

THÈSE

présentée à

**L'UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER
GRENOBLE 1**

par

Thierry CHAMPEL

pour obtenir le grade de

DOCTEUR

Discipline : **Physique**

**Oscillations quantiques magnétiques dans les systèmes
de basse dimensionnalité**

**Étude de la symétrie de l'état supraconducteur dans le
composé UPt_3**

Soutenue publiquement le 29 octobre 2003

Jury :	Prof. Laurent P. LEVY	président
	Prof. James SAULS	rapporteur
	Prof. Peter WÖLFLE	rapporteur
	Dr. Jean-Pascal BRISON	examineur
	Prof. Gilles MONTAMBAUX	examineur
	Prof. Vladimir MINEEV	directeur de thèse

Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé au sein du Groupe Théorie du Service de Physique Statistique, Magnétisme et Supraconductivité au Département de Recherche Fondamentale sur la Matière Condensée du CEA-Grenoble. Je remercie Jacques Flouquet de m'avoir accueilli dans le service dont il était le directeur lors de mes débuts de thèse, et de m'avoir donné l'opportunité d'effectuer une thèse théorique.

Lors de ma fin de thèse, j'ai très apprécié de trouver un interlocuteur spécialiste des oscillations quantiques magnétiques en la personne du nouveau directeur du service, Louis Jansen. L'intérêt qu'il a montré sur mon sujet d'étude et les quelques discussions de physique que nous avons échangé m'ont été très agréables.

Je tiens à remercier très chaleureusement mon directeur de thèse Vladimir Mineev, qui s'est montré d'une grande disponibilité et d'une grande écoute tout au long de cette thèse. Je salue sa patience et sa gentillesse malgré mes nombreuses intrusions dans son bureau à tout moment de la journée. J'ai apprécié les très nombreuses discussions sur la physique que nous avons eues, ainsi que la pertinence de ses réponses à mes questions diverses. Je lui suis très reconnaissant pour m'avoir donné l'opportunité de poursuivre librement une partie de ma thèse suivant mes propres aspirations et motivations de sujet.

Merci aux professeurs James Sauls de l'université de Northwestern (Illinois) et Peter Wölfe de l'université de Karlsruhe de m'avoir fait l'honneur de faire partie de mon jury de thèse et d'être rapporteurs de mon travail. Je remercie également Jean-Pascal Brison (CRTBT), Laurent Lévy de l'université Joseph Fourier, et Gilles Montambaux du laboratoire de Physique des Solides de l'université Paris-Sud d'avoir bien voulu participer au jury.

Je remercie les nombreuses personnes dans le service avec lesquelles j'ai pu très souvent parler de physique et d'autres sujets divers. Je pense notam-

ment à Stephan Roche, Mireille Lavagna, et Jacques Villain. Ils se sont tous montrés toujours très disponibles et à l'écoute de mes difficultés ou aspirations du moment.

J'ai bénéficié également de très nombreuses discussions intéressantes avec des expérimentateurs (anciens) thésards ou chercheurs confirmés comme Pierre Rodière et Andrew Huxley sur la partie concernant la supraconductivité de UPt_3 . Dialoguer avec eux a certainement constitué un plus dans l'aboutissement de mon étude sur ce sujet.

J'adresse un grand merci à Manuel Houzet en qui j'ai trouvé un collègue et ami, et avec qui j'ai pu échanger de nombreuses réflexions sur la physique et la vie courante. Je lui suis reconnaissant pour son écoute et l'intérêt qu'il a porté sur mon travail. Je remercie aussi Arnaud Buhot chez qui j'ai pu trouver conseil et qui s'est montré très disponible lors de son séjour dans la salle visiteur en attente de la réfection de son bureau.

J'ai très apprécié les moments de repas quotidiens passés toujours en compagnie de la même troupe menée par Michel Bonnet et Jacques Schweizer. Les repas étaient souvent agrémentés de discussions portant sur l'actualité, m'extirpant des calculs et réflexions me torturant l'esprit.

J'ai apprécié la présence et la convivialité de mes compagnons de bureau thésards ou stagiaires DEA qui se sont succédés au cours des trois années de thèse avec dans l'ordre historique : Christelle, Sébastien, Damien, Pavel, Frédéric et Vu Hung. Les nombreuses discussions avec Vu Hung ont sans aucun doute contribué à une meilleure compréhension personnelle de certains aspects techniques ou fondamentaux de la physique en général.

Je remercie chaleureusement Marielle Perrier et Nicole Bertrand souvent mises à contribution pour expliquer et réaliser les différentes démarches administratives.

Enfin, j'ai une pensée particulière pour ma femme, qui m'a toujours encouragé et soutenu dans mon travail, et qui par conséquent a beaucoup contribué à l'aboutissement de ce manuscrit.

Table des matières

Introduction	9
I - OSCILLATIONS QUANTIQUES MAGNÉTIQUES DANS LES SYSTÈMES DE BASSE DIMENSIONNALITÉ	17
1 Les oscillations quantiques magnétiques	19
1.1 Niveaux de Landau	19
1.2 Densité d'états	22
1.3 Surface de Fermi arbitraire: relation d'Onsager	26
1.4 Effet de Haas-van Alphen dans les métaux 3D: formule de Lifshitz-Kosevich	27
1.5 Effet Shubnikov-de Haas dans les métaux 3D	31
1.6 Effet de Haas-van Alphen dans les métaux 2D	31
1.6.1 Dérivation de Peierls	31
1.6.2 Formule de Shoenberg	32
1.7 Objectif de cette première partie	36
2 Aspects thermodynamiques	37
2.1 Modèle quasi-2D	37
2.2 Densité d'états quasi-2D	38
2.3 Choix de l'ensemble statistique	42
2.4 Calcul du grand potentiel thermodynamique	45
2.5 Oscillations du potentiel chimique	45
3 Effet de Haas-van Alphen dans l'état normal	49
3.1 Oscillations d'aimantation à μ fixé	49
3.2 Effets des oscillations du potentiel chimique	52

3.2.1	Métaux comprenant une unique bande	52
3.2.2	Métaux multibandes : combinaison de fréquences	59
4	Effet de Haas-van Alphen dans l'état mixte supraconducteur	69
4.1	Rétrospective	69
4.2	Énergie libre	73
4.3	Aimantation	76
5	Oscillations quantiques magnétiques de la conductivité longitudinale σ_{zz}	79
5.1	Problématique	79
5.2	La conductivité longitudinale σ_{zz}	82
5.3	σ_{zz} dans la limite 2D	86
5.4	La self-énergie due aux impuretés	91
5.5	Discussion	95
II	ÉTUDE DE LA SYMÉTRIE DE L'ÉTAT SUPRACONDUCTEUR DANS LE COMPOSÉ UPt₃	105
6	Le supraconducteur UPt₃	107
6.1	Le composé	107
6.1.1	Structure cristalline	107
6.1.2	Propriétés électroniques	107
6.1.3	Propriétés magnétiques	108
6.2	Diagramme de phase supraconducteur	109
6.3	Les différentes théories de l'état supraconducteur dans UPt ₃ .	110
6.3.1	Partie de spin	112
6.3.2	Partie orbitale	114
6.4	Objectif de cette deuxième partie	121
7	Réseau de vortex	123
7.1	L'expérience	123
7.2	Les sources d'anisotropie	126
7.3	Électrodynamique locale de London	131
7.4	Premières corrections non locales	136

8 Effet des termes de mélange	139
8.1 Au voisinage de la transition A-B	139
8.2 Effet des termes de mélange : un modèle effectif	141
8.3 Réseau de vortex au voisinage de la transition A-B	145
9 Étude de l'effet des défauts sur la pente du second champ critique	149
9.1 Problématique	149
9.2 Équations générales pour le second champ critique	152
9.3 Dépendance pour le modèle E_{1g}	157
9.4 Dépendance pour le modèle E_{2u}	160
Conclusion générale	165
A Formule sommatoire de Poisson	169
B Calcul des coefficients α et β	171
B.1 Calcul de α	171
B.2 Calcul de β	176
C Le modèle quasi-2D	179
C.1 Hamiltonien	179
C.2 Fonction de Green	180
D Calcul de σ_{zz}	183
D.1 Principe du calcul	183
D.2 Fonction de Green et courant	184
D.3 Courant diamagnétique	185
D.4 Courant paramagnétique	186
D.5 Conductivité statique	188
E Supraconductivité non conventionnelle	189
E.1 Terminologie	189
E.2 Paramètre d'ordre	190
E.3 Traits Caractéristiques	192
Liste de publications	195
Bibliographie	197

Introduction

Oscillations quantiques magnétiques dans les systèmes de basse dimensionnalité

Les oscillations quantiques magnétiques, dont il est question dans cette première partie de thèse, sont les oscillations des différentes propriétés thermodynamiques et de transport des métaux en réponse aux variations d'un champ magnétique intense. Ces oscillations trouvent leur origine dans la quantification du spectre électronique en niveaux de Landau, qui conduit aux oscillations de la densité d'état au niveau de Fermi ε_F .

Les oscillations de l'aimantation (effet de Haas-van Alphen, du nom de leurs deux découvreurs en 1930) et de la magnétorésistance (effet Shubnikov-de Haas, observé également pour la première fois en 1930) sont donc essentiellement de nature quantique. Pour observer ces oscillations, le système doit être à basse température, et pratiquement absent de défauts (sinon la diffusion des électrons détruit la nature discrète des niveaux de Landau).

Historiquement liés aux débuts de la mécanique quantique, les phénomènes d'oscillations quantiques magnétiques ont présenté un intérêt fondamental de première importance puisqu'ils ont été les premiers effets quantiques prédits et observés dans les métaux. Ils ont notamment permis de mettre en évidence l'existence d'une surface de Fermi, concept à la base d'une très grande partie de la physique des solides. Les oscillations quantiques magnétiques sont une propriété universelle des métaux, mais également de tous les composés ayant une surface de Fermi.

