}_c(i\omega)$, dont une seule correspond à une fonction de Green. Comment être certain de choisir numériquement la bonne ?

L'astuce est la suivante. En notant $\mathcal{G}_c^{(\alpha)}(i\omega)$ ($\alpha = 1, 2, 3$), les trois solutions, on trouve que à haute fréquence, $\sum_\alpha \mathcal{G}_c^{(\alpha)}(i\omega) \sim -i\omega/V^2$, ce qui prouve que au moins l'une des trois diverge comme $i\omega$. On considère ensuite la quantité $\sum_{\alpha\neq\beta} \mathcal{G}_c^{(\alpha)}(i\omega)\mathcal{G}_c^{(\beta)}(i\omega)$, qui diverge comme $\omega^2/(t^2V^2)$ à haute fréquence. Sachant que au moins l'une des fonctions $\mathcal{G}_c^{(\alpha)}(i\omega)$ diverge comme $i\omega$, on en déduit finalement que deux sont divergentes à haute fréquence, et que seule la troisième, s'annulant comme $1/i\omega$, correspond à une fonction de Green.

L'algorithme que j'ai écrit commence par résoudre l'équation (14.17) pour des hautes fréquences. Ensuite, en utilisant les propriétés d'analyticité de $\mathcal{G}_c$, je suis parvenu à suivre la solution physique jusqu'aux basses fréquences, déterminant ainsi le bain effectif de manière univoque. J'ai par la suite intégré mon algorithme de détermination du bain effectif dans le programme de Krauth [65], ce qui me permet pour l'instant d'obtenir numériquement des solutions paramagnétiques du modèle de Anderson pour des faibles valeurs de U.

La principale instabilité pouvant faire diverger le programme provient de la méthode de projection du bain effectif. Dans le cadre du programme de Rozenberg, cette projection, obtenue par un développement en fraction continue, fournit un développement unique du bain effectif. Dans le cadre du programme de Krauth, la détermination des paramètres de l'étoile représentant le bain effectif (voir figure 14.9) est un problème "mal défini", dans le sens où cette projection n'est pas unique. La difficulté à projeter le bain effectif est d'autant plus grande que

le nombre de sites de l'étoile est faible[16].

Une première amélioration de ce programme consisterait donc à stabiliser l'algorithme de projection du bain effectif en diminuant le nombre de degrés de liberté du bain projeté. Si le programme parvient à être stabilisé pour les grandes valeurs de U, un premier test pourrait être effectué dans la phase paramagnétique, pour laquelle des résultats existent déjà (voir première partie).

Par la suite, une étude des phases magnétiques pourrait être obtenue en adaptant un programme que Chitra [29] a développé pour étudier la transition entre un métal antiferromagnétique et un isolant antiferromagnétique [30].

[16]Le groupe de renormalisation numérique de Wilson permet de résoudre le système en représentant le bain effectif par une cinquantaine de sites [40]. Par contre, la diagonalisation exacte ne permet pas de dépasser la dizaine de sites. Il n'est cependant pas nécessaire de chercher à trop augmenter ce nombre et il vaut mieux optimiser l'algorithme de projection du bain.

Chapitre 15

Conclusion et perspectives

Comprendre comment se forment les quasiparticules en présence de fortes interactions locales, ainsi que connaître la nature de ces quasiparticules, constituent un problème crucial pour la physique des systèmes d'électrons corrélés. Ces questions s'avèrent particulièrement pertinentes pour expliquer les propriétés physiques des alliages composés de terres rares, ainsi que pour étudier la phase normale des supraconducteurs à haute température critique. Dans le premier cas, la compétition entre l'effet Kondo et les interactions magnétiques inter-sites peuvent permettre d'obtenir trois états fondamentaux de natures différentes : un liquide de Fermi de grande masse effective, un non liquide de Fermi (i.e. présentant des déviations surprenantes par rapport aux prédictions de la théorie des liquides de Fermi), et un métal magnétique [186]. Dans le second cas, une phase isolante et magnétique fait apparaître des propriétés métalliques non conventionnelles sous l'effet du dopage [187]. Mise à part l'apparition de la supraconductivité, les diagrammes de phase des alliages de terres rares et ceux des supraconducteurs à haute température critique présentent certaines similarités remarquables. Celles-ci reflètent dans ces deux cas la présence de deux effets essentiels : fortes interactions locales et proximité d'une phase magnétique.
Le travail effectué dans le cadre de ma thèse pourrait être poursuivi autour des trois problèmes suivants :

1.- L'état fondamental liquide de Fermi et l'échelle de cohérence du réseau Kondo.

Lorsqu'elle existe, on définit la température de cohérence d'un système Kondo comme la température en dessous de laquelle les propriétés physiques de ce système suivent les lois prédites par la théorie des liquides de Fermi. Comme il a été dans un premier temps souligné par Nozières [126, 127], pour des systèmes Kondo denses et comportant une faible densité d'électrons de conduction, l'échelle de cohérence devrait être beaucoup plus basse que la température de Kondo obtenue pour une seule impureté.

Un résultat important présenté dans ce manuscrit a été obtenu en étudiant le Hamiltonien du réseau Kondo par une théorie de champ moyen de type "grand-N" (exacte dans la limite $N \to \infty$, où N est le nombre de composantes de spin que possèdent les ions magnétiques). J'ai notamment montré [27] que le modèle fait apparaître deux échelles de températures distinctes, comme il a été observé expérimentalement dans des systèmes tels que $CePd_3$ [102], $CeIr_2Ge_2$ [109], ou dans les séries $YbXCu_4$ (X = Ag, Cd, In, Mg, Tl, Zn) [103]. Le rapport

entre ces deux échelles, obtenu par cette théorie, est nettement plus important que celui estimé par Nozières [126, 127], et il ne dépend que de la densité d'électrons de conduction, et non pas de la valeur du couplage Kondo.

Il reste cependant à comprendre de quelle manière ce résultat dépend des fluctuations de charges, présentes aussi bien dans le modèle Kondo "grand-N" que dans le modèle de Anderson périodique, pour lequel des résultats similaires ont été obtenus [79]. Je propose de répondre à cette question en utilisant deux approches complémentaires :
a) En calculant les corrections en $1/N$ apportées au résultat précédant. Cette technique permet en effet, à l'ordre non trivial le plus bas, de contrôler les effets de fluctuation de charge, non maîtrisés dans la limite $N \to \infty$.
b) En applicant des techniques numériques telles que la théorie du champ dynamique moyen [65] (DMFT), implémentée par le groupe de renormalisation numérique de Wilson [26], pour l'étude du modèle de Anderson périodique et du réseau Kondo. L'avantage de ces méthodes numériques, par rapport aux approches analytiques, est de pouvoir considérer directement le cas physique $N = 2$ sans approximation.

2.- Le diagramme de phase magnétique du réseau Kondo.

Lorsque les interactions magnétiques RKKY entre les sites sont plus importantes que la température Kondo, l'état fondamental liquide de Fermi se déstabilise en faveur d'un état fondamental magnétique. Etonnamment, le diagramme de phase magnétique du réseau Kondo est assez peu connu, sauf dans le cas du modèle à une dimension [174]. Un problème d'un intérêt considérable pour les expérimentateurs consiste à étudier les changements de nature de l'état magnétiquement ordonné, lorsque l'on fait varier la concentration en électrons de conduction. La DMFT implémentée par des simulations Monte Carlo quantiques [167] laisse présager que, en l'absence de désordre, des phases antiferro et ferromagnétiques sont possibles, la première étant privilégiée dans une région plus restreinte du diagramme de phase. Je propose de poursuivre l'étude de ce problème en utilisant une version "diagonalisation exacte" de la méthode DMFT [65], que j'estime plus appropriée que les méthodes Monte Carlo, pour ce qui est de la détermination des propriétés de l'état fondamental du système.

3.- Désordre, frustration, et comportement de non liquide de Fermi dans les systèmes d'électrons fortement corrélés.

A la frontière entre les phases magnétique et non magnétique se trouve un point critique quantique (QCP), au voisinage duquel une grande variété de systèmes, d'un intérêt expérimental notable, présentent des propriétés anormales de non liquides de Fermi (NFL) [186, 115, 120, 184]. Un grand nombre de composés présentant un comportement NFL sont des alliages, et il est crucial de comprendre les effets liés au désordre, inévitable dans ces systèmes. En formant un alliage, on génère du désordre pour les couplages d'échange RKKY ; les effets de frustrations induits peuvent alors faire apparaître une phase de verre de spin (SG) dans le voisinage du QCP, comme il a été observé dans $UCu_{5-x}Pd_x$ [178] et $Ce(Ru_{0.5}Rh_{0.5})_2Si_2$ [**?**]. Mises à part les propriétés du SG, ces QCP sont bien compris du point de vue théorique [161, **?**] pour le cas de systèmes possédant une forte anisotropie uniaxiale, ce qui n'est pas le cas des systèmes de spins isotropes. Les études par "grand-N" [153, 28] laissent présager que le QCP isotrope pourrait appartenir à une classe d'universalité différente, mais il n'est actuellement pas

évident que ces résultats puissent s'appliquer au cas physique $N = 2$. Je propose d'étudier ce problème en généralisant au cas isotrope les techniques Monte Carlo qui avaient été développées pour des systèmes de type Ising [71]. Les alliages AuFe concentrés [122] pourraient être des systèmes expérimentaux pour lesquels s'appliquerait cette théorie.

Même en l'absence de désordre, une frustration d'origine géométrique peut exister dans des systèmes physiques. Un système pour lequel cette frustration géométrique semble jouer un rôle important est le métal LiV_2O_4, l'unique fermion lourd connu actuellement qui ne soit pas constitué de terre rare [93]. Ce composé est un métal avec pour structure un réseau cfc-spinelle normal et il présente un comportement de NFL dans une large gamme de températures. Des réseaux de spins isolants de même structure sont connus comme ayant un état fondamental non magnétique, de type liquide de spin. Ceci pourrait faire apparaître un QCP entre deux états fondamentaux singulets, dont les propriétés seraient différentes de celles obtenues pour les QCP ordinaires. Dans le cadre de ma thèse, j'ai résolu pour la théorie $N = \infty$ un modèle simplifié permettant de décrire qualitativement certains des résultats observés pour des systèmes de ce type [28], comme par exemple une forte augmentation de la masse effective à l'approche du QCP.
Je propose d'étudier des modèles plus réalistes d'impuretés Kondo sur réseaux frustrés, et de compléter les calculs par des développements en $1/N$, ainsi que par les techniques numériques que j'ai évoquées précédemment.
Les méthodes développées pendant ma thèse pour étudier la proximité d'un QCP induit par la frustration magnétique devraient s'adapter sans trop de difficulté à l'étude d'un modèle plus réaliste pour LiV_2O_4 [97].

Finalement, il serait aussi intéressant d'explorer en détail les similarités et les différences entre les propriétés de NFL des modèles Kondo et Anderson périodiques, généralement utilisés pour décrire les systèmes d'électrons f, et les modèles d'isolants de Mott utilisés comme modèles pour les matériaux à haute température critique, un sujet qui commence à attirer l'attention des théoriciens [73].