Les métaux sont essentiellement décrits en terme de gaz d'électrons tridimensionnels (3D). Au cours des trois dernières décennies, de nombreux nouveaux composés qui présentent des propriétés électroniques fortement anisotropes sont apparus. Il s'agit par exemple des hétérostructures à base

d'arséniure de gallium ou de silicium, qui permettent la réalisation de gaz d'électrons bidimensionnels (2D). Ces composés ne sont pas idéalement 2D à strictement parler parce que les fonctions d'onde électroniques ont une étendue finie dans la troisième direction. Cependant, le vecteur d'onde est un bon nombre quantique pour deux dimensions, mais pas pour la troisième.

D'autres composés comme les conducteurs organiques (à base de sels de transfert de charge) présentant une structure en couches ont vu le jour au cours des vingt dernières années. Ces conducteurs sont constitués typiquement de plans très bons conducteurs avec une faible dispersion des quasi-particules entre les couches. En présence d'un champ magnétique H perpendiculaire aux couches, l'énergie du mouvement principal dans les plans conducteurs est quantifiée en niveaux de Landau. La dispersion en énergie quasi-2D des quasi-particules s'écrit alors

$$E = (n + 1/2)\omega_c - 2t \cos p_z s \quad (1)$$

où s est la distance entre couches, t est l'intégrale de transfert des quasi-particules entre couches, p_z est le moment des quasi-particules se déplaçant entre les couches (direction z), n est un entier positif, $\omega_c = |e|H/m^*c$ est la pulsation cyclotron dépendant de la masse effective (dans le plan) des quasi-particules m^* et e la charge électronique¹. La quantification en niveaux de Landau de l'énergie du mouvement 2D donne lieu comme dans les métaux aux effets d'oscillations quantiques magnétiques, qui sont étudiés dans cette thèse.

La physique des niveaux de Landau est redevenue un sujet d'actualité très développé au cours des deux dernières décennies après la découverte de l'effet Hall quantique entier en 1980 (qui a valu le prix Nobel en 1985 à l'allemand K. von Klitzing) et de l'effet Hall quantique fractionnaire en 1982 (prix Nobel décerné en 1998 aux expérimentateurs H. Störmer et D. Tsui, et au théoricien R. Laughlin) dans les hétérostructures. Les différents phénomènes d'oscillations liés à la quantification en niveaux de Landau dans ces différents systèmes (métaux, hétérostructures, conducteurs organiques) sont donnés dans le tableau 1 ci-dessous.

Plusieurs années se sont écoulées entre les premières observations des oscillations quantiques en 1930 et leur théorie quantitative par Lifshitz et

1. Tout au long du manuscrit, les constantes de Planck et de Boltzman seront prises égales à l'unité.

Phénomène	Découverte
effet de Haas-van Alphen (aimantation)	1930 de Haas et van Alphen
effet Schubnikov-de Haas (magnétorésistance)	1930 Shubnikov et de Haas
effet Hall quantique entier (magnétorésistance)(2D)	1980 von Klitzing, Dorda et Pepper
effet Hall quantique fractionnaire (magnétorésistance)(2D)	1982 Tsui, Störmer et Gossard

TAB. 1 – *Phénomènes oscillatoires liés aux niveaux de Landau et leur découverte.*

Kosevich dans les métaux 3D (1955). Les oscillations quantiques magnétiques se sont alors révélées un outil formidable pour obtenir les formes réelles des surfaces de Fermi dans les métaux, mais également d'autres informations quantitatives comme la masse effective et le temps de relaxation des électrons.

Les traits caractéristiques des oscillations quantiques magnétiques de l'aimantation ou de magnétorésistance sont connus pour être notablement différents dans les systèmes 2D et dans les métaux 3D. Par exemple, l'effet de Haas-van Alphen 2D est caractérisé par une forme en dents de scie à très basse température, tandis que les oscillations d'aimantation dans les métaux 3D sont toujours lisses (voir le Chap. 1 de rappel des résultats déjà connus). La différence entre les métaux 2D et 3D peut être comprise principalement en termes d'élargissement des niveaux de Landau.

Dans le cas 3D, le niveau de Fermi est traversé par de nombreux niveaux de Landau occupés en raison de la présence d'états dans la direction parallèle au champ magnétique H appliqué. Ces états disponibles non quantifiés pour toute valeur de H agissent comme un réservoir. La nature discrète des niveaux de Landau est alors brouillée par cet élargissement inhérent à la dimensionnalité du spectre. En conséquence, le potentiel chimique μ (l'énergie du dernier état occupé) oscille de façon négligeable avec le champ magnétique. De plus, la partie oscillante des propriétés de transport est toujours faible comparée à la partie non-oscillante.

Dans le cas 2D, il n'y a pas d'élargissement des niveaux de Landau dû à la dimensionnalité, et par conséquent les oscillations des propriétés thermodynamiques et de transport peuvent être plus fortes. La source principale

d'élargissement des niveaux de Landau est désormais la présence d'impuretés dans les matériaux réels. Dans les métaux 3D, l'élargissement dû aux impuretés est un ingrédient accessoire dans la dérivation de la théorie des oscillations quantiques magnétiques, et est usuellement pris en compte à la main (voir Chap. 1). En revanche, la considération des effets des impuretés sur les oscillations quantiques magnétiques est de première importance pour la théorie dans les métaux 2D. L'élargissement dû aux impuretés modélisées par des points est habituellement étudié dans l'approximation de Born self-consistante qui conduit à des oscillations de la partie imaginaire de la self-énergie $\Gamma(\varepsilon)$ dépendant de l'énergie. A fort champ magnétique, les oscillations de $\Gamma(\varepsilon)$ deviennent très importantes. Dans un tel régime, il a été démontré que la simple considération des impuretés comme des points est inappropriée pour décrire correctement les oscillations quantiques magnétiques (voir Chap. 5). À notre connaissance, la théorie complète et satisfaisante des effets des impuretés sur les oscillations, c'est-à-dire de la levée de dégénérescence des niveaux de Landau due aux impuretés, n'existe toujours pas.

Un autre problème théorique qui apparaît dans les systèmes 2D est la présence d'oscillations de potentiel chimique non négligeables si le système est isolé (nombre total d'électrons fixé). En réalité, l'influence des oscillations du potentiel chimique sur la forme des oscillations d'aimantation ou de magnétorésistance peut être étudiée à un niveau semi-phénoménologique (en court-circuitant le problème microscopique avec les impuretés qui détermine en principe la forme exacte de la dépendance du potentiel chimique avec le champ magnétique). Ce problème est traité dans les Chapitres 2 et 3 de cette première partie.

Dans les systèmes quasi-2D, la situation concernant l'élargissement des niveaux de Landau est en quelque sorte intermédiaire entre les cas 2D et 3D et dépend du rapport t/ω_c : l'élargissement des niveaux de Landau dû à la dimensionnalité est très important quand $t \gg \omega_c$. Dans la limite opposée, quand $\omega_c \gg t$, les niveaux de Landau sont brouillés seulement par l'effet des impuretés, exactement comme dans les métaux 2D (pour lesquels $t = 0$). Il est important de souligner que les théories 3D de l'effet de Haas-van Alphen et de l'effet Shubnikov-de Haas ne sont pas directement applicables aux métaux quasi-2D car la méthode du point col utilisée dans les calculs du cas 3D perd sa validité avec le spectre donné en Éq. (1) quand $\omega_c \geq t$. Des écarts à la théorie de Lifshitz-Kosevich ont effectivement bien été observés dans de nombreuses expériences.

Les métaux quasi-2D sont le terrain d'étude idéal de l'influence de la di-

mensionnalité sur les oscillations quantiques magnétiques. Dans le Chapitre 2, nous présentons un calcul de la densité d'états, ainsi que du grand potentiel thermodynamique dans ces systèmes, afin d'obtenir une équation exprimant les oscillations du potentiel chimique. Dans le Chapitre 3, nous étudions l'effet de Haas-van Alphen dans les métaux quasi-2D. Nous démontrons que le comportement des oscillations d'aimantation est bien piloté par le rapport t/ω_c , en mettant en évidence un crossover entre les limites 3D et 2D en fonction du champ magnétique (dimensionnalité apparente réduite). L'influence des oscillations du potentiel chimique sur l'aimantation dans les systèmes 2D et quasi-2D y est décrite en détail. Dans le Chapitre 4, nous présentons un calcul de l'effet de Haas-van Alphen dans l'état mixte supraconducteur des systèmes de basse dimensionnalité. Le but de ce chapitre est de comparer la situation avec les supraconducteurs 3D. Dans le Chapitre 5, les oscillations quantiques magnétiques de la magnétorésistance longitudinale sont étudiées. La question du traitement des effets des impuretés sur les oscillations quantiques magnétiques en basse dimensionnalité est mise en avant. Nous indiquons que, contrairement à l'idée commune établie (tirée du résultat 3D), les oscillations de magnétorésistance ne sont pas directement reliées aux oscillations de la densité d'états.

Etude de la symétrie de l'état supraconducteur dans le composé UPt_3

La supraconductivité est la disparition complète de toute résistance électrique d'un matériau au passage d'un courant continu (Kamerlingh-Onnes, 1911). Ce phénomène quantique s'observe dans de très nombreux métaux à basse température. Il est à ce titre comparable avec la superfluidité qui est la disparition de la viscosité des liquides comme observée dans les fluides ^4He et ^3He .

La théorie de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS, Nobel 1972) développée en 1957 décrit d'un point de vue microscopique l'état supraconducteur dans les métaux usuels. Elle repose sur la formation d'états liés de paires d'électrons (paires de Cooper) via un potentiel attractif dû aux vibrations du réseau cristallin, les phonons. Cette interaction attractive est à peu près isotrope, de telle sorte que les paires de Cooper se forment dans un état de moment angulaire orbital nul (appariement de type s). Dans ^3He , l'attraction due à

l'interaction des spins nucléaires des atomes de hélium-3 avec les fluctuations de l'aimantation liquide (paramagnons) est essentiellement anisotrope et conduit à la formation de paires de Cooper avec un moment orbital angulaire $L = 1$ (appariement de type p).

Les composés à fortes corrélations électroniques comme les fermions lourds (composés à base de terres rares ou d'actinides), les supraconducteurs à haute température critique (ces céramiques pour la plupart à base de cuprates ont été découvertes en 1986 par Bednorz et Müller récompensés par le prix Nobel en 1987) et les conducteurs organiques suscitent de nombreuses questions concernant l'origine et la nature non conventionnelle de la supraconductivité qui s'y manifeste.

La théorie BCS ne permet pas d'expliquer certaines propriétés physiques comme la valeur importante de la température de transition supraconductrice T_c de certains cuprates (le record actuel est de 138 K). Les expériences suggèrent fortement l'existence d'une différence fondamentale entre les métaux usuels et ces supraconducteurs non-conventionnels au niveau de la symétrie de la paire de Cooper. Les supraconducteurs à haute température critique semblent être bien décrits par un appariement d'électrons de type d (le moment orbital angulaire $L = 2$), impliquant une forte dépendance directionnelle des interactions électrons-électrons. L'origine de l'interaction attractive ne serait donc pas les phonons, et son identification constitue actuellement toujours un domaine d'étude très actif.

La théorie BCS ne permet pas non plus de rendre compte de la supraconductivité observée dans le composé fermion lourd UPt₃. Celui-ci ne se particularise pas par sa température critique (de 550 mK, ce qui est très faible), mais plutôt par son diagramme de phase champ magnétique - température exotique. UPt₃ présente à champ magnétique nul deux transitions supraconductrices successives. Qui plus est, il exhibe trois phases supraconductrices pour l'état mixte, alors que la théorie BCS ne prédit qu'une phase mixte. L'état mixte supraconducteur est un état de la matière particulier pour lequel le champ magnétique pénètre partiellement dans l'échantillon sous forme de tubes appelés vortex, qui s'organisent sous la forme d'un réseau régulier (Abrikosov, 1957, Nobel 2003).

D'après de récentes études, d'autres composés supraconducteurs, comme Sr₂RuO₄, PrOs₄Sb₁₂ et le conducteur organique λ - (BETS)₂GaCl₄, sembleraient présenter plusieurs phases pour l'état mixte. À part certains supraconducteurs à haute température critique, le composé UPt₃ est peut-être le supraconducteur le mieux caractérisé expérimentalement. C'est peut-être

aussi le plus exotique, manifestant clairement (macroscopiquement) via l'aspect de son diagramme de phase son caractère non conventionnel. C'est ce qui fait de lui le sujet d'intérêt de la deuxième partie de cette thèse.

De nombreuses expériences à très basse température ont mis en évidence l'anisotropie de la paire de Cooper dans UPt_3 . Si la réalisation d'un état supraconducteur anisotrope ne fait aucun doute dans ce composé, la détermination non ambiguë et précise de la dépendance directionnelle de la partie orbitale de la paire de Cooper est plus délicate. En effet, l'anisotropie supraconductrice microscopique peut être brouillée par l'anisotropie du cristal sous-jacent. Cette compétition entre ces deux types d'anisotropies rend souvent difficile l'interprétation certaine des mesures expérimentales de grandeurs macroscopiques. Dans le Chapitre 6, nous faisons une rapide description de l'état des connaissances sur le supraconducteur UPt_3 .

Une expérience décisive et instructive, consistant à observer le réseau de vortex par diffusion de neutrons à petits angles dans deux des trois phases mixtes de UPt_3 pour une direction du champ magnétique parallèle à l'axe hexagonal du cristal, a été menée au sein de notre service (Huxley *et al.*, 2000) à Grenoble peu de temps avant le début de ma thèse. Une des motivations initiales et principales du travail de cette deuxième partie de thèse était d'interpréter et de comprendre l'observation inhabituelle d'un réseau de vortex hexagonal orienté à $\pm 45^\circ$ des axes cristallins dans la phase mixte bas champ-haute température, alors que ce même réseau de vortex hexagonal se trouvait orienté le long des axes cristallins pour un même champ dans l'autre phase mixte à plus basse température.

Dans le Chapitre 7, après une présentation plus détaillée de cette expérience, nous analysons le rôle joué par la symétrie de l'état supraconducteur sur l'orientation et la forme du réseau de vortex. Nous démontrons que seule une symétrie parmi toutes celles déjà envisagées pour décrire l'état supraconducteur de UPt_3 rend compte de ces observations expérimentales.

Dans le Chapitre 8, nous développons certains aspects concernant l'explication théorique du diagramme de phase supraconducteur avec la présence de phases mixtes multiples pour un champ magnétique parallèle à l'axe hexagonal du cristal. Notamment, nous mettons en évidence que les différentes phases mixtes de UPt_3 pourraient être délimitées par des crossovers plutôt que par des lignes de transition de phase du second ordre, contrairement à ce qui était couramment admis jusqu'ici.

Enfin, le Chapitre 9 est consacré à la recherche d'une éventuelle détermination expérimentale de la symétrie de l'état supraconducteur en prenant en

compte l'influence des impuretés sur la pente du second champ critique près de la température critique. Nous montrons qu'une telle étude ne permettrait pas de répondre de façon non ambiguë quant à l'anisotropie précise de la paire de Cooper dans UPt_3 .

PARTIE I

Oscillations Quantiques Magnétiques dans les systèmes de basse dimensionnalité

Chapitre 1

Les oscillations quantiques magnétiques

Dans ce chapitre, nous rappelons les principaux résultats connus concernant les oscillations quantiques magnétiques. En premier lieu, nous introduisons à partir d'un modèle de gaz 2D d'électrons les niveaux de Landau. Puis, les grandes lignes de la théorie de Lifshitz-Kosevich de l'effet de Haas-van Alphen pour un spectre 3D arbitraire sont analysées. Enfin, les résultats de Peierls puis de Shoenberg concernant les oscillations d'aimantation dans les métaux 2D sont présentés.

1.1 Niveaux de Landau

Les électrons dans le métal sont traités comme des électrons libres avec une masse effective m^* souvent très différente de la masse de l'électron. Usuellement, la renormalisation du tenseur de masse effective est suffisante pour tenir compte à la fois des effets du potentiel cristallin et des interactions électron-électron.

Dans la description quantique, le hamiltonien des électrons libres dans un cristal est par conséquent

$$H = \frac{1}{2m^*} p^2, \quad (1.1)$$

où $\vec{p}$ est le moment de l'électron. Sous champ magnétique, le hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m^*} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2, \quad (1.2)$$

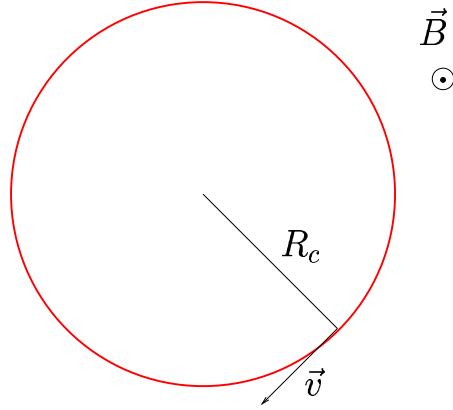


FIG. 1.1 – *Mouvement cyclotron de l'électron dans un champ magnétique*

avec $\vec{A}$ le potentiel vecteur (défini par rapport à l'induction magnétique $\vec{B}$ via la relation $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$). Ici e (< 0) est la charge de l'électron.

Il est bien connu que le mouvement classique correspondant est celui d'un mouvement circulaire dans le plan perpendiculaire à B (voir Fig. 1.1), de pulsation la pulsation cyclotron

$$\omega_c = \frac{|e|B}{m^*c}. \quad (1.3)$$

La période de l'orbite est indépendante de son rayon R_c qui est déterminé par la vitesse tangentielle v (ou de façon équivalente par l'énergie cinétique),

$$R_c = \frac{v}{\omega_c}. \quad (1.4)$$

Pour une induction magnétique $\vec{B}$ parallèle à l'axe $\vec{z}$, il est commode de choisir la jauge de Landau $\vec{A} = xB\vec{y}$. Le hamiltonien devient alors

$$H = \frac{1}{2m^*} \left(p_x^2 + \left(p_y + \frac{eB}{c}x \right)^2 \right). \quad (1.5)$$

Les niveaux d'énergie sont donnés par la solution de l'équation de Schrödinger aux valeurs propres

$$H\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z). \quad (1.6)$$

Comme le hamiltonien est invariant par translation dans la direction y , la fonction d'onde Ψ est cherchée sous la forme $\Psi_{p_y}(x, y) = e^{ip_y y} f_{p_y}(x)$ où la fonction $f_{p_y}(x)$ est solution de l'équation

$$h_{p_y} f_{p_y}(x) = E_{p_y} f_{p_y}(x) \quad (1.7)$$

avec

$$h_{p_y} = \frac{1}{2m^*} p_x^2 + \frac{1}{2m^*} \left(p_y + \frac{eB}{c} x \right)^2. \quad (1.8)$$

Cette équation n'est rien d'autre que celle d'un oscillateur harmonique unidimensionnel avec

$$h_{p_y} = \frac{1}{2m^*} p_x^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_c^2 (x + p_y l_B^2)^2, \quad (1.9)$$

centré en $X_{p_y} = -p_y l_B^2$ et de pulsation la pulsation cyclotron classique ω_c . Dans le problème quantique, la longueur magnétique l_B est une grandeur caractéristique définie par¹

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e|B}}. \quad (1.10)$$

L'interprétation physique de cette longueur est que l'aire $2\pi l_B^2$ contient un quantum de flux Φ_0 où

$$\Phi_0 = \frac{hc}{|e|}. \quad (1.11)$$

C'est à dire la densité de flux magnétique est

$$B = \frac{\Phi_0}{2\pi l_B^2}. \quad (1.12)$$

Ainsi, pour chaque onde plane choisie dans une direction y , il existe une famille d'énergies propres

$$E_{n,p_y} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega_c \quad (1.13)$$

indépendantes du moment p_y . Le spectre électronique dans un métal 2D est donc intégralement quantifié en valeurs entières n de quanta de l'énergie

1. Nous réintroduisons temporairement la constante de Planck $\hbar$ pour définir la longueur magnétique et le quantum de flux.

cyclotron ω_c (niveaux de Landau). Pour un métal 3D isotrope, il est très facile de montrer que seule la partie du spectre concernant le mouvement perpendiculaire au champ est quantifiée, le mouvement selon la direction du champ ($\parallel z$) restant continûment libre :

$$E_{n,p_y,p_z} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_c + \frac{p_z^2}{2m^*}. \quad (1.14)$$

Les fonctions d'onde propres (non normalisées) correspondant au spectre (1.13) sont

$$\Psi_{np_y}(x, y) = e^{ip_y y} H_n(x + p_y l_B^2) e^{-\frac{1}{2l_B^2}(x + p_y l_B^2)^2}, \quad (1.15)$$

où H_n est le $n^{\text{ième}}$ polynôme de Hermite.