Annexe A

Solution des équations de col en couplage faible

On pose :

$$\boxed{I_n[F] = r^{2n-2}\int_{\omega_1}^{0}\frac{d\omega}{(\omega+\mu+\lambda_0)^n}F(\mu+\omega-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0})} \qquad \text{(A.1)}$$

avec

$$\omega_1 = -\mu - \left(\frac{D+\lambda_0}{2}\right) - \sqrt{\left(\frac{D-\lambda_0}{2}\right)^2 + r^2} \qquad \text{(A.2)}$$

$\pm D$ est le cut-off de la fonction F.
L'intérêt d'étudier d'une telle fonctionnelle vient du fait que à température nulle, les équations de col, ainsi que les quantités physiques relatives au réseau Kondo, peuvent s'exprimer de manière simple à partir de certaines $I_n[F]$. En pratique, la fonction F sera la densité d'états sans interaction ρ_0 ou l'une de ses dérivées. Nous présentons ici une méthode permettant de simplifier $I_n[F]$ dans la limite $r/D \to 0$, avec $r^2/(\mu+\lambda_0) = \mathcal{O}(D)$, ce qui correspond en pratique à la limite couplage faible du réseau Kondo.

A.1 Développement de Taylor

On effectue un développement de Taylor pour $F(\omega' = \mu+\omega-r^2/(\omega+\mu+\lambda_0))$ autour de $\omega' = -\lambda_0$. Un tel développement est possible si l'on suppose d'une part que le domaine d'intégration $]\omega_1, 0[$ ne comporte pas de singularité, et d'autre part que le niveau $-\lambda_0$ appartienne bien à la bande libre $]-D, D[$. En pratique, la première hypothèse correspond à supposer $n_c \leq 1$, (ce qui n'est pas restrictif par symétrie particule-trou) ; et la seconde est vérifiée lorsque l'on fait tendre le couplage Kondo vers zéro à remplissage n_c fixé.

$$F\left(\mu+\omega-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right) = \sum_{p=0}^{+\infty}\frac{F^{(p)}(-\lambda_0)}{p!}\left(\omega+\mu+\lambda_0-\frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right)^p \qquad \text{(A.3)}$$

$F^{(p)}$ est la dérivée p-ième de la fonction F.
On développe ensuite le terme en $\left[\omega+\mu+\lambda_0-r^2/(\omega+\mu+\lambda_0)\right]^p$ en introduisant les coefficients du binôme $C_q^p=\frac{p!}{q!(p-q)!}$. On obtient :

$$I_n[F]=\sum_{p=0}^{+\infty}\frac{F^{(p)}(-\lambda_0)}{p!}\sum_{q=0}^{p}(-1)^q C_q^p r^{2(n+q-1)}\int_{\omega_1}^{0}d\omega\,(\omega+\mu+\lambda_0)^{p-2q-n} \tag{A.4}$$

A.2 Limite $r/D\to 0$

Dans la double sommation sur p et q, la plupart des termes s'annulent lorsque l'hybridation effective r/D tend vers zéro. Afin d'éliminer ces termes, nous allons intervertir ces deux sommations. Pour cela, effectuons le changement de variables suivant :

$$q'=p-2q-n \tag{A.5}$$

(on garde p comme seconde variable)
La contrainte de sommation, $0\le q\le p<+\infty$, dans l'expression (A.4), devient :

$$\begin{cases} -\infty<q'<+\infty \\ p\ge|q'+n| \\ p\equiv q'+n \qquad [2] \end{cases} \tag{A.6}$$

Ainsi, le développement (A.4) prend la forme suivante :

$$I_n[F]=\sum_{q'=-\infty}^{+\infty}U_{q'}\int_{\omega_1}^{0}d\omega\,(\omega+\mu+\lambda_0)^{q'} \tag{A.7}$$

Avec

$$U_{q'}=\sum_{\substack{p=|q'+n|\\ p\equiv q'+n\ [2]}}^{+\infty}(-1)^{\frac{p-q'-n}{2}}C^p_{\frac{p-q'-n}{2}}\frac{F^{(p)}(-\lambda_0)}{p!}r^{n-2+p-q'} \tag{A.8}$$

Dans la limite $r/D\to 0$, la somme $U_{q'}$ est complètement dominée par le terme $p=|q'+n|$, et on a :

$$U_{q'}=\left[1+\mathcal{O}(r^2/D^2)\right]\frac{F^{(|q'+n|)}(-\lambda_0)}{|q'+n|!}(-1)^{\frac{q'+n-|q'+n|}{2}}r^{n-2+|q'+n|-q'} \tag{A.9}$$

A.3 Théorème de Luttinger $\Rightarrow r^2/(\mu+\lambda_0)=\mathcal{O}(D)$

Indépendemment du couplage Kondo, le théorème de Luttinger fournit la relation (4.5) :

$$\frac{r^2}{\mu+\lambda_0}=-\Delta\mu \tag{A.10}$$

où

$$\Delta\mu = \mu_0(n_c+1) - \mu \tag{A.11}$$

$\mu_0(n_c+1)$ est le potentiel chimique correspondant à $(n_c+1)/2$ électrons libres par site et par couleur. Dans la limite couplage faible, $\mu \to \mu_0(n_c)$, ce qui permet de prendre $r/D \to 0$ tout en gardant $r^2/(\mu+\lambda_0) = -\Delta\mu = \mathcal{O}(D)$. On a alors

$$\lambda_0 = -\mu + \mathcal{O}(r^2/D) \tag{A.12}$$

$$\omega_1 = -D - \mu - \frac{r^2}{D+\mu} + \mathcal{O}(r^4/D^3) \tag{A.13}$$

Puis

$$\int_{\omega_1}^{0} d\omega(\omega+\mu+\lambda_0)^{q'} = \left[1+\mathcal{O}\left(\frac{r^2}{D^2}\right)\right] \times \begin{cases} \frac{1}{1+q'}\left(\frac{-r^2}{\Delta\mu}\right)^{1+q'} & \text{si } q' < -1 \\ \ln\left(\frac{r^2}{(D+\mu)\Delta\mu}\right) & \text{si } q' = -1 \\ \frac{-1}{1+q'}\left(-D-\mu\right)^{1+q'} & \text{si } q' > -1 \end{cases} \tag{A.14}$$

A.4 Re-sommation de la série (lorsque $r/D \to 0$)

Dans la limite $r/D \to 0$, l'expression (A.7) peut être simplifiée en combinant les développements (A.9) et (A.14). On trouve :

$$I_n[F] = \left[1+\mathcal{O}\left(\frac{r^2}{D^2}\right)\right]\left[I_n^< + I_n^= + I_n^>\right] \tag{A.15}$$

avec

$$\begin{aligned} I_n^< &= \sum_{q=-\infty}^{-2} \frac{F^{(|q+n|)}(\mu)}{|q+n|!} \frac{(-1)^{1+q+\frac{q+n-|q+n|}{2}}}{1+q} \frac{r^{q+n+|q+n|}}{(\Delta\mu)^{1+q}} \\ I_n^= &= \frac{F^{(|n-1|)}(\mu)}{|n-1|!}(-1)^{\frac{n-1-|n-1|}{2}} r^{n-1+|n-1|} ln\left(\frac{r^2}{(D+\mu)\Delta\mu}\right) \\ I_n^> &= \sum_{q=0}^{\infty} \frac{F^{(|q+n|)}(\mu)}{|q+n|!} \frac{(-1)^{\frac{n+q-|q+n|}{2}+q}}{1+q} r^{n-2+|q+n|-q} \left(D+\mu\right)^{1+q} \end{aligned} \tag{A.16}$$

A.4.1 Pour $n = 0$

$$
\begin{aligned}
I_0^< &= \mathcal{O}(1/D^2) \\
I_0^= &= \mathcal{O}\left(\frac{ln(r/D)}{D^2}\right) \\
I_0^> &= \frac{-1}{r^2}\sum_{q=0}^{+\infty}\frac{F^{(q)}(\mu)}{q!}\frac{(-D-\mu)^{1+q}}{1+q}
\end{aligned}
\tag{A.17}
$$

$$
\boxed{r^2 I_0[F] = \int_{-D-\mu}^{0} d\omega F(\mu+\omega) \qquad \text{(A.18)}}
$$

A.4.2 Pour $n = 1$

$$
\begin{aligned}
I_1^< &= -\sum_{p=1}^{+\infty}\frac{F^{(p)}(\mu)}{p!}\frac{(\Delta\mu)^p}{p} \\
I_1^= &= F(\mu) ln\left(\frac{r^2}{(D+\mu)\Delta\mu}\right) \\
I^> &= -\sum_{p=1}^{+\infty}\frac{F^{(p)}(\mu)}{p!}\frac{(-D-\mu)^p}{p}
\end{aligned}
\tag{A.19}
$$

$$
\boxed{I_1[F] = F(\mu) ln\left(\frac{r^2}{(D+\mu)\Delta\mu}\right) - \int_{-D-\mu}^{\Delta\mu} d\omega\left[\frac{F(\mu+\omega)-F(\mu)}{|\omega|}\right] \qquad \text{(A.20)}}
$$

A.4.3 Pour $n \geq 2$

$$
\begin{aligned}
I_n^< &= \mathcal{O}(r^2/D^{4-n}) + (-1)^n\sum_{p=0}^{\infty}\frac{F^{(p)}(\mu)}{p!}\frac{(\Delta\mu)^{p+n-1}}{p+n-1} \\
I_n^= &= \mathcal{O}\left(\frac{r^2}{D^{4-n}} ln(r/D)\right) \\
I_n^> &= \mathcal{O}(r^{2n-2}/D^n)
\end{aligned}
\tag{A.21}
$$

$$
\boxed{I_n[F] = (-1)^n\int_0^{\Delta\mu} d\omega\omega^{n-2}F(\mu+\omega) \qquad \text{(A.22)}}
$$

Annexe B

Température de Kondo dans la limite couplage faible

La température de Kondo du réseau non frustré ou du modèle à une seule impureté est reliée au couplage J_K et à la densité spectrale libre ρ_0 par l'expression (5.2) :

$$\boxed{\frac{2}{J_K} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{tanh(\omega/2T_K)}{\omega} \rho_0(\mu+\omega) \qquad \text{(B.1)}}$$

Je présente ici la dérivation d'une expression de T_K en fonction des paramètres du modèle, valable dans la limite d'un couplage Kondo faible.