La dégénérescence de chaque niveau de Landau est énorme. Supposons que l'échantillon soit un rectangle de dimensions L_x et L_y , et que le bord gauche se trouve à l'abscisse $x = -L_x$ et le bord droit à l'abscisse $x = 0$. Les fonctions d'onde de base comportent une fonction gaussienne centrée en $X_0 = -p_y l_B^2$ et s'annulent donc rapidement pour des positions éloignées du centre. Alors les valeurs du moment p_y pour lesquelles l'état de base est substantiellement dans l'échantillon vont de $p_y = 0$ à $p_y = L_x/l_B^2$. Ainsi, le nombre total d'états dans chaque niveau de Landau est

$$D = \frac{L_y}{2\pi} \int_0^{L_x/l_B^2} dp_y = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2} = \frac{\Phi}{\Phi_0}. \quad (1.16)$$

La dégénérescence de chaque niveau est aussi le nombre de quanta de flux pénétrant dans l'échantillon ($\Phi = B L_x L_y$ est le flux de l'échantillon). Ainsi, dans un système ouvert (par exemple le plan 2D), la dégénérescence des niveaux de Landau est infinie.

1.2 Densité d'états

En absence d'impuretés et à température nulle, la densité électronique d'un système 2D sous champ magnétique est, d'après ce qui précède, un peigne de Dirac, puisque tous les niveaux sont discrets

$$g(\varepsilon) = D \sum_{n=0}^{+\infty} \delta\left(\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_c\right). \quad (1.17)$$

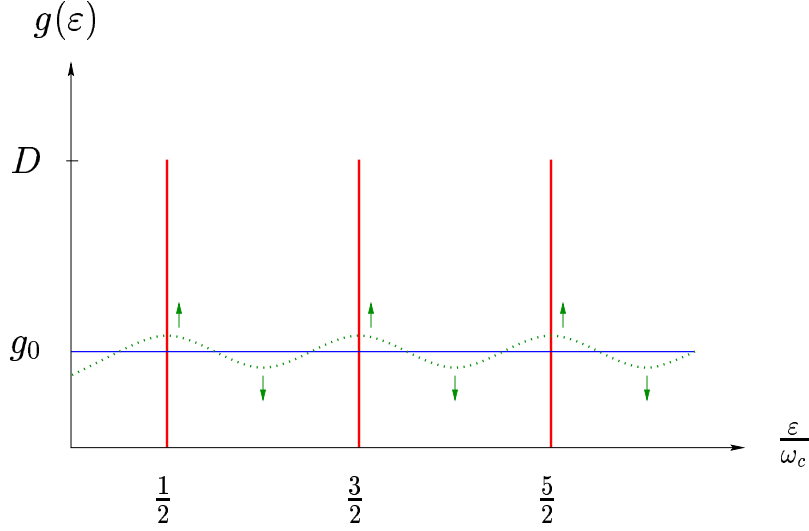


FIG. 1.2 – Densité d'états d'un système 2D sous champ magnétique. Les traits verticaux représentent les niveaux de Landau. Le trait horizontal est la densité d'états g_0 (constante) en absence de champ. La densité d'états des systèmes réels (en pointillé) oscille autour de la valeur g_0 dans le régime des oscillations quantiques magnétiques. Comme représenté par les flèches, l'amplitude des oscillations augmente avec le champ.

Dans ce cas idéalisé, la densité d'états comprend pour un champ magnétique fixé tel que $\omega_c \ll \varepsilon_F$ (ici ε_F est le niveau de Fermi), un grand nombre de gaps de largeur $\Delta = \omega_c$ entre chaque niveau de Landau (voir Fig. 1.2). Cependant, en présence d'une température finie et d'impuretés, comme c'est le cas dans un échantillon réel, les singularités des distributions de Dirac de la densité d'états sont (toujours) lissées. La levée de dégénérescence des niveaux de Landau par les impuretés reste encore une question ouverte. Notamment, l'interprétation théorique de l'effet Hall quantique entier est basée sur l'hypothèse de l'existence d'états localisés entre les niveaux de Landau et d'états délocalisés aux niveaux de Landau [1].

À champ nul, la densité d'états totale (incluant la dégénérescence de spin) du métal 2D est constante

$$g_0(\varepsilon) = \frac{m}{\pi}. \quad (1.18)$$

Dès l'application d'un faible champ magnétique, elle va légèrement osciller autour de cette distribution moyenne dans les systèmes 2D réels (voir Fig.

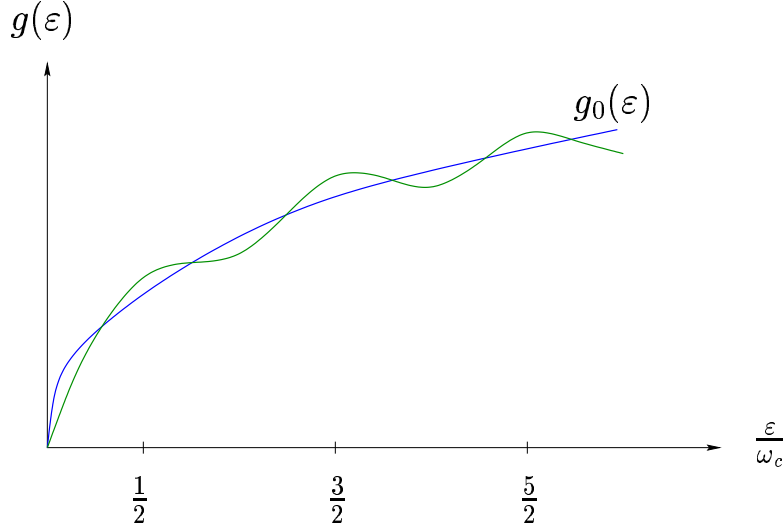


FIG. 1.3 – Oscillations de la densité d'états d'un métal 3D sous champ magnétique autour de la valeur à champ nul $g_0(\varepsilon)$.

1.2). Les maxima se forment pour les énergies correspondant aux niveaux de Landau $\varepsilon = (n + 1/2)\omega_c$, alors que les minima apparaissent pour les énergies $\varepsilon = n\omega_c$. Pour $\epsilon_F \gg \omega_c$, de nombreux niveaux de Landau sont occupés, et la distribution autour de chaque niveau de Landau pour les niveaux élevés est pratiquement indépendante de l'indice n du niveau. La densité d'états, dans ce régime de champ magnétique, est alors quasi-périodique avec l'énergie cyclotron ω_c :

$$g(\varepsilon + \omega_c) \approx g(\varepsilon). \quad (1.19)$$

Dans les systèmes 3D, ces oscillations de densité d'états autour de la valeur à champ nul se produisent également et donnent naissance aux mêmes effets d'oscillations (Fig. 1.3). Cependant, l'amplitude des oscillations est beaucoup plus faible que celle des systèmes de basse dimensionnalité (voir le chapitre suivant pour la comparaison et la présence d'effets spécifiques à la basse dimensionnalité, tels ceux liés aux oscillations de potentiel chimique).

Comme pour la grande majorité des effets quantiques, l'observation d'effets liés aux oscillations de la densité d'états requiert la condition

$$T \ll \omega_c \quad (1.20)$$

de basses températures (et/ou de fort champ magnétique). Nous donnons ci-dessous un ordre de grandeur des températures qu'il faut atteindre. Le régime typique des oscillations quantiques magnétiques (oscillations de l'aimantation - effet de Haas-van Alphen - et oscillations de la magnéto-résistance - effet Shubnikov-de Haas - avec la variation du champ magnétique) se manifeste lorsque de nombreux niveaux de Landau se trouvent sous le niveau de Fermi ε_F , soit

$$\varepsilon_F \gg \omega_c. \quad (1.21)$$

Dans les métaux 3D, le niveau de Fermi vaut typiquement $\varepsilon_F \sim 10000$ K. Pour un électron dans un champ magnétique de 1 T (ici pour l'application numérique nous prenons une masse effective égale à une masse électronique m_e), l'énergie cyclotron vaut $\omega_c \approx 1.4$ K. Par conséquent la condition (1.21) est naturellement remplie pour les métaux 3D et pour la gamme de champ magnétique accessible en laboratoire. En revanche, la condition (1.20) indique qu'il faut généralement travailler avec des températures inférieures au K.

Dans les hétérostructures (2D), le niveau de Fermi ε_F peut atteindre des valeurs beaucoup plus basses et ω_c des valeurs beaucoup plus élevées (car généralement dans ces systèmes la masse effective m^* est de l'ordre de $0.1 m_e$ voire $0.01 m_e$) [1]. Ces systèmes sont donc non seulement caractérisés par une basse dimensionnalité mais également par une énergie cyclotron qui est 1 voire 2 ordres de grandeur supérieurs aux métaux 3D ou aux conducteurs organiques quasi-2D.

Les hétérostructures se caractérisent aussi par la présence de très peu d'impuretés. Tout comme la température, les défauts brouillent aussi la nature discrète des niveaux de Landau. Typiquement l'élargissement Γ_0 des niveaux de Landau dû aux impuretés doit être tel que

$$\Gamma_0 < \omega_c \quad (1.22)$$

pour l'observation des oscillations quantiques magnétiques. Cette condition nécessite d'avoir des échantillons de relativement bonne qualité.

Pour des champs magnétiques importants et de faibles concentrations en impuretés, l'amplitude des écarts de la densité d'états sous champ à la valeur constante g_0 devient importante, ce qui est spécifique au cas 2D (dans le cas 3D, les écarts à la valeur en champ nul sont rendus minimales à cause de la dispersion indépendante du champ magnétique dans la direction parallèle au champ). Le traitement quantique des effets des impuretés sur les oscillations quantiques devient alors plus délicat à fort champ magnétique dans les

systèmes de basse dimensionalité. Grosso modo, lorsque $\varepsilon_F \gg \omega_c$ et $\omega_c \gg \Gamma_0$, nous nous trouvons dans le régime de l'effet Hall quantique entier.

Dans la limite quantique extrême de champ fort telle que $\omega_c \sim \varepsilon_F$ (cette limite est atteinte dans les hétérostructures), quand un seul niveau de Landau est occupé, les interactions coulombiennes entre électrons deviennent importantes. Cette limite correspond au régime d'observation de l'effet Hall quantique fractionnaire.

1.3 Surface de Fermi arbitraire : relation d'Onsager

Nous avons introduit les niveaux de Landau dans un modèle d'électrons libres 2D et 3D en résolvant l'équation de Schrödinger. En réalité, la situation est généralement beaucoup plus compliquée dans les métaux, qui en général présentent un spectre anisotrope. De plus, la relation de dispersion n'est pas forcément quadratique avec le moment. En utilisant les règles de la quantification quasi-classique de Bohr-Sommerfeld, il est possible de déterminer la quantification des niveaux d'énergie pour un spectre arbitraire $\varepsilon(\vec{p})$.

La règle stipule que pour toute orbite fermée, l'intégrale d'action est quantifiée comme

$$\oint P_y dY = 2\pi (n + \gamma(n)) \quad (1.23)$$

où $\gamma(n)$ est un nombre strictement compris entre 0 et 1 approximativement constant. En présence de champ magnétique, les opérateurs moments sont

$$\vec{P} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}. \quad (1.24)$$

Utilisant la jauge de Landau, il est direct de voir qu'ils satisfont la règle de commutation

$$P_y P_x - P_x P_y = \frac{eB}{c}. \quad (1.25)$$

Ainsi, la grandeur $Y = (c/|e|B)P_x$ joue le rôle de la coordonnée canoniquement conjuguée du moment P_y . On en déduit la relation d'Onsager

$$A(\varepsilon, p_z) = \oint P_y dP_x = 2\pi (n + \gamma(n)) \frac{|e|B}{c} \quad (1.26)$$

où $p_z = P_z$ est le moment selon l'axe z , et $A(\varepsilon, p_z)$ est l'aire de la section droite de la surface de Fermi pour un p_z donné limitée par la trajectoire de l'électron. De cette relation, on en déduit que la variation d'aire lors du passage d'un niveau n à un niveau $n + 1$ à p_z fixé correspond à

$$\Delta A = \frac{2\pi|e|B}{c}. \quad (1.27)$$

L'avantage de l'utilisation d'une telle méthode est bien sûr de ne pas avoir à résoudre l'équation de Schrödinger qui nécessite de spécifier une dispersion particulière.

1.4 Effet de Haas-van Alphen dans les métaux 3D : formule de Lifshitz-Kosevich

La théorie quantitative de l'effet de Haas-van Alphen pour un spectre général 3D a été proposée en 1955 par Lifshitz et Kosevich [2]. Elle est basée principalement sur l'utilisation de la relation de Onsager dérivée dans la section précédente. Son principe repose sur la transformation de la somme sur les nombres quantiques n, p_y, p_z dans l'expression du grand potentiel thermodynamique

$$\Omega = -T \sum_{n, p_y, p_z, \sigma} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon(n, p_z, \sigma)}{T} \right) \right], \quad (1.28)$$

dépendant du potentiel chimique μ , de la température T et du volume total V (égal à l'unité par la suite) du système. Nous donnons ici rapidement les principales lignes du calcul, qui est clairement détaillé dans le livre de Abrikosov [3].

Dans les métaux 3D, la dégénérescence d'un tube de Landau (n fixé) dans l'intervalle $[p_z, p_z + \Delta p_z]$ est

$$D = \Delta A \Delta p_z \frac{1}{4\pi^3} = \frac{|e|B \Delta p_z}{2\pi^2 c} \quad (1.29)$$

où on a utilisé (1.27). Ainsi,

$$\Omega = -T \sum_{\sigma=\pm 1} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z \frac{|e|B}{(2\pi)^2 c} \sum_n \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon(n, p_z, \sigma)}{T} \right) \right]. \quad (1.30)$$

Puis, la somme discrète sur les entiers n est transformée à l'aide de la formule sommatoire de Poisson (voir annexe A)

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \int_a^{+\infty} f(t) e^{-2\pi i l t} dt, \quad (1.31)$$

où a est un nombre compris entre -1 et 0. Nous pouvons alors séparer le grand potentiel thermodynamique Ω en une partie monotone Ω_0 (obtenue pour $l = 0$) et une partie oscillant avec le champ Ω_{osc} (quand $l \neq 0$)

$$\Omega_{\text{osc}} = -\frac{|e|BT}{2\pi^2c} \Re \sum_{\sigma, l=1}^{+\infty} \int_a^{+\infty} dt e^{-2\pi i l t} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon(t, p_z, \sigma)}{T} \right) \right]. \quad (1.32)$$

L'étape suivante consiste à effectuer l'intégration sur p_z par la méthode du point col, qui permet de retenir uniquement les contributions des termes $p_{z, \text{extr}}$ correspondant aux orbites ayant une section droite $A(\varepsilon, p_z)$ extrême (é fixé). Enfin, utilisant la définition de l'aimantation dans l'ensemble grand canonique

$$M_{\text{osc}} = - \left(\frac{\partial \Omega_{\text{osc}}}{\partial H} \right)_{\mu, T},$$

et ne gardant que les termes oscillant rapidement, nous arrivons au résultat que chaque section droite extrême contribue à l'aimantation totale comme

$$M_{\text{osc}} \propto \frac{|e|FT}{\sqrt{2\pi B A''}} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l l^{-3/2} R_T(l) R_s(l) \sin \left[2\pi l \frac{F}{B} \pm \frac{\pi}{4} \right]. \quad (1.33)$$

où

$$A'' = \left| \frac{\partial^2 A}{\partial p_z^2} \right|_{p_z = p_{z, \text{extr}}}.$$

La fréquence des oscillations de Haas-van Alphen, F , est définie comme étant

$$F = \frac{c A_{\text{extr}}}{2\pi |e|}, \quad (1.34)$$

où A_{extr} est une des sections droites extrêmes de la surface de Fermi. Les oscillations d'aimantation totales sont la superposition de toutes les contributions extrêmes.

Le facteur R_T décrit l'effet d'une température finie sur les oscillations,

$$R_T(l) = \frac{\lambda_l}{\sinh \lambda_l}, \quad \lambda_l = 2\pi^2 l \frac{T}{\omega_c}. \quad (1.35)$$

Le facteur R_s décrit l'effet du spin électronique (dû à la levée de dégénérescence de spin par effet Zeeman)

$$R_s(l) = \cos \left(2\pi l \frac{\mu_e B}{\omega_c} \right), \quad (1.36)$$

où μ_e est le moment magnétique de l'électron. L'effet des impuretés sur les oscillations quantiques est pris en compte dans (1.33) (à la main) via le facteur de Dingle $R_D(l)$

$$R_D(l) = \exp \left(-2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c} \right), \quad (1.37)$$

où $\Gamma_0 = 1/2\tau_0$ est l'élargissement en énergie des niveaux de Landau lié au temps de relaxation fini τ_0 des électrons à champ magnétique nul. La justification microscopique d'un tel facteur $R_D(l)$ dans la formule de Lifshitz-Kosevich a été donnée par Bychkov pour une dispersion quadratique [4].

Par application du champ magnétique à différents angles, nous pouvons trouver toutes les sections droites extrémales de la surface de Fermi et ainsi reconstruire la surface de Fermi totale. Outre la géométrie de la surface de Fermi, il est possible de déterminer également, via la dépendance en température de l'amplitude du premier harmonique, la masse effective électronique. Le taux de diffusion Γ_0 des électrons peut aussi être déterminé. Ainsi, nous comprenons facilement que l'analyse des oscillations quantiques avec la formule de Lifshitz-Kosevich est devenue un outil indispensable pour caractériser les surfaces de Fermi de très nombreux composés.

Notons que la formule (1.33) conduit à des oscillations d'aimantation lisses quels que soient les paramètres (température, taux d'impuretés, nombre d'orbites extrémales, ...). En Fig. 1.4, la forme typique des oscillations d'aimantation est représentée.

Avant de clore cette section, nous aimerions faire quelques remarques essentielles concernant les résultats et le domaine de validité du calcul de Lifshitz-Kosevich.

- Le calcul présenté ici n'est valable que pour un spectre arbitraire 3D (c'est-à-dire pour un spectre continu dépendant fortement de p_z): la méthode

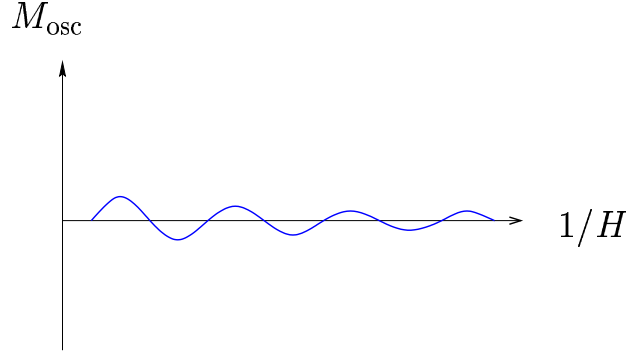


FIG. 1.4 – *Forme typique des oscillations d'aimantation dans les métaux 3D.*

du point col utilisée pour effectuer l'intégration sur le moment p_z n'est pas applicable aux systèmes de basse dimensionnalité pour lesquels le spectre dépend peu de p_z . Ce point précis est rarement formulé dans la littérature. Les deux points suivants non triviaux qui découlent directement de ce calcul ne sont par conséquent a priori valables qu'en 3D.

- La formule de Lifshitz-Kosevich exprime les oscillations d'aimantation comme un développement en série de Fourier. Les effets de la température, des impuretés, etc... sont incorporés dans l'amplitude des harmoniques. Une telle propriété rend l'exploitation des données expérimentales très pratique par simple utilisation de l'analyse de Fourier spectrale du signal.