B.1 Développement de Taylor pour la densité d'états :

$$\rho_0(\mu+\omega) = \sum_{p=0}^{+\infty} \frac{\rho_0^{(p)}(\mu)}{p!} \omega^p \qquad \text{(B.2)}$$

$\rho_0^{(p)}(\mu)$ est la p-ième dérivée de $\rho_0(\omega)$ au niveau du potentiel chimique μ. On suppose que $\rho_0(\omega)$ possède un cut-off en $\pm D$; l'équation relative à T_K se met alors sous la forme :

$$\frac{2}{J_K} = \sum_{p=0}^{+\infty} I_p(T_K) \qquad \text{(B.3)}$$

avec

$$I_p(T_K) = \frac{\rho_0^{(p)}(\mu)}{p!} \int_{-D-\mu}^{D-\mu} d\omega tanh(\omega/2T_K)\omega^{p-1} \qquad \text{(B.4)}$$

B.2 Limite $J_K \to 0$

B.2.1 Pour $p \geq 1$

Dans ce cas, $I_p(T_K = 0)$ reste fini et vaut :

$$I_p(T_K = 0) = \frac{\rho_0^{(p)}(\mu)}{p!} \left[\frac{(D-\mu)^p + (-1)^p (D+\mu)^p}{p} \right] \tag{B.5}$$

B.2.2 Pour $p = 0$

Dans la limite $J_K \to 0$ (et donc $T_K \to 0$), seule la contribution $I_0(T_K)$ diverge (comme $2/J_K$). On a

$$I_0(T_K) = \rho_0(\mu) \left[\int_{-(D+\mu)/T_K}^{-1} dx + \int_{-1}^{1} dx + \int_{1}^{(D-\mu)/T_K} dx \right] \frac{tanh(x/2)}{x} \tag{B.6}$$

Alors :

$$I_0(T_K \to 0) \sim \rho_0(\mu) \left[ln \left(\frac{D^2 - \mu^2}{T_K^2} \right) + 2ln(\alpha) \right] \tag{B.7}$$

α est un nombre indépendant de ρ_0, D, T_K ou μ, donné par :

$$\alpha = exp \left[\int_0^1 dx \frac{tanh(x/2)}{x} - 2 \int_1^{+\infty} \frac{dx}{x\,(1+e^x)} \right] \tag{B.8}$$

Numériquement, on trouve $\alpha = 1.13387$.

B.3 Re-sommation de la série

Finalement, dans la limite $J_K \to 0$, on trouve :

$$\boxed{T_K(n_c) = F_K(n_c) \left(D^2 - \mu_0^2\right)^{\frac{1}{2}} exp \left[-\frac{1}{J_K \rho_0(\mu_0)} \right]} \tag{B.9}$$

Avec

$$F_K(n_c) = \alpha \exp \left[\int_{-(D+\mu_0)}^{D-\mu_0} \frac{d\omega}{|\omega|} \frac{\rho_0(\mu_0+\omega) - \rho_0(\mu_0)}{2\rho_0(\mu_0)} \right] \tag{B.10}$$

Annexe C

Équations de col ; limite $J_K \to 0$ première correction en température

De manière générale, les trois équations de col (4.3), (4.4) et (4.5), permettant de relier r, λ_0, μ, n_c, J_K, T et ρ_0 s'écrivent :

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f_i(\omega, r^2, \lambda_0)\tilde{n}_F\left[(\omega-\mu)/T\right] = \frac{n_i}{2} \qquad i = 0,\ 1,\ 2 \qquad \text{(C.1)}}$$

avec

$$\boxed{\begin{aligned} n_0 &= n_c \\ n_1 &= -2/J_K \\ n_2 &= 1/r^2 \end{aligned}} \qquad \boxed{\begin{aligned} f_i(\omega, r^2, \lambda_0) &= \frac{\rho_0\left(\omega - \frac{r^2}{\omega+\lambda_0}\right)}{(\omega+\lambda_0)^i} \\ \tilde{n}_F(x) &= \frac{1}{1+e^x} \end{aligned}}$$

$\tilde{n}_F(x)$ est la fonction de Fermi, dont la dépendance en température a été écrite explicitement. Afin de déterminer la dépendance en température de la solution des équations de col, on différencie le système par rapport à T.

C.1 Différenciation par rapport à T

Malgré une dépendance implicite des bornes de l'intégrale, on peut passer la dérivée par rapport à T sous le signe somme car les fonctions f_i s'annulent continuement en bord de domaine d'intégration. La dépendance en température des équations de col peut se découpler en deux contributions, l'une liée à la statistique (facteur de Fermi), l'autre, provenant des paramètres de champ moyen r et λ_0. Les expressions obtenues peuvent alors se mettre sous la

forme :

$$S_{Stat.,i} + S_{CM,i} = \frac{\partial n_i/2}{\partial T} \tag{C.2}$$

Avec

$$\begin{aligned} S_{Stat.,i} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega f_i(\omega, r^2, \lambda_0) \left[\frac{\partial \mu}{\partial T}\frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{\partial}{\partial T}\right] \tilde{n}_F \left(\frac{\omega - \mu}{T}\right) \\ S_{CM,i} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \tilde{n}_F \left(\frac{\omega - \mu}{T}\right) \left[\frac{\partial r^2}{\partial T}\frac{\partial}{\partial r^2} + \frac{\partial \lambda_0}{\partial T}\frac{\partial}{\partial \lambda_0}\right] f_i(\omega, r^2, \lambda_0) \end{aligned} \tag{C.3}$$

C.2 Développement de type Sommerfeld

Tout d'abord, on développe $S_{Stat.,i}$ et $S_{CM,i}$ à basse température par une approche de type Sommerfeld. On obtient :

$$S_{Stat.,i} = \frac{\partial \mu}{\partial T} f_i(\mu, r^2, \lambda_0) + \frac{\pi^2}{3} T f'_i(\mu, r^2, \lambda_0) + \mathcal{O}\left(T^2\right) \tag{C.4}$$

et

$$\begin{aligned} S_{CM,i} &= \frac{\partial \lambda_0}{\partial T} \int_{\omega_1}^{0} d\omega \left[\frac{r^2 \rho'_0\left(\mu + \omega - \frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right)}{(\omega + \mu + \lambda_0)^{i+2}} - i\frac{\rho_0\left(\mu + \omega - \frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right)}{(\omega + \mu + \lambda_0)^{i+1}}\right] \\ &- \frac{\partial r^2}{\partial T} \int_{\omega_1}^{0} d\omega \frac{\rho'_0\left(\mu + \omega - \frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right)}{(\omega + \mu + \lambda_0)^{i+1}} + \mathcal{O}\left(T^2\right) \end{aligned} \tag{C.5}$$

Où $f'_i = \partial f_i(\omega, r^2, \lambda_0)/\partial\omega$ et $\rho'_0(\epsilon) = d\rho_0(\epsilon)/d\epsilon$. On remarque que $S_{CM,i}$ peut s'exprimer simplement avec la famille de fonctionnelles $I_n[F]$ définie en annexe A. Les équations de col différenciées prennent alors la forme :

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \mu}{\partial T} f_i(\mu, r^2, \lambda_0) + \frac{\partial \lambda_0}{r^{2i}\partial T}\left(I_{i+2}[\rho'_0] - iI_{i+1}[\rho_0]\right) - \frac{\partial r^2}{r^{2i}\partial T} I_{i+1}[\rho'_0] - \frac{\partial n_i/2}{\partial T} \\ &= \\ &-\frac{\pi^2}{3} T f'_i(\mu, r^2, \lambda_0) + \mathcal{O}\left(T^2\right) \end{aligned} \tag{C.6}$$

En remarquant que $\partial n_0/\partial T = \partial n_1/\partial T = 0$ et que $\partial n_2/\partial T = -\partial r^2/(r^4 \partial T)$, on obtient un système de trois équations linéaires d'inconues $\partial\mu/\partial T$, $\partial\lambda_0/\partial T$ et $\partial r^2/\partial T$ avec un second membre d'ordre T. On en déduit que la première correction en température pour les paramètres μ, λ_0 et r^2 est au moins d'ordre T^2. Ce résultat permet, dans le développement à basse température de quantités physiques telles que l'entropie ou la chaleur spécifique, de garantir un comportement de liquide de Fermi (voir les détails du calcul de ces quantités).

C.3 Limite couplage faible

On écrit le système sous forme matricielle :

$$\overline{\overline{M}} \begin{pmatrix} \frac{\partial \mu}{\partial T} \\ \\ \frac{\partial \lambda_0}{\partial T} \\ \\ \frac{\partial r^2}{\partial T} \end{pmatrix} = -\frac{\pi^2}{3} T \begin{pmatrix} f'_0(\mu, r^2, \lambda_0) \\ \\ -\frac{r^2}{\Delta\mu} f'_1(\mu, r^2, \lambda_0) \\ \\ \frac{r^4}{(\Delta\mu)^2} f'_2(\mu, r^2, \lambda_0) \end{pmatrix} + \mathcal{O}\left(T^2\right) \tag{C.7}$$

Dans la limite $J_K \to 0$, on exprime la matrice $\overline{\overline{M}}$ en utilisant le développement des fonctionnelles $I_n[F]$ donné en annexe A :

$$\overline{\overline{M}} = \begin{pmatrix} \rho_0(n_c+1) & (\rho_0(n_c+1) - \rho_0(n_c)) & \begin{pmatrix} -\rho'_0(n_c) ln\left(\frac{r^2}{(D+\mu)\Delta\mu}\right) \\ + \int_{-D-\mu}^{\Delta\mu} d\omega \frac{\rho'_0(\mu+\omega) - \rho'_0(\mu)}{|\omega|} \end{pmatrix} \\ \\ \rho_0(n_c+1) & \rho_0(n_c+1) & \left(\frac{\rho_0(n_c+1) - \rho_0(n_c)}{\Delta\mu}\right) \\ \\ \rho_0(n_c+1) & \rho_0(n_c+1) & \frac{\rho_0(n_c+1)}{\Delta\mu} \end{pmatrix} \tag{C.8}$$

En utilisant l'équation de col relative à J_K, on obtient :

$$\begin{array}{c} -\rho'_0(n_c) ln\left(\frac{r^2}{(D+\mu)\Delta\mu}\right) + \int_{-D-\mu}^{\Delta\mu} d\omega \frac{\rho'_0(\mu+\omega) - \rho'_0(\mu)}{|\omega|} \\ = \\ \frac{\rho'_0(n_c)}{\rho_0(n_c)} \left[\frac{1}{J_K} + \int_{-D-\mu}^{\Delta\mu} d\omega \frac{\rho'_0(\mu+\omega)\rho_0(n_c)/\rho'_0(n_c) - \rho'_0(\mu)}{|\omega|}\right] \end{array} \tag{C.9}$$

Dans la limite $J_K/D \to 0$, on peut négliger l'intégrale dans cette expression. On inverse alors le système, puis on intègre par rapport à T les trois expressions obtenues pour $\partial\mu/\partial T$, $\partial\lambda_0/\partial T$ et $\partial r^2/\partial T$. On note $\mu^{(0)}$, $\lambda_0^{(0)}$ et $r^2_{(0)}$ les valeurs des paramètres μ, λ_0 et r^2 à $T = 0$. Cette notation '(0)' est utilisée pour les relations suivantes, où elle permet d'éviter toute ambiguïté. Afin d'alléger les expressions, nous l'avons volontairement omise dès qu'elle est superflue.

$$r^2 = r^2_{(0)} \left[1 - A(n_c)\left(\frac{T}{r^2/D}\right)^2 + \mathcal{O}\left(T^3\right)\right] \tag{C.10}$$

$$\lambda_0 + \mu = (\lambda_0^{(0)} + \mu^{(0)}) \left[1 - B(n_c)\left(\frac{T}{r^2/D}\right)^2 + \mathcal{O}\left(T^3\right)\right] \tag{C.11}$$

$$\lambda_0 = \lambda_0^{(0)} \left[1 - C(n_c, J_K)\left(\frac{T}{r^2/D}\right)^2 + \mathcal{O}\left(T^3\right)\right] \tag{C.12}$$

Avec

$$A(n_c) = \frac{\pi^2}{6}\left(\frac{\Delta\mu}{D}\right)^2 \frac{\rho_0(n_c+1)}{\rho_0(n_c)} \tag{C.13}$$

$$B(n_c) = -\frac{\pi^2}{6}\left(\frac{\Delta\mu}{D}\right)^2 \left[2 - \frac{\rho_0(n_c+1)}{\rho_0(n_c)} + \Delta\mu \frac{\rho'_0(n_c+1)}{\rho_0(n_c+1)}\right] \tag{C.14}$$

$$C(n_c, J_K) = \frac{\pi^2}{6}\frac{\Delta\mu}{\lambda_0}\frac{r^2}{D^2}\frac{\rho_0(n_c+1)}{\rho_0(n_c)}\left[2 - \frac{\rho_0(n_c+1)}{\rho_0(n_c)} - \frac{\Delta\mu\rho'_0(n_c)}{J_K(\rho_0(n_c))^2}\right] \tag{C.15}$$

Annexe D

Susceptibilité magnétique statique

On s'interesse ici au développement de la fonction de correlation spin-spin du réseau non frustré, qui permet d'accéder à la susceptibilité magnétique du système. La susceptibilité magnétique statique est définie par :

$$\chi_0(T) = \int_0^\beta d\tau \chi(\tau) \tag{D.1}$$

où la susceptibilité magnétique dynamique locale est donnée par la fonction de corrélation spin-spin locale :

$$\chi(\tau) = \langle T\vec{S}_0(\tau).\vec{S}_0(0)\rangle \tag{D.2}$$

$\vec{S}_0(\tau)$ désigne l'opérateur de spin (de symétrie $SU(N)$) correspondant au moment magnétique positionné sur le site 0, choisi arbitrairement. En utilisant la représentation fermionique, on a :

$$\chi(\tau) = \frac{1}{N^2}\sum_{\sigma,\sigma'=1}^{N} \langle T(f^\dagger_{0\sigma}(\tau)f_{0\sigma'}(\tau) - \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{2})(f^\dagger_{0\sigma'}(0)f_{0\sigma}(0) - \frac{\delta_{\sigma\sigma'}}{2})\rangle \tag{D.3}$$

Dans la limite $N \to \infty$, l'action (3.23) est quadratique par rapport aux opérateurs de fermions f, et diagonale par rapport aux composantes de spins. $\chi(\tau)$ peut alors se contracter et s'exprimer à partir des fonctions de Green fermioniques locales. On trouve :

$$\chi(\tau) = G_{ff}(\tau)G_{ff}(-\tau) - \frac{1}{2N} \tag{D.4}$$

Alors,

$$\chi_0(T) = \frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}\frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{k}} G^2_{ff}(\vec{k}, i\omega_n) \tag{D.5}$$

Dans l'expression (D.5), on remplace la sommation sur $\vec{k}$ par une intégration pondérée par la densité libre d'états de conduction ρ_0. On trouve :

$$\chi_0(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \rho_0(\epsilon)\frac{1}{\beta}\sum_{i\omega_n}\left[\frac{i\omega_n + \mu - \epsilon}{(i\omega_n + \mu + \lambda_0)(i\omega_n + \mu - \epsilon) - r^2}\right]^2 \tag{D.6}$$

On calcule la somme sur $i\omega_n$ en utilisant le théorème des résidus, selon les méthodes habituelles :

$$\begin{aligned}\chi_0(T) = & - \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \frac{\rho_0(\epsilon)}{(\omega^+ - \omega^-)^2} \left[\frac{(\omega^+ + \mu - \epsilon)(\omega^- + \mu - \epsilon)}{\omega^+ - \omega^-} \left[n_F(\omega^+) - n_F(\omega^-) \right] \right. \\ & + \left. (\omega^+ + \mu - \epsilon)^2 \left. \frac{\partial n_F(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega^+} + (\omega^- + \mu - \epsilon)^2 \left. \frac{\partial n_F(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega^-} \right] \end{aligned} \tag{D.7}$$

Avec

$$\omega^{\pm} = -\mu + \frac{\epsilon - \lambda_0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon + \lambda_0}{2} \right)^2 + r^2} \tag{D.8}$$

On effectue les changements de variables :

$$\begin{array}{lll} \omega = \omega^+ & \text{pour les termes en} & n_F(\omega^+) \\ \omega = \omega^- & \text{pour les termes en} & n_F(\omega^-) \end{array} \tag{D.9}$$

L'expression (D.7) prend alors la forme suivante :

$$\begin{aligned}\chi_0(T) = & - \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{r^4 \rho_0 \left(\mu + \omega - \frac{r^2}{\omega + \mu + \lambda_0} \right)}{(\omega + \mu + \lambda_0)^4 + r^2 (\omega + \mu + \lambda_0)^2} \left. \frac{\partial n_F(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right|_{\epsilon=\omega} \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{2 r^2 \rho_0 \left(\mu + \omega - \frac{r^2}{\omega + \mu + \lambda_0} \right)}{(\omega + \mu + \lambda_0)^3 \left[1 + \frac{r^2}{(\omega + \mu + \lambda_0)^2} \right]} n_F(\omega) \end{aligned} \tag{D.10}$$

A température nulle, on a :

$$\chi_0(T=0) = \frac{r^4 \rho_0 \left(\mu - \frac{r^2}{\mu + \lambda_0} \right)}{(\mu + \lambda_0)^4 + r^2 (\mu + \lambda_0)^2} + \int_{\omega_1}^{0} d\omega \frac{2 r^2 \rho_0 \left(\mu + \omega - \frac{r^2}{\omega + \mu + \lambda_0} \right)}{(\omega + \mu + \lambda_0)^3 \left[1 + \frac{r^2}{(\omega + \mu + \lambda_0)^2} \right]} \tag{D.11}$$

Le second terme, dans l'expression (D.11), est d'ordre inférieur à
$2 r^2 \rho_0(0) \int_{\omega_1}^{0} d\omega \frac{\omega + \mu + \lambda_0}{[r^2 + (\omega + \mu + \lambda_0)^2]^2} = -r^2 \rho_0(0) \left[\frac{1}{r^2 + (\omega + \mu + \lambda_0)^2} \right]_{\omega_1}^{0} = \mathcal{O}\left(\rho_0(0)\right)$.

On en déduit, dans la limite $J_K \to 0$,

$$\boxed{\chi_0(T=0) \approx \frac{r^2}{(\omega + \mu + \lambda_0)^2} \rho_0 (n_c + 1) \qquad \text{(D.12)}}$$

Annexe E

Quantités thermodynamiques

Les quantités thermodynamiques caractéristiques d'un système se déduisent de sa fonction de partition. Dans la limite $N \to \infty$, la fonction de partition du réseau Kondo non frustré se simplifie et s'exprime de manière explicite en fonction des paramètres r, λ_0 et μ. On rappelle que au point de col, la densité d'états de quasiparticules est donnée par :

$$\boxed{\rho(\omega) = \left[1 + \frac{r^2}{(\omega+\mu+\lambda_0)^2}\right] \rho_0 \left(\mu + \omega - \frac{r^2}{\omega+\mu+\lambda_0}\right) \qquad \text{(E.1)}}$$

E.1 Fonction de partition

La fonction de partition du système est donnée par l'expression (3.21) :

$$Z^{(N)} = \int \prod_j \mathcal{D}B_j(\tau) exp\left[-\frac{N}{J_K}\int_0^\beta d\tau \sum_j B_j^\dagger(\tau)B_j(\tau)\right] T_R T exp\left[\sum_\sigma \mathcal{S}_\sigma\right] \qquad \text{(E.2)}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_\sigma = \int_0^\beta d\tau \Bigg[&\sum_{\vec{k}} \left[c_{\vec{k}\sigma}^\dagger(\tau)\left(\partial_\tau + \epsilon_{\vec{k}} - \mu\right) c_{\vec{k}\sigma}(\tau) + \frac{n_c}{2}\mu\right] \\ &+ \sum_j \left[B_j(\tau) f_{j\sigma}^\dagger(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + B_j^\dagger(\tau) c_{j\sigma}^\dagger(\tau) f_{j\sigma}(\tau) + f_{j\sigma}^\dagger(\tau)\left(\partial_\tau - i\lambda_j(\tau)\right) f_{j\sigma}(\tau) + \frac{i}{2}\lambda_j(\tau)\right]\Bigg]\end{aligned}$$

Dans la limite $N \to \infty$, les intégrales fonctionnelles sur $B_j(\tau)$ sont dominées par leur valeur au point de col $B_j(\tau) = r$, et les multiplicateurs de Lagrange deviennent uniformes et statiques $i\lambda_j(\tau) = \mu + \lambda_0$. On a alors :

$$Z^{(N)} = \exp\left\{-\beta N \mathcal{F}_0\right\} \left[T_R T exp\left[\sum_{i\omega_n}\sum_{\vec{k}} \left(c_{\vec{k}}^\dagger(i\omega_n), f_{\vec{k}}^\dagger(i\omega_n)\right) \bar{\bar{G}}^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) \begin{pmatrix} c_{\vec{k}}(-i\omega_n) \\ f_{\vec{k}}(-i\omega_n)\end{pmatrix}\right]\right]^N \qquad \text{(E.3)}$$

avec

$$\mathcal{F}_0 = \frac{r^2}{J_K} + \frac{\lambda_0}{2} + \mu\left(\frac{1}{2} + \frac{n_c}{2}\right) \tag{E.4}$$

$$\overline{\overline{G}}^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) = \begin{pmatrix} i\omega_n + \mu - \epsilon_{\vec{k}} & r \\ r & i\omega_n + \mu + \lambda_0 \end{pmatrix} \tag{E.5}$$

Laissant de coté les variables de Grassman (initialement utilisée pour introduire les champs $B_j(\tau)$), on peut ré-exprimer cette fonction de partition en terme d'opérateurs de création et d'anihilation. En effet, au point de col, le Hamiltonien effectif se diagonalise simplement, et la fonction de partition s'exprime explicitement en fonction des valeurs propres $\omega^{\pm}_{\vec{k}}$ solutions de l'équation $(\omega^{\pm}_{\vec{k}} + \mu - \epsilon_{\vec{k}})(\omega^{\pm}_{\vec{k}} + \mu + \lambda_0) = r^2$. On obtient :

$$\boxed{Z^{(N)} = \exp\{-\beta N \mathcal{F}_0\}\left[\prod_{\vec{k}}\left(1 + exp[-\beta\omega^{-}_{\vec{k}}]\right)\left(1 + exp[-\beta\omega^{+}_{\vec{k}}]\right)\right]^N} \tag{E.6}$$