- Pour dériver la formule (1.33), nous avons utilisé l'ensemble grand canonique pour lequel le jeu de variables naturelles est μ, V, T . Dans les situations expérimentales, l'échantillon est habituellement isolé et par conséquent, c'est le nombre total de particules N qui est fixé plutôt que le potentiel chimique μ . Comme montré dans la dernière partie de l'article original [2], il est possible de calculer les oscillations du potentiel chimique avec le champ magnétique à N fixé en utilisant le principe d'équivalence des ensembles à la limite thermodynamique. Comme résultat, les oscillations de μ sont négligemment faibles : la même formule (1.33) est aussi bien valable pour N fixé (auquel cas on prend pour μ la valeur à champ magnétique nul) que pour μ fixé dans les métaux 3D.

1.5 Effet Shubnikov-de Haas dans les métaux 3D

Des oscillations du même type que celles de l'aimantation se produisent dans les propriétés de transport. Dans les théories de l'effet Shubnikov-de Haas dans les métaux 3D [3], les oscillations de la magnétorésistance trouvent leur origine dans les oscillations du taux de diffusion $\Gamma(\mu) = 1/2\tau(\mu)$ sur les impuretés ponctuelles, qui dans l'approximation de Born est proportionnel à la densité d'états au niveau du potentiel chimique μ . Les oscillations Shubnikov-de Haas sont donc entièrement décrites en terme d'oscillations de la densité d'états. Il est d'ailleurs possible de relier les oscillations de magnétorésistance et d'aimantation simplement [3]. Pour une surface de Fermi isotrope, nous pouvons facilement estimer la partie oscillante $\Delta\sigma$ de la magnétoconductivité par rapport à la magnétoconductivité totale σ en utilisant les mêmes astuces mathématiques que pour la dérivation de la formule de Lifshitz-Kosevich [3], soit

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \sim \left(\frac{\omega_c}{\mu}\right)^2 \frac{\partial M_{\text{osc}}}{\partial B} \sim \sqrt{\frac{\omega_c}{\mu}}. \quad (1.38)$$

Le régime des oscillations quantiques correspond typiquement à la situation où de nombreux niveaux de Landau sont occupés, c'est-à-dire $\mu \gg \omega_c$. Ainsi, l'estimation (1.38) montre que les oscillations Shubnikov-de Haas sont relativement faibles dans les métaux 3D :

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \ll 1. \quad (1.39)$$

1.6 Effet de Haas-van Alphen dans les métaux 2D

1.6.1 Dérivation de Peierls

La dérivation de Peierls [5] (1933) relève plus d'un intérêt fondamental que pratique. Elle permet de comprendre très simplement dans le modèle le plus simple d'un métal 2D pur à température nulle comment apparaissent les oscillations d'aimantation à partir de la nature discrète des niveaux de Landau.

Soit N le nombre total (fixé) d'électrons dans le métal. Comme la fréquence cyclotron est proportionnelle au champ magnétique, introduisons la notation pratique $\omega_c = m_0 B$, où m_0 est homogène à un moment magnétique. Lorsque la dégénérescence $D > N$, seul le premier niveau de Landau est (partiellement) occupé. Le potentiel chimique vaut alors $\omega_c/2$. L'énergie totale du système est

$$E = N\omega_c/2 \quad (1.40)$$

et l'aimantation

$$M = -\frac{\partial E}{\partial B} = -\frac{N}{2}m_0. \quad (1.41)$$

À un champ inférieur, tel que $2D > N > D$, le premier niveau est entièrement occupé et le deuxième niveau l'est partiellement. Le potentiel chimique vaut alors $3\omega_c/2$. L'énergie totale est désormais

$$E = D\omega_c/2 + 3(N - D)\omega_c/2 = 3N\omega_c/2 - D\omega_c, \quad (1.42)$$

et

$$M = -\frac{3}{2}m_0N + 2m_0D. \quad (1.43)$$

Pour la valeur du champ magnétique particulière telle que $D = N$, l'aimantation est discontinue et saute de $-Nm_0/2$ à $+Nm_0/2$. Simultanément le potentiel chimique saute de $\omega_c/2$ à $3\omega_c/2$.

Nous pouvons calculer ainsi de suite l'aimantation pour des champs magnétiques inférieurs. Le résultat est l'obtention d'oscillations en forme de dents de scie pour l'aimantation avec des discontinuités pour les valeurs entières du rapport $N/D = \varepsilon_F/\omega_c$ (voir Fig. (1.5)). Quant à la fonction μ/ω_c , elle présente une forme en escaliers avec des sauts pour ces mêmes valeurs entières du rapport N/D .

Cette approche simple pour le métal 2D a un principal inconvénient : elle ne permet pas de prendre en compte les effets de température finie et d'élargissement des niveaux par les impuretés.

1.6.2 Formule de Shoenberg

En 1984, Shoenberg [6] a proposé une formule à partir de la densité d'états 2D et du calcul du grand potentiel thermodynamique pour les oscillations d'aimantation. Son but était d'obtenir une formule aussi pratique que celle de Lifshitz-Kosevich, c'est-à-dire sous la forme d'un développement en série

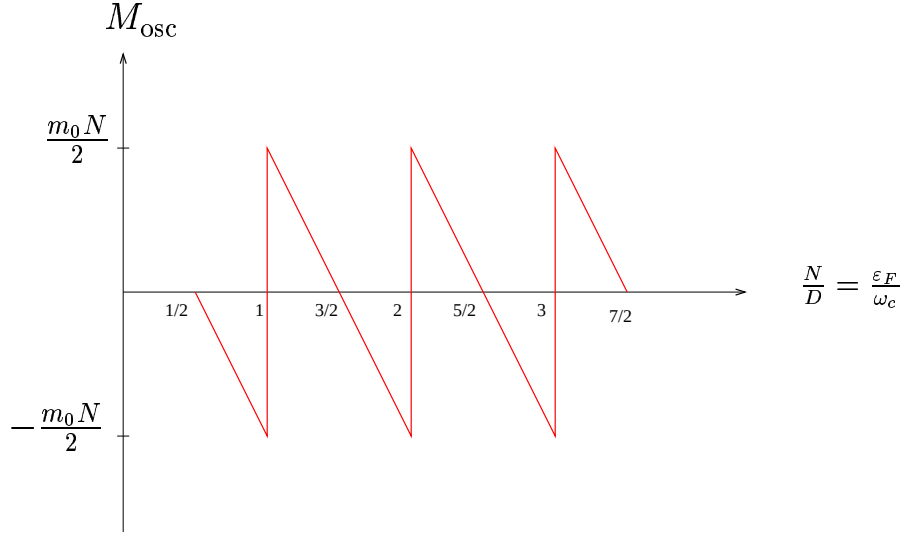


FIG. 1.5 – Oscillations d'aimantation à nombre d'électrons N fixé dans le métal 2D pur à température nulle comme fonction de $\frac{N}{D} = \frac{\varepsilon_F}{\omega_c}$.

de Fourier, prenant en compte notamment les effets de la température sur les oscillations.

Nous présentons ici un calcul légèrement différent de celui présenté dans la Réf. [6] mais conduisant à la même formule finale (voir également la thèse [7]). Le grand potentiel thermodynamique à calculer est donné par

$$\Omega = -T \int_0^\infty d\varepsilon g(\varepsilon) \ln \left(1 + \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon}{T} \right) \right). \quad (1.44)$$

La densité d'états peut s'exprimer comme

$$\begin{aligned} g(\varepsilon) &= D \sum_{n=0}^{+\infty} \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) = \frac{1 + \text{sign } \varepsilon}{2} D \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(\varepsilon - \varepsilon_n) \\ &= \frac{1 + \text{sign } \varepsilon}{2} g_0 \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \exp \left(2\pi i l \left(\frac{\varepsilon}{\omega_c} - \frac{1}{2} \right) \right) \\ &= \frac{1 + \text{sign } \varepsilon}{2} g_0 \left(1 + 2 \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l \cos \left(2\pi l \frac{\varepsilon}{\omega_c} \right) \right). \end{aligned} \quad (1.45)$$

Ici nous avons utilisé la relation

$$\frac{D}{\omega_c} = g_0.$$

Le calcul du grand potentiel thermodynamique s'effectue facilement à l'aide d'intégrations par parties pour donner pour $\mu \gg T$

$$\Omega = -\frac{g_0}{2}\mu^2 + \frac{g_0\omega_c^2}{2\pi^2} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^l}{l^2} R_T(l) \cos\left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}\right). \quad (1.46)$$

L'aimantation est alors obtenue par différentiation par rapport au champ magnétique à potentiel chimique fixé. En ne gardant que les termes oscillant rapidement avec le champ magnétique, nous avons

$$M = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial B}\right)_\mu = g_0\mu m_0 \frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} R_T(l) \sin\left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}\right). \quad (1.47)$$

Cette formule explicite la dépendance en champ et température de l'aimantation pour μ fixé. Sous cette condition (pas forcément toujours réalisée expérimentalement), le nombre d'électrons N dans le système oscille avec le champ magnétique autour d'une valeur à champ nul N_0 (par conséquent $N_0 = g_0\mu$). Il est facile de voir qu'à température nulle, les oscillations d'aimantation ont une forme en dents de scie avec des sauts apparaissant pour les valeurs demi-entières du rapport $\mu/\omega_c = N_0/D$ (Fig. 1.6).

Nous constatons donc que les oscillations de Haas-van Alphen dans les métaux 2D ont une forme différente (précisément inversée et décalée l'une par rapport à l'autre) selon que le potentiel chimique μ est fixé ou que le nombre d'électrons N est fixé (comparer les Fig. 1.5 et 1.6). Dans les métaux 3D, la réalisation de l'une ou l'autre condition expérimentale ne changeait rien aux caractéristiques de l'effet (voir remarques en fin de section 1.4). Nous verrons dans le Chap. 3 comment retrouver à nouveau la forme des oscillations de Peierls à N fixé à partir de la formule de Shoenberg (1.47) en tenant compte des oscillations de potentiel chimique en utilisant le principe d'équivalence des ensembles dans la limite thermodynamique.