E.2 Énergie libre

L'énergie libre $\mathcal{F}(T)$ par site et par couleur est donnée par : la relation $\mathcal{F}(T) = -\frac{ln\left(Z^{(N)}\right)}{\beta N \mathcal{N}}$. On trouve :

$$\mathcal{F}(T) = \mathcal{F}_0(T) - \frac{1}{\beta\mathcal{N}}\sum_{\vec{k}} ln\left[\left(1 + e^{-\beta\omega^{-}_{\vec{k}}}\right)\left(1 + e^{-\beta\omega^{+}_{\vec{k}}}\right)\right] \tag{E.7}$$

On remplace la somme sur $\vec{k}$ par une intégration pondérée par la densité d'états ρ_0, puis on effectue les changements de variables habituels, et on trouve :

$$\boxed{\mathcal{F}(T) = \mathcal{F}_0(T) - \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega\rho(\omega)\frac{ln\left(1 + e^{-\beta\omega}\right)}{\beta}} \tag{E.8}$$

Lorsque $T/\omega \to 0$, on a $\frac{ln\left(1+e^{-\beta\omega}\right)}{\beta} \approx \begin{cases} 0 & \text{pour } \omega>0 \\ -\omega & \text{pour } \omega<0 \end{cases}$. Alors

$$\mathcal{F}(T=0) = \mathcal{F}_0(T=0) + \int_{\omega_1}^{0} d\omega\omega\rho(\omega) \tag{E.9}$$

E.3 Entropie

E.3.1 Expression générale

L'entropie du système se déduit de l'énergie libre par la relation

$$S = -\frac{d\mathcal{F}}{dT} = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial T} - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial r^2}\frac{\partial r^2}{\partial T} - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \lambda_0}\frac{\partial \lambda_0}{\partial T} - \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mu}\frac{\partial \mu}{\partial T} \tag{E.10}$$

Les paramètres r, λ et μ dépendent de la température, mais on peut s'affranchir de cette dépendance implicite puisque au col, ces derniers minimisant $\mathcal{F}$, on a :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial r} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \lambda_0} = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mu} = 0 \tag{E.11}$$

Alors,

$$\boxed{S(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \left[ln\left(1 + e^{-\beta\omega}\right) + \frac{\omega}{T} n_F(\omega)\right] \rho(\omega) \qquad \text{(E.12)}}$$

E.3.2 Développement basse température

On peut développer $S(T)$ à basse température par une approche de type Sommerfeld, après avoir effectué des intégrations par parties permettant de remplacer dans l'intégrand les fonctions $ln(1 + e^{-\beta\omega})$ et $n_F(\omega)$ par leurs dérivées seconde et première, qui tendent vers des fonctions de Dirac lorsque $T \to 0$.

Nous ne nous sommes pas aventurés dans cette approche lourde en calculs, et nous nous sommes restreints à l'étude de l'ordre le plus bas en température. On peut en effet obtenir ce terme sans trop d'efforts. On a :

$$S(T) = S(T=0) + \int_0^T dT' \left[\frac{\partial S}{\partial T'} + \frac{\partial S}{\partial r^2}\frac{\partial r^2}{\partial T'} + \frac{\partial S}{\partial \lambda_0}\frac{\partial \lambda_0}{\partial T'} + \frac{\partial S}{\partial \mu}\frac{\partial \mu}{\partial T'}\right] \tag{E.13}$$

On constate alors que les dérivées partielles $\partial S/\partial r^2$, $\partial S/\partial \lambda_0$ et $\partial S/\partial \mu$ sont finies lorsque $T \to 0$. On peut s'en convaincre à partir de l'expression (E.12). De plus, les dérivées partielles $\partial r^2/\partial T$, $\partial \lambda_0/\partial T$ et $\partial \mu/\partial T$ s'annulent linéairement avec la température. Alors, en tenant compte du fait que $S(T=0) = 0$, on obtient :

$$\begin{aligned} S(T) &= \int_0^T dT' \frac{\partial S}{\partial T'} + \mathcal{O}\left(T^2\right) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\omega}{T^3}\rho(\omega)\frac{\partial n_F(\omega)}{\partial T} + \mathcal{O}\left(T^2\right) \end{aligned}$$

Puis, par un développement de Sommerfeld, on obtient :

$$\boxed{S(T) = \frac{\pi^2}{3}\rho(0)T + \mathcal{O}\left(T^2\right) \qquad \text{(E.14)}}$$

Annexe F

Transformation de Hubbard-Stratonovitch (terme RKKY)

On définit :

$$\boxed{Z_{RKKY} = Texp\left\{\frac{J^2}{N}\int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' A(\tau,\tau')A(\tau',\tau)\right\}} \qquad \text{(F.1)}$$

avec

$$A(\tau,\tau') = \sum_\sigma G_f(\tau-\tau') f_\sigma^\dagger(\tau) f_\sigma(\tau') \qquad \text{(F.2)}$$

L'action correspondant à Z_{RKKY} est quartique en opérateurs fermioniques ; nous allons voir comment il est possible de se ramener à une action quadratique en ces mêmes opérateurs, par l'introduction d'un champ auxiliaire $\eta(\tau,\tau')$. Pour cela, on définit tout d'abord la double transformée de Fourrier (sur τ et τ')

$$\begin{aligned} \tilde{A}(i\omega_n, i\omega_{n'}) &= \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{i\omega_n\tau + i\omega_{n'}\tau'} A(\tau,\tau') \\ A(\tau,\tau') &= \frac{1}{\beta^2}\sum_{i\omega_n}\sum_{i\omega_{n'}} e^{-i\omega_n\tau - i\omega_{n'}\tau'} \tilde{A}(i\omega_n, i\omega_{n'}) \end{aligned} \qquad \text{(F.3)}$$

On a alors :

$$Z_{RKKY} = Texp\left\{\frac{J^2}{N\beta^2}\sum_{i\omega_n}\sum_{i\omega_{n'}} \tilde{A}(i\omega_n, i\omega_{n'})\tilde{A}(-i\omega_{n'}, -i\omega_n)\right\} \qquad \text{(F.4)}$$

On utilise l'identité de Hubbard-Stratonovitch suivante :

$$exp\{\lambda ab\} = \frac{1}{\lambda\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\Re(z) \int_{-\infty}^{+\infty} d\Im(z) exp\left\{-\frac{|z|^2}{\lambda} + za + z^* b\right\} \qquad \text{(F.5)}$$

avec les équivalences :

$$\begin{aligned} a &\leftrightarrow (J^2/\beta)\tilde{A}(i\omega_n, i\omega_{n'}) \\ b &\leftrightarrow (J^2/\beta)\tilde{A}(-i\omega_{n'}, -i\omega_n) \\ \lambda &\leftrightarrow 1/N \\ z &\leftrightarrow \tilde{\eta}(i\omega_n, i\omega_{n'}) \end{aligned}$$

On définit la double transformée de Fourier inverse du champ $\tilde{\eta}$ par

$$\eta(\tau, \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \sum_{i\omega_{n'}} e^{-i\omega_n \tau - i\omega_{n'} \tau'} \tilde{\eta}(i\omega_n, i\omega_{n'}) \tag{F.6}$$

Alors

$$\boxed{\begin{aligned} Z_{RKKY} &= \int \mathcal{D}\eta(\tau, \tau') T exp \left\{ -N \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \eta(\tau, \tau') \eta^*(\tau, \tau') \right. \\ &+ \left. J \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' [\eta^*(\tau, \tau') + \eta(\tau', \tau)] A(\tau, \tau') \right\} \end{aligned}} \tag{F.7}$$

Annexe G

Théorème de Luttinger

G.1 Trace de la fonction de Green

La fonction de Green du modèle étudié dans la deuxième partie s'écrit sous la forme matricielle suivante :

$$\overline{\overline{G}}^{-1}(\epsilon,\omega) = \begin{pmatrix} \omega+\mu-\epsilon & r \\ r & \omega+\mu+\lambda_0-\Sigma_{loc}(\omega) \end{pmatrix} \tag{G.1}$$

Suivant la méthode développée dans les références [1, 107, 108], on remarque que

$$\overline{\overline{G}}(\epsilon,\omega) = \frac{\partial \ln \overline{\overline{G}}^{-1}(\epsilon,\omega)}{\partial\omega} + \frac{\partial\overline{\overline{\Sigma}}(\epsilon,\omega)}{\partial\omega}\overline{\overline{G}}(\epsilon,\omega) \tag{G.2}$$

Où l'on a défini :

$$\overline{\overline{\Sigma}}(\epsilon,\omega) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_{loc}(\omega) \end{pmatrix} \tag{G.3}$$

Le nombre total de quasiparticules est donné par la trace de $\overline{\overline{G}}(\epsilon,\omega)$ (c'est à dire la trace de la matrice 2×2 définie plus haut, intégrée sur les énergies ϵ et les fréquences ω). L'invariance de la trace sous changement de base implique que le nombre de quasiparticules du système est exactement égal au nombre d'électrons de la bande de conduction plus le nombre de fermions représentant les spins localisés. Le nombre total de quasiparticules par composante de spin vaut donc $n_c+1)/2$. Alors, la relation pour la fonction de Green permet d'obtenir :

$$\frac{n_c+1}{2} = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2i\pi}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon\rho_c^{(0)}(\epsilon)\frac{\partial \ln Det\overline{\overline{G}}^{-1}(\epsilon,\omega)}{\partial\omega} + \frac{\partial\Sigma_{loc}(\omega)}{\partial\omega}G_f(\omega)\right]e^{i\omega 0^+} \tag{G.4}$$

Où G_f est la fonction de Green locale des fermions f, définie un peu plus tôt. On note que dans le deuxième terme de l'expression précédente, la sommation sur la densité spectrale $\rho_c^{(0)}(\epsilon)$ a été effectuée, en utilisant le caractère local de la self-énergie Σ_{loc}.

G.2 Fonctionnelle de Luttinger-Ward

La principale hypothèse permettant la dérivation du théorème de Luttinger est l'existence de la fonctionnelle de Luttinger-Ward $\Phi_{LW}([G_f])$, invariante sous transformation $G_f(\omega) \to G_f(\omega+\nu)$, et telle que

$$\Sigma_{loc}(t) = \frac{\delta \Phi_{LW}([G_f])}{\delta G_f(-t)} \tag{G.5}$$

Pour le modèle précis que nous étudions, cette fonctionnelle peut être explicitée :

$$\Phi_{LW}([G_f]) = J^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt G_f^2(t) G_f^2(-t) \tag{G.6}$$

L'invariance de $\Phi_{LW}([G_f])$ sous translation des fréquences implique la relation :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\partial \Sigma_{loc}(\omega)}{\partial \omega} G_f(\omega) = 0 \tag{G.7}$$

G.3 Calcul du déphasage

Le nombre total de quasiparticules est donc simplement donné par :

$$\frac{n_c+1}{2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \rho_c^{(0)}(\epsilon) \frac{\partial \ln Det \overline{\overline{G}}^{-1}(\epsilon,\omega)}{\partial \omega} e^{i\omega 0^+} \tag{G.8}$$

$\overline{\overline{G}}(\epsilon,\omega)$ n'est pas analytique sur l'ensemble du plan complexe, mais on introduit la fonction de Green retardée $\overline{\overline{G}}_R(\epsilon,\omega)$, égale à $\overline{\overline{G}}(\epsilon,\omega)$ pour $\omega < 0$, et à $\overline{\overline{G}}^{\star}(\epsilon,\omega)$ pour $\omega > 0$. Alors,

$$\begin{aligned} \frac{n_c+1}{2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \rho_c^{(0)}(\epsilon) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2i\pi} \frac{\partial \ln Det \overline{\overline{G}}_R^{-1}(\epsilon,\omega)}{\partial \omega} e^{i\omega 0^+} \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \rho_c^{(0)}(\epsilon) \int_{-\infty}^{0} \frac{d\omega}{2i\pi} \frac{\partial}{\partial \omega} \ln \left(\frac{Det \overline{\overline{G}}_R^{\star -1}(\epsilon,\omega)}{Det \overline{\overline{G}}_R^{-1}(\epsilon,\omega)} \right) \end{aligned} \tag{G.9}$$

Le premier terme du membre de droite est nul, car, à ϵ fixé, $\overline{\overline{G}}_R(\epsilon,\omega)$ est analytique et ne contient pas de zéro dans le demi-plan complexe $\mathcal{I}m(\omega) > 0$. Le nombre total de quasiparticules se simplifie alors :

$$\frac{n_c+1}{2} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \rho_c^{(0)}(\epsilon) \frac{\Delta\phi(\epsilon)}{\pi} \tag{G.10}$$

Où $\Delta\phi(\epsilon)$ est le déphasage de $Det \overline{\overline{G}}^{-1}(\epsilon,\omega) = (\omega+\mu-\epsilon)(\omega+\mu+\lambda_0-\Sigma_{loc}(\omega)) - r^2$ lorsque ω varie entre $-\infty$ et 0, et vaut $\Delta\phi(\epsilon) = \pi\theta[(\mu-\epsilon)(\mu+\lambda_0-\Sigma_{loc}(0)) - r^2]$ (où

θ représente la fonction de Heaviside). Alors, en supposant $\mu + \lambda_0 - \Sigma_{loc}(0) < 0$ (i.e. que $n_c < 1$, ce qui n'est pas restrictif par symétrie particule-trou), on obtient la relation générale :

$$\boxed{\mu - \frac{r^2}{\mu + \lambda_0 - \Sigma_{loc}(0)} = \mu_0(n_c + 1) \qquad \text{(G.11)}}$$

Annexe H

Echelle de cohérence près du point critique

Pour le modèle étudié dans la deuxième partie, l'approche du point critique quantique est caractérisée par :

$$\boxed{\frac{1}{J_K} - \frac{1}{J_K^c} = \int_{-\infty+i0^+}^{0+i0^+} \frac{d\omega}{\pi} \mathcal{I}m \left[\mathcal{G}_f(\omega) G_c^0 \left(\mu + \omega - r^2 \mathcal{G}_f(\omega) \right) - G_S(\omega) G_c^0 \left(\mu + \omega \right) \right] \qquad \text{(H.1)}}$$

Tout d'abord, on décompose le domaine d'intégration en deux intervalles $[-\infty, -\omega^\star]$ et $[-\omega^\star, 0]$. Dans la limite $\omega^\star << J << D$, on trouve :

$$\begin{aligned} \frac{1}{J_K} - \frac{1}{J_K^c} &= -\mathcal{I}m \left[\frac{\omega^\star \Delta\mu}{\pi r^2} G_c^0(\mu + \Delta\mu) - (1+i) \frac{2}{\pi} \left(\frac{\pi}{4} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{\omega^\star}{J}} G_c^0(\mu) \right] \\ &+ \int_{-\infty+i0^+}^{-\omega^\star+i0^+} \frac{d\omega}{\pi} \mathcal{I}m \left[G_S(\omega) \left(G_c^0 \left(\mu + \omega - r^2 G_S(\omega) \right) - G_c^0(\mu + \omega) \right) \right] \end{aligned} \qquad \text{(H.2)}$$

Lorsque ω varie de $-\infty + i0^+$ à $0 + i0^+$, $\mu + \omega$ et $-r^2 G_S(\omega)$ appartiennent tous deux au demi-plan complexe de partie imaginaire positive. G_c^0 étant analytique sur ce demi-plan, on peut introduire le développement de Taylor suivant :

$$G_c^0 \left(\mu + \omega - r^2 G_S(\omega) \right) = \sum_{p=0}^{+\infty} \frac{G_c^{0(p)} \left(\mu + \omega \right)}{p!} \left(-r^2 G_S(\omega) \right)^p \qquad \text{(H.3)}$$

Le deuxième membre du développement de $1/J_K - 1/J_K^c$ nécessite le calcul d'intégrales du type :

$$I_p = \int_{-\infty}^{-\omega^\star} d\omega G_c^{0(p)}(\mu+\omega)[G_S(\omega)]^{p+1}$$

$$\begin{aligned} &\approx \underbrace{\int_{-\infty}^{-J} d\omega \frac{G_c^{0(p)}(\mu+\omega)}{\omega^{p+1}}}_{I_p^J} + \underbrace{-\int_{-J}^{-\omega^\star} d\omega G_c^{0(p)}(\mu+\omega)\left[\left(\frac{\pi}{4}\right)^{1/4}\frac{-1-i}{\sqrt{J|\omega|}}\right]^{p+1}}_{I_p^\star} \\ &\approx \end{aligned} \tag{H.4}$$

On trouve, dans la limite $\omega^\star << J << D$:

$$\begin{aligned} I_{p>1}^\star &= -\left[1+\mathcal{O}\left(\frac{J}{D}\right)+\mathcal{O}\left(\frac{\omega^\star}{J}\right)\right] G_c^{0(p)}(\mu)\frac{2\omega^\star}{p-1}\left[\left(\frac{\pi}{4}\right)^{1/4}\frac{(-1-i)}{\sqrt{J\omega^\star}}\right]^{p+1} \\ I_1^\star &= iG_c^{0(1)}(\mu)\frac{\sqrt{\pi}}{J}\ln\frac{\omega^\star}{J} + i\sqrt{\pi}G_c^{0(2)}(\mu) + \mathcal{O}\left(\frac{\omega^\star}{J}\right) \end{aligned} \tag{H.5}$$

I_p^J ne dépend que de J et de la densité d'états libre. Dans la limite $J/D \to 0$, on trouve que ce terme diverge comme

$$I_p^J = -\frac{G_c^{0(p)}(\mu)}{p}\frac{1}{(-J)^p} + \cdots \tag{H.6}$$

On trouve alors :

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{1}{J_K} - \frac{1}{J_K^c} &\approx -\mathcal{R}eG_c^{0(1)}(\mu)\frac{r^2}{J\sqrt{\pi}}\ln\frac{\omega^\star}{J} - \mathcal{R}eG_c^{0(2)}(\mu)\frac{r^2}{\sqrt{\pi}} + \rho_c^0(n_c)\frac{r^2}{J} \\ &+ \Delta\mu\rho_c^0(n_c+1)\frac{\omega^\star}{r^2} + (4\pi)^{1/4}\left[\rho_c^0(n_c) - \frac{\mathcal{R}e[G_c^0(\mu)]}{\pi}\right]\sqrt{\frac{\omega^\star}{J}} \\ &+ (4\pi)^{1/4}\sum_{p=2}^{+\infty}\frac{\mathcal{I}m\left[(1+i)^{p+1}G_c^{0(p)}(\mu)\right]}{p!(p-1)}\left(\left(\frac{\pi}{4}\right)^{1/4}\frac{r^2}{\sqrt{J\omega^\star}}\right)^p\sqrt{\frac{\omega^\star}{J}} \\ &+ \mathcal{O}\left(\frac{\omega^\star}{J}\right) \end{aligned}} \tag{H.7}$$

La relation (12.19) permet d'exprimer r en fonction de $\omega^\star$ à l'approche du point critique quantique. On en déduit

$$\boxed{\frac{1}{J_K} - \frac{1}{J_K^c} \approx -\mathcal{R}eG_c^{0(1)}(\mu)\frac{(\Delta\mu)^2\rho_c^0(n_c+1)}{\pi^{1/12}\sqrt{2}}\sqrt{\frac{\omega^\star}{J}}\ln\frac{\omega^\star}{J} + \mathcal{O}\left(\sqrt{\frac{\omega^\star}{J}}\right)} \tag{H.8}$$

Bibliographie

[1] **Abrikosov A.A., L.P. Gorkov and I.E. Dzyaloshinski**, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1963 ; Pergamon, Elmsford, N.Y., 1965).

[2] **Aeppli G. and Z. Fisk**, *Comments Condens. Matter Phys.* **16**, p. 155, (1992).

[3] **Affledk I. and A.W.W. Ludwig**, *Nucl. Phys. B* **352**, p. 849, (1991).

[4] **Affledk I. and A.W.W. Ludwig**, *Nucl. Phys. B* **360**, p. 641, (1991).

[5] **Amato A.**, *Rev. Mod. Phys.* **69**, p. 1119, (1997).

[6] **Anderson P.W.**, *Phys. Rev.* **124**, p. 41, (1961).

[7] **Anderson P.W.**, *Phys. Rev.* **164**, p. 352, (1967).

[8] **Anderson P.W.**, *J. Phys. C* **3**, p. 2436, (1970).

[9] **Anderson P.W.**, *Valence Fluctuations in Solids*, edited by L.M. Falicov, W, Hanke, and M.B. Maple (North-Holland, Amsterdam, 1981), p. 53.

[10] **Anderson P.W. and G. Yuval**, *Phys. Rev. Lett.* **23**, p. 89, (1969).

[11] **Anderson P.W., G. Yuval and D.R. Hammann**, *Phys. Rev. B* **1**, p. 4464, (1970).

[12] **Andraka B. and A.M. Tsvelik**, *Phys. Rev. Lett.* **67**, p. 2886, (1991).

[13] **Andrei N.**, *Phys. Rev. Lett.* **45**, p. 379, (1979).

[14] **Andrei N. and P. Coleman**, *Phys. Rev. Lett.* **62**, p. 595, (1989).

[15] **Andrei N. and C. Destri**, *Phys. Rev. Lett.* **52**, p. 364, (1984).

[16] **Anisimov V.I.** *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **83**, p. 364, (1999).

[17] **Aronson M.C.** *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **63**, p. 2311, (1989).

[18] **Auerbach A. and K. Levin**, *Phys. Rev. Lett.* **57**, p. 877, (1986).

[19] **Batlogg B.** *et al.*, *J. Magn. Magn. Mat.* **63-64**, p. 441, (1987).

[20] **Belavin A.A., A.M. Polyakov and A.B. Zamolodchikov**, *Nucl. Phys. B* **241**, p. 333, (1984).

[21] **Bernhard B.H., C. Lacroix, J.R. Iglesias and B. Coqblin**, *Phys. Rev. B* **61** p. 441, (2000).

[22] **Bickers N.E.**, *Rev. Mod. Phys.* **59**, p. 845, (1987).

[23] **Brandt N.B. and V.V. Moshchalkov**, *Adv. Phys.* **33**, p. 373, (1984).

[24] **Bray A.J. and M.A. Moore**, *J. Phys. C* **13**, p. L655, (1980).