Enfin, il est utile de mentionner que jusqu'ici nous n'avons pas introduit de facteur d'atténuation dû aux impuretés. Nous verrons plus loin (Chap. 2 et Chap. 5) que dans les métaux 2D, la prise en compte de l'effet des impuretés sur les oscillations quantiques magnétiques pose un problème difficile sur le plan théorique.

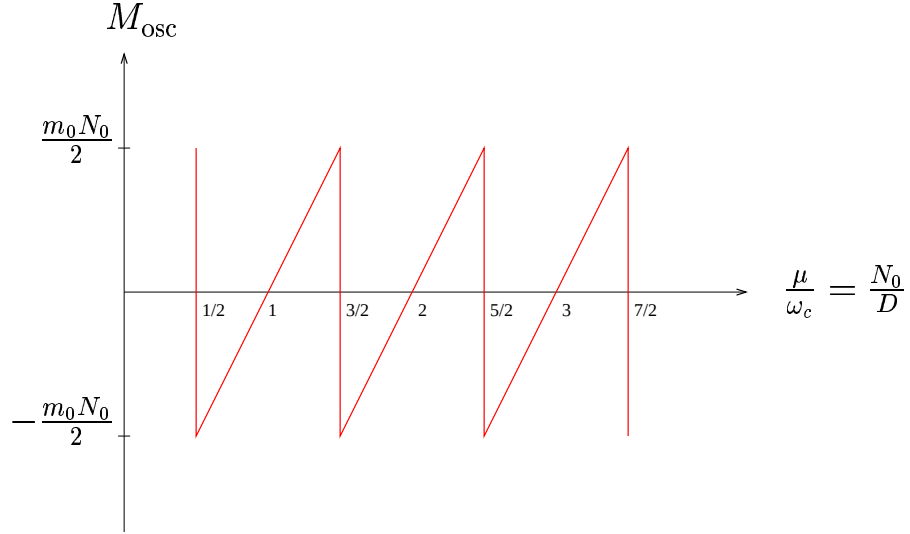


FIG. 1.6 – Oscillations d'aimantation à potentiel chimique μ fixé dans le métal 2D pur à température nulle comme fonction de $\frac{\mu}{\omega_c} = \frac{N_0}{D}$.

Remarque générale

Avant de terminer ce chapitre, il est utile de préciser un aspect physique qui ne sera pas développé par la suite mais qui mériterait en toute rigueur que l'on s'y attarde. Le champ magnétique appliqué H diffère a priori de l'induction magnétique B via la relation

$$B = H + 4\pi M(B). \quad (1.48)$$

Pour des faibles valeurs de l'aimantation $M(B)$, la différence entre H et B est négligeable. La différence entre H et B doit être prise en compte lorsque

$$\frac{dM}{dB} > \frac{1}{4\pi}. \quad (1.49)$$

Sous cette condition, il y a formation de domaines de Condon [8]. Dans le métal 2D pur à température nulle, les sauts d'aimantation correspondent justement à la situation $dM/dB \rightarrow \infty$, et par conséquent la condition (1.49) est remplie. Toutefois, par simplicité, dans toute la suite de la thèse nous ne tiendrons pas compte de cette question en nous focalisant sur d'autres problèmes, et utiliserons $H \approx B$.

1.7 Objectif de cette première partie

Au cours des vingt dernières années, de très nombreux travaux expérimentaux portant sur l'étude des effets d'un fort champ magnétique sur les systèmes électroniques de basse dimensionnalité ont été menés, particulièrement dans les conducteurs organiques quasi-2D (voir par exemple la revue [10] et les nombreuses références qu'elle contient). Des déviations manifestes à la théorie de Lifshitz-Kosevich ont été clairement observées dans ces composés.

L'objectif de cette première partie de thèse est de développer la théorie analytique des oscillations quantiques magnétiques dans les systèmes en couches quasi-2D.

Dans le Chapitre 2, nous introduisons les premiers éléments thermodynamiques nécessaires au développement de la théorie de l'effet de Haas-van Alphen dans ces systèmes quasi-2D. En effet, nous avons besoin avant tout de déterminer les oscillations quantiques de la densité d'états sous champ. Dans ce même Chapitre 2, nous donnons la démarche à suivre pour prendre en compte les oscillations de potentiel chimique.

La théorie complète de l'effet de Haas-van Alphen dans les systèmes de basse dimensionnalité est alors présentée en Chapitre 3. Nous étudions les deux cas de figure qui peuvent se présenter expérimentalement : les cas du potentiel chimique fixé ou du nombre total d'électrons fixé.

Puis, dans le Chapitre 4, nous avons pour objectif d'étudier les oscillations quantiques d'aimantation dans l'état mixte des supraconducteurs quasi-2D. Notamment, nous avons en vue de comparer la situation avec les supraconducteurs 3D.

Enfin, dans le Chapitre 5, nous nous intéressons aux oscillations quantiques de la magnétorésistance longitudinale lorsque le champ magnétique est appliqué perpendiculairement aux couches conductrices.

Chapitre 2

Aspects thermodynamiques

Dans ce chapitre, nous nous intéressons aux aspects thermodynamiques dans les systèmes quasi-2D. Tout d'abord, nous calculons la densité d'états électroniques en présence d'un champ magnétique perpendiculaire aux couches. Une hypothèse simplificatrice concernant l'effet des impuretés sur les oscillations quantiques nous permet par la suite d'introduire l'équation donnant les oscillations du potentiel chimique. Les calculs de ce chapitre ont été publiés dans la Réf. [9].

2.1 Modèle quasi-2D

En présence d'un champ magnétique perpendiculaire aux couches (voir la Fig. 2.1), la dispersion en énergie des quasi-particules s'écrit dans les systèmes quasi-2D

$$\epsilon_n(p_z) = (n + 1/2)\omega_c - 2t \cos p_z s. \quad (2.1)$$

Le modèle microscopique des conducteurs quasi-2D conduisant à une telle dispersion est présenté en Annexe C. La quantification en niveaux de Landau de l'énergie du mouvement 2D donne lieu aux effets d'oscillations quantiques magnétiques comme l'effet de Haas-van Alphen et l'effet Shubnikov-de Haas.

Il est utile de noter que dans la majeure partie des cas, le spectre électronique réel des conducteurs organiques quasi-2D ne se réduit pas au spectre simple (2.1) d'une bande d'états, mais est la superposition de plusieurs bandes au niveau de Fermi. Dans une section du chapitre suivant, nous étudierons plus spécialement l'effet de la présence de plusieurs bandes sur

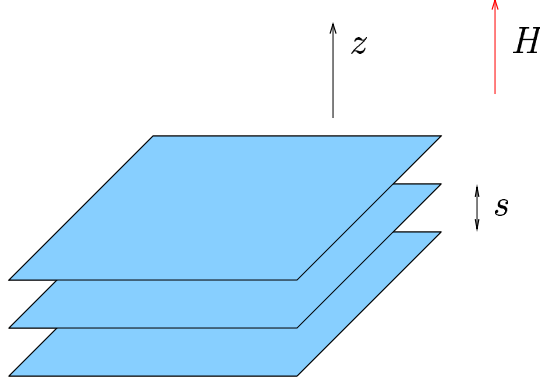


FIG. 2.1 – *Modèle quasi-2D en couches. Nous considérons le cas d'un champ magnétique appliqué perpendiculairement aux couches.*

les oscillations quantiques. Dans ce chapitre, seule une bande d'états au niveau de Fermi sera prise en compte explicitement. La raison principale est que la généralisation des différentes expressions à plusieurs bandes est directe.

2.2 Densité d'états quasi-2D

La densité d'états électroniques sous champ magnétique est obtenue à partir de la partie imaginaire de la fonction de Green $\bar{G}(\varepsilon)$ à un électron moyennée sur l'espace via la relation simple :

$$g(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{sgn}(\varepsilon - \mu) \Im \bar{G}(\varepsilon). \quad (2.2)$$

On s'affranchit du problème microscopique concernant les impuretés (voir Chap. 5) en faisant l'hypothèse ici que les oscillations avec le champ magnétique de la self-énergie due aux impuretés sont négligeables. Une telle considération est peut-être fausse pour les systèmes de basse dimensionnalité notamment à très fort champ magnétique. Toutefois, notre but est principalement d'étudier la thermodynamique. Nous nous attendons à ce que les oscillations de la self-énergie, si elles existent, n'induisent pas de bouleversement dans le comportement des grandeurs thermodynamiques des systèmes de basse dimensionnalité sous champ magnétique. En revanche, ce problème difficile concernant le traitement des impuretés apparaît plus déterminant et essentiel pour l'étude des propriétés de transport (voir Chap. 5).

Nous supposons donc dans un premier temps que les impuretés conduisent, exactement comme pour un métal 3D [4], à la présence d'une self-énergie constante $\Sigma = i\Gamma_0$, c'est à dire où Γ_0 , l'élargissement des niveaux de Landau dû à la diffusion sur les impuretés (ici $\Gamma_0 = 1/2\tau_0$ avec τ_0 le temps vie moyen des quasi-particules à champ nul), est indépendant de l'énergie considérée, du champ magnétique et est le même pour tous les niveaux de Landau. En fait, dans le calcul suivant, seule l'indépendance de la self-énergie avec les niveaux de Landau est exploitée. L'expression obtenue à la fin (expression (2.13)) est donc également valable pour un élargissement des niveaux $\Gamma(\varepsilon)$ quelconque.