[25] **Brinkman W.F. and T.M. Rice**, *Phys. Rev. B* **2**, p. 4302, (1970).

[26] **Bulla R., T.A. Costi and D. Vollhardt**, cond-mat 0012329.

[27] **Burdin S., A. Georges and D.R. Grempel**, *Phys. Rev. Lett.* **85**, p. 1048, (2000).

[28] **Burdin S., D.R. Grempel and A. Georges**, soumis à *Europhysics Letters*. cond-mat/0107288.

[29] **Chitra R.**, communication privée.

[30] **Chitra R. and G. Kotliar**, *Phys. Rev. Lett.* **83**, p. 2386, (1999).

[31] **Coleman P.**, *Phys. Rev. B* **28**, p. 5255, (1983).

[32] **Coleman P.**, *Phys. Rev. B* **29**, p. 3035, (1984).

[33] **Coleman P.**, *Phys. Rev. B* **35**, p. 5072, (1987).

[34] **Coleman P.** *et al.*, cond-mat/0105006.

[35] **Coleman P., C. Pépin, A.M. Tsvelik**, *Nuclear Physics B* **586**, p. 641, (2000).

[36] **Coqblin B., M.A. Gusmão, J.R. Iglesias, C. Lacroix, A.R. Ruppenthal, Acirete S. da R. Simõ es**, *Physica B* **281& 282**, p. 50, (2000).

[37] **Coqblin B., M.A. Gusmão, J.R. Iglesias, A.R. Ruppenthal, and C. Lacroix**, Competition between magnetic order and Kondo effect in cerium compounds (2000), à paraître ?

[38] **Coqblin B. and J.R. Schrieffer**, *Phys. Rev.* **185**, p. 847, (1969).

[39] **Costi T.**, à paraître.

[40] **Costi T.**, communication privée.

[41] **Cox D.L.**, *Phys. Rev. Lett.* **59**, p. 1240, (1987).

[42] **Cox D.L. and N. Grewe**, *Z. Phys. B* **71**, p. 321, (1988).

[43] **Cox D.L. and A. Zawadowski**, *Adv. Phys.* **47**, p.853, (1998).

[44] **Dakin S., G. Rapson and B.D. Rainford**, *J. Magn. Magn. Matter.* **108**, p. 117, (1992).

[45] **Degiorgi L.**, *Rev. Mod. Phys.* **71**, p. 687, (1999).

[46] **Degiorgi L.** *et al.*, *Z. Phys. B* **102**, p. 367, (1997).

[47] **Doniach S.**, *Physica B* **91**, p. 231, (1977).

[48] **Dzyaloshinski I.**, *J. Phys. Chem. Solids* **4**, p. 241, (1958).

[49] **Evans S.M.M.**, *J. Phys. : Condens. Matter* **3**, p. 8441, (1991).

[50] **Eyert V.** *et al.*, *Europhys. Lett.* **46**, p. 762, (1999).

[51] **Fazekas P. and E. Muller-Hartmann**, *Z. Phys. B* **85**, p. 285, (1991).

[52] **Fischer K.H. and J.A. Hertz**, *Spin glasses* (Cambridge University Press, Cambridge, 19991).

[53] **Fisk Z.** *et al.*, **Science 239**, p. 33, (1988).

[54] **Flouquet J., S. Kambe, L.P. Regnault, P. Haen, J.P. Brison, F. Lapierre and P. Lejay**, *Physica B* **215**, p. 77, (1995).

[55] **Friedel J.**, *Phil. Mag.* **43**, p. 153, (1952).

[56] **Friedel J.**, *Can. J. Phys.* **34**, p. 1190, (1956).

[57] **Frölich H. and F.R.N. Nabarro**, *Proc. R. Soc. A* **175**, p. 382, (1940).

[58] **Fujiwara N., H. Yasuoka and Y. Ueda**, *Phys. Rev. B* **57**, p. 3539, (1998).

[59] **Fujiwara N., H. Yasuoka and Y. Ueda**, *Phys. Rev. B* **59**, p. 6294, (1999).

[60] **Fulde P.**, *J. Phys. F* **18**, p. 601, (1988).

[61] **Gan J., P. Coleman and N. Andrei**, *Phys. Rev. Lett.* **68**, p. 3476, (1992).

[62] **Garnier M.** *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, p. 4127, (1997).

[63] **Geibel C.** *et al.*, *Z. Phys. B* **84**, p. 1, (1991).

[64] **Geibel C.** *et al.*, *Z. Phys. B* **83**, p. 305, (1991).

[65] **Georges A., G. Kotliar, W. Krauth and M.J. Rozenberg**, *Rev. Mod. Phys.* **68**, p. 13, (1996).

[66] **Georges A., O. Parcollet and S. Sachdev**, *Phys. Rev. Lett.* **85**, p. 840, (2000).

[67] **Georges A., O. Parcollet and S. Sachdev**, *Phys. Rev. B* **63**, p. 134406, (2001).

[68] **Glazman L.I. and MÉ. Raikh**, *JETP Lett.* **47**, p. 452, (1988).

[69] **Goldhaber-Gordon D.** *et al.*, *Nature* **391**, p. 156, (1998).

[70] **Grempel D.R. and M.J. Rozenberg**, *Phys. Rev. Lett.* **80**, p. 389, (1998).

[71] **Grempel D.R. and M.J. Rozenberg**, *Phys. Rev. B* **60**, p. 4702, (1999).

[72] **Grilli M.** *et al.*, *Phys. Rev. B* **42**, p. 329, (1990).

[73] **Held K.** *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **85**, p. 373, (2000).

[74] **Hewson A.C.**, *The Kondo problem to heavy fermions*, Cambridge University Press, 1993.

[75] **Hirsch J.E. and R.M. Fye**, *Phys. Rev. Lett.* **56**, p. 2521, (1989).

[76] **Iglesias J.R., C. Lacroix and B. Coqblin**, *Phys. Rev. B* **56**, p. 11820, (1997).

[77] **Jarrell M.**, *Phys. Rev. B* **51**, p. 7429, (1995).

[78] **Jarrell M. and J.E. Gubernatis**, *Physics Reports* **269**, p. 133, (1996).

[79] **Jarell M., H. Akhlaghpour and Th. Pruschke**, *Phys. Rev. Lett.* **70**, p. 1670, (1993).

[80] **Jerez A., N. Andrei, G. Zaránd**, *Phys. Rev. B* **58**, p.3814, (1998).

[81] **Jerez A.**, leçon particulière.

[82] **Johnston D.C., C.A. Swenson and S. Kondo** *Phys. Rev. B* **59**, p. 2627, (1999).

[83] **Joyce J.J., A.J. Arko, J. Lawrence, P.C. Canfield, Z. Fisk, R.J. Bartlett and J.D. Thompson**, *Phys. Rev. Lett.* **68**, p. 236, (1992).

[84] **Jullien R., P. Pfeuty, A.K. Bhattacharjee and B. Coqblin**, *J. Appl. Phys.* **50**, p. 7555, (1979).

[85] **Kajueter H. and G. Kotliar**, *Phys. Rev. Lett.* **77**, p. 131, (1996).

[86] **Kaps H.** *et al.*, *Proceedings of the HFM-Conference. June 2000, Waterloo, Ontario, Canada*. A paraître dans *Can. J. Phys.*, (2001).

[87] **Kasuya T.**, *Prog. Theor. Phys.* **16**, p. 45, (1956).

[88] **Kawakami K., Y. Sakai and N. Tsuda**, *J. Phys. Soc. Jpn.* **55**, p. 3174, (1986).

[89] **Kiselev M.N. and R. Oppermann**, *JETP Lett.* **71**, p. 250, (2000).

[90] **Kiselev M.N., K. Kikoin and R. Oppermann**, cond-mat/0106591.

[91] **Koga M. and D.L. Cox**, *Phys. Rev. Lett.* **83**, p. 2421, (1999).

[92] **Kondo J.**, *Prog. Theor. Phys.* **32**, p. 37, (1964).

[93] **Kondo S.** *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **78**, p. 3729, (1997).

[94] **Kouwenhoven L. and L. Glazman**, Revival of the Kondo effect, *Physics world*, january 2001.

[95] **Kusunose H., S. Yotsuhashi and K. Miyake**, *Phys. Rev. B* **62**, p. 4403, (2000).

[96] **Lacroix C.**, *Solid. Stat. Commun.* **54**, p. 991, (1985).

[97] **Lacroix C.**, *Proceedings of the HFM-Conference. June 2000, Waterloo, Ontario, Canada*. A paraitre dans *Can. J. Phys.*, (2001). cond-mat/0107574.

[98] **Lacroix C. and M. Cyrot**, *Phys. Rev. B* **20**, p. 1969, (1979).

[99] **Lavagna M., A.J. Millis and P.A. Lee**, *Phys. Rev. Lett.* **58**, p. 266, (1987).

[100] **Lawrence J.M.**, communication privée.

[101] **Lawrence J.M., J.D. Thompson and Y.Y. Chen**, *Phys. Rev. Lett.* **54**, p. 2537, (1985).

[102] **Lawrence J.M.** *et al.*, *Phys.Rev. Lett.* **54**, p. 2537, (1985).

[103] **Lawrence J.M.** *et al.*, *Phys. Rev. B* **63**, p. 054427, (2001).

[104] **Lee P.A.** *et al.*, *Comments Condens. Matter Phys.* **12**, p. 99, (1986).

[105] **Lee S.-H.** *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **86**, p. 5604, (2001).

[106] **Von Lohneysen H.** *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **72**, p. 3262, (1994).

[107] **Luttinger J.M.**, *Phys. Rev.* **119**, p. 1153, (1960).

[108] **Luttinger J.M. and J.C. Ward**, *Phys. Rev.* **118**, p. 1417, (1960).

[109] **Mallik R.** *et al.*, *Phys. Rev. B* **55**, p. 3627, (1997).

[110] **Malterre D., M. Grioni and Y. Baer**, *Advances in Physics* **45**, p. 299, (1996).

[111] **Manoharan H.C., C.P. Lutz and D.M. Eigler**, *Nature* **403**, p. 512, (2000).

[112] **Mahan G.D.**, *Many-particle Physics*, Plenum Press, New-York (1990).

[113] **Maple M.B.** *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **56**, p. 185, (1986).

[114] **Maple M.B.** *et al.*, *J. Low Temp. Phys.* **95**, p. 225, (1994).

[115] **Maple M.B.** *et al.*, *J. Low Temp. Phys.* **99**, p. 223, (1995).

[116] **Matsuno J., A. Fujimori and L.F. Mattheiss** *Phys. Rev. B* **60**, p. 1607, (1999).

[117] **McElfresh M.W.** *et al.*, *Phys. Rev. B* **48**, p. 10395, (1993).

[118] **Meyer D. and W. Nolting** *Phys. Rev. B* **61**, p. 13465, (2000).

[119] **Meyer D. and W. Nolting**, *Phys. Rev. B* **62**, p. 5657, (2000).

[120] **Millis A.J.**, *Phys. Rev. B* **48**, p. 7183, (1993).

[121] **Millis A.J. and P. A. Lee**, *Phys. Rev. B* **35**, p. 3394, (1987).

[122] Des expériences sur ce système sont en cours de réalisation. **Murayama**, communication privée.

[123] **Newns D.M. and N. Read**, *Advances in Physics* **36**, p. 799, (1987).

[124] **Ng T.K. and P.A. Lee**, *Phys. Rev. Lett.* **61**, p. 1768, (1988).

[125] **Nozières P.**, *J. Low Temp. Phys.* **17**, p. 31, (1974).

[126] **Nozières P.**, *Ann. Phys. Fr.* **10**, 19, (1985).

[127] **Nozières P.**, *Eur. Phys. J. B* **6**, p. 447, (1998).

[128] **Nozières P.**, *Liquides de Fermi fortement corrélés : supraconductivité et transition métal-isolant*, cours du Collège de France, (2000).

[129] **Nozières P. and A. Blandin**, *J. Phys.* (Paris) **41**, p. 193, (1980).

[130] **Ott H.R. and Z. Fisk**, *Handbook on the Physics and Chemistry of the Actinides*, edité par A. J. Freeman and G.H. Lander (Elsevier, Amsterdam), p. 85, (1987).

[131] **Parcollet O.**, *Thèse de doctorat*, (Paris 6), (1998).

[132] **Parcollet O. and A. Georges**, *Phys. Rev. B* **59**, p. 5341, (1999).

[133] **Parcollet O., A. Georges, G. Kotliar and A. Sengupta**, *Phys. Rev. B* **58**, p. 3794, (1998).

[134] **Pépin C.**, *Thèse de doctorat*, (UJF-Grenoble 1), (1996).

[135] **Philips N.E., R.A. Fisher, J. Flouquet, A.L. Giorgi, J.A. Olsen, and G.R. Stewart**, *J. Magn. Magn. Mat.* **63-64**, p. 332, (1987).

[136] **Pistolesi F.**, communication privée.

[137] **Popov V.N. and S.A. Fedotov**, *Sov. Phys. -JETP* **67**, p. 535, (1988).

[138] **Pruschke Th., R. Bulla and M. Jarrell**, *Phys. Rev. B* **61**, p. 12799, (2000).

[139] **Ramirez A.P.** *et al.*. cond-mat/9405072.

[140] **Read N. and D.M. Newns**, *J. Phys. C* **16**, 3273, (1983).

[141] **Read N., D.M. Newns and S. Doniach**, *Phys. Rev. B* **30**, p. 3841, (1984).

[142] **Regnault L.P., W.A.C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, P. Lejay, and J. Flouquet**, *Phys. Rev. B* **38**, p. 4481, (1988).

[143] **Reuter B. and K. Muller**, *Naturwissenschaften* **54**, p. 164, (1967).

[144] **Rice T.M.**, *Phys. Scr.* **T19**, p. 246, (1987).

[145] **Rice T.M. and K. Ueda**, *Phys. Rev. Lett.* **55**, p. 995, (1985).

[146] **Rice T.M. and K. Ueda**, *Phys. Rev. B* **34**, p. 6420, (1986).

[147] **Rogers D.B., J.L. Gilson and T.E. Gier**, *Solid State Commun.* **5**, p. 263, (1967).

[148] **Rozenberg M.J.**, *Phys. Rev. B* **52**, p. 7369, (1995).

[149] **Rozenberg M.J. and D.R. Grempel**, *Phys. Rev. Lett.* **81**, p. 2550, (1998).

[150] **Rozenberg M.J., G. Kotliar and H. Kajueter**, *Phys. Rev. B* **54**, p. 8452, (1996).

[151] **Ruderman M.A. and C. Kittel**, *Phys. Rev.* **96**, p. 99, (1954).

[152] **Ruppenthal A.R., J.R. Iglesias and M.A. Gusmão**, *Phys. Rev. B* **60**, p. 7321, (1999).

[153] **Sachdev S. and J. Ye**, *Phys. Rev. Lett.* **70**, p. 3339, (1993).

[154] **Sampathkumaran E.V.**, communication privée.

[155] **Sampathkumaran E.V. and R. Mallik**, *Physica B* **223&224**, p. 316, (1996).

[156] **Schiffer P. and A.P. Ramirez**, *Comments Condens. Matter Phys.* **18**, p. 21, (1996).

[157] **Schrieffer J.R. and P.A. Wolf**, *Phys. Rev.* **149**, p. 491, (1966).

[158] **Schröder A.** *et al.*, *Nature*, **407**, p. 351, (2000).

[159] **Seaman C.L.** *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **67**, p. 2882, (1991).

[160] **Sengupta A.M.**, *Phys. Rev. B* **61**, p. 4041, (2000).

[161] **Sengupta A.M. and A. Georges**, *Phys. Rev. B* **52**, p. 10295, (1995).

[162] **Shapiro S.M., C. Stassis and G. Aeppli**, *Phys. Rev. Lett.* **62**, p. 94, (1988).

[163] **Sherrington D. and S. Kirkpatrick**, *Phys. Rev. Lett.* **35**, p. 1792, (1975).

[164] **Si Q.** *et al.*, cond-mat/0011477.

[165] **Singh D.J.** *et al.*, *Phys. Rev. B* **60**, p. 16359, (1999).

[166] **Tabata Y., D.R. Grempel, M. Ocio, T. Taniguchi and Y. Miyako**, *Phys. Rev. Lett.* **85**, p. 2589, (2000).

[167] **Tahvildar-Zadeh A.N., M. Jarrell and J.K. Freericks**, *Phys. Rev. B* **55**, p. R3332, (1997).

[168] **Tahvildar-Zadeh A.N., M. Jarrell and J.K. Freericks**, *Phys. Rev. Lett.* **80**, p. 5168, (1998).

[169] **Tahvildar-Zadeh A.N.** *et al.*, *Phys. Rev. B* **60**, p. 10782, (1999).

[170] **Theumann A., B. Coqblin, S.G. Magalhães and A.A. Schmidt**, *Phys. Rev. B* **63**, p. 054409, (2001).

[171] **Thompson J.D.** *et al.*, *Phys. Rev. B* **35**, p. 48, (1987).

[172] **Tjeng L.H.** *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **71**, p. 1419, (1993).

[173] **Tsunetsugu H., M. Sigrist and K. Ueda**, *Phys. Rev. B* **47**, p. 8345, (1993).

[174] **Tsunetsugu H., M. Sigrist, K. Ueda**, *Rev. Mod. Phys.* **69**, p. 809, (1997).

[175] **Tsvelik A.M. and P. Wiegman**, *Z. Phys.* **54**, p. 201, (1984).

[176] **Ueda Y., N. Fujiwara and H. Yasuoka** *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, p. 778, (1997).

[177] **Vidhyadhiraja N.S., A.N. Tahvildar-Zadeh, M. Jarrell and H.R. Krishnamurthy**, non publié. cond-mat/9905408.

[178] **Vollmer R.** *et al.*, *Phys. Rev. B* **61**, p. 1218, (2000).

[179] **Wiegman P.**, *JETP Letter* **31**, p. 392, (1980).

[180] **Wilson K.G.**, *Rev. Mod. Phys.* **47**, p. 773, (1975).

[181] **Yosida K.**, *Phys. Rev.* **106**, p. 893, (1957).

[182] **Yosida Y.**, *Phys. Rev.* **107**, p. 396, (1957).

[183] **Zhang F.C. and T.M. Rice**, *Phys. Rev. B* **37**, p. 3759, (1998).

[184] **Zulicke U. and A.J. Millis**, *Phys. Rev. B* **51**, p. 9871, (1996).

[185] *J. Phys. Condens. Matter* **8**, (1996), édité par **P. Coleman, B. Maple, et A. Millis**.

[186] Voir, par exemple, *Conference on Non-Fermi liquid behavior in Metals*, *J. Phys. Cond. Mat* **8** (1996).

[187] Pour un aperçu récent sur les matériaux à haute T_c, voir, par exemple, proceedings of the *International conference on materials and mechanisms of superconductivity high temperature superconductors VI*, *Physica C* **341-348**, (2000).

Résumé

Cette thèse est organisée autour d'une problématique centrale : l'étude théorique de l'effet Kondo dans les fermions lourds, lorsque les ions magnétiques sont en forte concentration.

Dans une première partie, l'influence sur le réseau Kondo, d'une variation du nombre d'électrons de conduction est étudiée à basse température (problème de l'épuisement). Cet effet peut s'observer expérimentalement sur des composés de Cérium ou d'Uranium, dont la température de cohérence peut être bien plus petite que la température de Kondo à une impureté. Par des approches analytiques et numériques, le problème est résolu dans la limite "grand-N", où N est le nombre de composantes du spin effectif. Alors que les modèles à une seule impureté sont caractérisés à basse température par une unique échelle d'énergie T_K, cette thèse confirme l'existence, pour le réseau Kondo, d'une deuxième échelle $T^\star$, caractéristique de l'apparition du comportement de liquide de Fermi, et définie à partir des propriétés physiques du système (thermodynamiques, magnétiques et de transport).

Dans la deuxième partie, les effets du désordre et de la frustration magnétique du réseau Kondo sont étudiés analytiquement, dans le formalisme de la théorie du champ dynamique moyen, en considérant la limite "grand-N". Un point critique quantique (QCP) est obtenu, entre un régime de liquide de Fermi lourd et un régime de liquide de spin. Les propriétés physiques du système sont calculées dans la phase Kondo, qui présente une très forte diminution de $T^\star$ et de T_K à l'approche du QCP. Ce résultat est à corréler avec la forte masse effective observée expérimentalement pour le composé LiV_2O_4.

Enfin, la troisième partie présente une étude préliminaire et les étapes principales du calcul permettant de déterminer numériquement le diagramme de phase magnétique du modèle d'Anderson périodique, par la méthode du champ dynamique moyen.

Abstract

This thesis revolves around a main subject : the theoretical study of the Kondo effect in heavy fermions when the magnetic impurity concentration is high.

In the first part, the influence of the variation of the concentration of conducting electrons on the Kondo lattice is studied at low temperature (exhaustion problem). This effect can be observed experimentaly in some Cerium and Uranium compounds, whose coherence temperature can be considerably small compared to the predictions of single impurity models. The study is made both analyticaly and numericaly in the "large-N" limit, where N is the number of spin components. Whereas the single impurity models are caracterised at low temperature by a single energy scale, T_K, this thesis confirms the existence for the Kondo lattice of a second scale $T^\star$, caracterising the appearance of the Fermi liquid behavior.

In the second part, the effects of disorder and magnetic frustration are studied analyticaly, within the dynamical mean field theory formalism, in the "large-N" limit. A quantum critical point (QCP) is obtained between a heavy Fermi liquid regime and a spin liquid regime. The physical properties of the system are computed in the Kondo phase. In particular, a strong decrease of $T^\star$ and T_K is obtained in the vicinity of the QCP. This result is correlated with the large effective mass that has been experimentaly mesured for the compound LiV_2O_4.

Finaly, the third part presents a preliminary study and the outline of the computation procedure leading to the numerical determination of the magnetic phase diagram of the periodic Anderson Model, using the dynamical mean field theory method.