Ainsi, $\bar{G}(\varepsilon)$ s'écrit généralement

$$\bar{G}(\varepsilon) = \sum_m \frac{1}{\varepsilon - E_m + i\Gamma_0 \text{sgn}(\varepsilon - \mu)}, \quad (2.3)$$

où m désigne les nombres quantiques et E_m le spectre en énergie des états stationnaires en l'absence d'impuretés. Les nombres quantiques dépendent de la dimensionnalité du système considéré ; pour le cas 2D, l'indice m des nombres quantiques comprend le nombre quantique magnétique n des niveaux de Landau, le moment p_y qui est relié au centre des orbites électroniques (voir le chapitre précédent), et le spin $\sigma = \pm 1$; pour le cas 3D, nous avons en plus le moment p_z . Nous considérons un champ $\mathbf{H}$ dirigé selon l'axe z , c'est à dire perpendiculaire à la (ou aux) couche(s) conductrice(s). Les spectres en énergie sont respectivement

$$E_{n,\sigma} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_c + \sigma \mu_e H, \quad (2.4)$$

$$E_{n,p_z,\sigma} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_c + \frac{p_z^2}{2m} + \sigma \mu_e H. \quad (2.5)$$

Ici μ_e est le moment magnétique de l'électron. Dans le cas quasi-2D des systèmes multicouches, le spectre électronique le plus simple prend la forme

$$E_{n,p_z,\sigma} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_c - 2t \cos(p_z s) + \sigma \mu_e H + \varepsilon_b, \quad (2.6)$$

où ε_b est l'énergie de bas de bande b . Par la suite, nous oublierons volontairement l'énergie de bande ε_b par commodité, puisque son rôle est uniquement de décaler l'origine des énergies. Le cas 2D est obtenu directement à partir

du cas quasi 2D en posant $t = 0$. C'est pourquoi, nous considérerons uniquement pour le calcul suivant le cas quasi-2D plus général. Dans le cas quasi-2D, l'expression pour la fonction de Green moyennée à un électron pour un spin donné σ devient donc

$$\bar{G}^\sigma(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \int \frac{dp_z}{2\pi} \frac{\omega_c g_0 / 2}{\varepsilon - (n + \frac{1}{2}) \omega_c + 2t \cos(p_z s) - \sigma \mu_e H + i \Gamma_0 \text{sgn}(\varepsilon - \mu)} \quad (2.7)$$

Le facteur $g_0 \omega_c / 2$ est la dégénérescence par projection de spin de chaque niveau de Landau (cf. Chap. précédent) et provient de l'intégration sur tous les moments p_y possibles. L'intégration sur le moment p_z va de $-\pi/s$ à $+\pi/s$. Ici la prise en compte des impuretés via le terme Γ_0 garantit l'obtention d'expressions bien convergentes sur le plan mathématique. En effet, la partie imaginaire qui nous intéresse est du type $\sum 1/n^2$:

$$\Im [\bar{G}^\sigma(\varepsilon)] = \frac{g_0}{2} \omega_c \int \frac{dp_z}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-\Gamma_0 \text{sgn}(\varepsilon - \mu)}{[\varepsilon - (n + \frac{1}{2}) \omega_c + 2t \cos(p_z s) - \sigma \mu_e H]^2 + \Gamma_0^2} \quad (2.8)$$

Le calcul de la sommation sur les niveaux de Landau repose sur l'utilisation de la formule sommatoire de Poisson (démonstration de la formule en Annexe A) :

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \int_a^{+\infty} f(t) e^{-2\pi i l t} dt, \quad (2.9)$$

où a est un nombre compris entre -1 et 0. En écrivant $\varepsilon = \xi + \mu$, en changeant la variable t en $x = t - \mu/\omega_c$, puis en faisant tendre la borne inférieure de l'intégrale sur x vers $-\infty$ (car nous considérons la limite $\mu/\omega_c \gg 1$), nous obtenons

$$\Im [\bar{G}^\sigma(\varepsilon)] = -\pi \frac{g_0}{2s} \text{sgn} \xi + \Im [\bar{G}_{\text{osc}}^\sigma(\varepsilon)], \quad (2.10)$$

avec

$$\begin{aligned} \Im [\bar{G}_{\text{osc}}^\sigma(\varepsilon)] &= -\frac{g_0}{2} \omega_c \Gamma_0 \text{sgn} \xi \int \frac{dp_z}{2\pi} \sum_{l \neq 0} e^{-2\pi i l \frac{\mu}{\omega_c}} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-2\pi i l x) dx}{[\xi - (x + \frac{1}{2}) \omega_c + 2t \cos(p_z s) - \sigma \mu_e H]^2 + \Gamma_0^2} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Le premier terme obtenu pour $l = 0$ correspond au résultat en absence de champ magnétique. Les autres termes pour $l \neq 0$ donnent une contribution

oscillant avec le champ magnétique. L'intégration sur x est désormais directe par un calcul de résidus et conduit à

$$\begin{aligned} \Im [\bar{G}_{\text{osc}}^{\sigma}(\varepsilon)] &= 2\pi \text{sgn}(\varepsilon - \mu) \frac{g_0}{2} \int \frac{dp_z}{2\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^{l+1} \times \\ &\times \cos \left(2\pi l \frac{\varepsilon - \sigma \mu_e H + 2t \cos(p_z s)}{\omega_c} \right) e^{-2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c}}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Après sommation sur les deux états de spin, nous obtenons directement la densité d'états recherchée

$$\begin{aligned} g(\varepsilon) = \frac{g_0}{s} \left[1 + 2 \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l \cos \left(2\pi l \frac{\varepsilon}{\omega_c} \right) \cos \left(2\pi l \frac{\mu_e H}{\omega_c} \right) \times \right. \\ \left. \times J_0 \left(2\pi l \frac{2t}{\omega_c} \right) e^{-2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c}} \right], \end{aligned} \quad (2.13)$$

où

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} \cos(x \cos \theta) d\theta \quad (2.14)$$

est la fonction de Bessel d'ordre zéro.

Remarques

À ce stade, nous pouvons comparer la forme de la densité d'états dans les deux cas limites $t \ll \omega_c$ et $t \gg \omega_c$. Dans la limite 2D $t \ll \omega_c$, le facteur de Bessel se réduit à l'unité (au moins pour les premières harmoniques l les plus significatives), et nous retrouvons naturellement la formule de la densité d'états 2D (1.45) en faisant la substitution $g_0/s \rightarrow g_0$.

Dans la limite opposée $t \gg \omega_c$, le facteur de Bessel est remplacé par son expression asymptotique

$$J_0(x) \approx \left(\frac{2}{\pi x} \right)^{1/2} \cos \left(x - \frac{\pi}{4} \right),$$

pour donner la densité d'états

$$\begin{aligned} g(\varepsilon) = \frac{g_0}{s} \left[1 + \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\omega_c}{2t}} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^l}{\sqrt{l}} \cos \left(2\pi l \frac{\varepsilon \mp 2t}{\omega_c} \pm \frac{\pi}{4} \right) \times \right. \\ \left. \times \cos \left(2\pi l \frac{\mu_e H}{\omega_c} \right) e^{-2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c}} \right]. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Cette forme pour les oscillations de la densité d'états est très proche de la forme 3D de Lifshitz-Kosevich (avec deux extrema pour la section droite de la surface de Fermi).

Il est immédiat de constater que l'amplitude des oscillations quantiques est directement reliée au facteur de Bessel. Dans la limite 3D, la partie oscillante de la densité d'états est réduite d'un facteur $\sqrt{\omega_c/2t} \sim \sqrt{\omega_c/\varepsilon_F} \ll 1$. Dans toute la suite, nous allons retrouver le fait que les oscillations quantiques de toutes les grandeurs (grand potentiel thermodynamique, potentiel chimique, aimantation, magnétorésistance, self-énergie, ...) sont plus importantes en basse dimensionnalité.

Enfin, notons que dans la limite 2D, la forme exacte de la densité d'états en présence d'impuretés reste ouverte. Le problème de la self-énergie due aux impuretés est évoqué plus en détail dans le Chapitre 5 portant sur l'effet Shubnikov-de Haas.

2.3 Choix de l'ensemble statistique

Le choix de l'ensemble statistique pour traiter les propriétés thermodynamiques d'un système est rarement mis en avant. La raison principale en est que généralement cette question n'est pas physiquement pertinente. Dans notre cas précis des métaux quasi-2D, cette question ne mériterait en principe pas que nous nous y attardions (et cette section n'aurait aucune raison d'exister). En effet, dans la majorité des cas, les systèmes étudiés sont des systèmes macroscopiques pour lesquels nous pouvons raisonnablement considérer que la limite thermodynamique stipulant l'équivalence des ensembles statistiques est réalisée.

Toutefois, concernant l'approche à suivre pour traiter les oscillations quantiques magnétiques en basse dimensionnalité, il existe dans la littérature (théorique et expérimentale) une certaine confusion. L'origine de cette confusion repose sur une méconnaissance de la validité de la formule de Lifshitz-Kosevich usuellement appliquée pour décrire la forme des oscillations quantiques magnétiques indifféremment du type de système.

Avec l'apparition des nouveaux composés de basse dimensionnalité, des déviations manifestes qualitatives et quantitatives à la formule 3D de Lifshitz-Kosevich ont été observées expérimentalement [11, 12, 13, 14]. La cause invoquée pour expliquer ces déviations a été la présence d'oscillations de potentiel chimique. Le potentiel chimique du système oscille avec le champ

magnétique pour un nombre total de particules N fixé (ce qui est la situation physique attendue pour un système isolé). Or, il est couramment déclaré [15, 16] que la formule de Lifshitz-Kosevich n'est plus valable en basse dimensionnalité car elle repose sur l'hypothèse d'un potentiel chimique fixé (rappelons que la formule est obtenue dans le cadre de l'ensemble grand canonique). Certains auteurs opposent même les systèmes 2D aux systèmes 3D en évoquant les ensembles statistiques, avec l'adéquation : 2D = ensemble canonique, 3D = ensemble grand canonique. Cette identification des ensembles statistiques avec les conditions expérimentales est un abus de langage dangereux du fait de la réalisation de la limite thermodynamique et maintient la confusion.

Or, d'après les remarques de la section 1.4 du premier Chapitre, nous savons que le principe de dérivation de la formule de Lifshitz-Kosevich prend en réalité en compte l'effet des oscillations du potentiel chimique. Comme déjà souligné, la dérivation de cette formule n'est pas valable en basse dimensionnalité non pas à cause des oscillations de potentiel chimique (qui sont certes attendues pour être importantes en 2D) mais à cause de l'utilisation de l'approximation du point col qui n'est pas applicable pour toute sorte de dispersion en énergie.

Comme habituellement, le choix de l'ensemble grand canonique pour le calcul des oscillations quantiques magnétiques relève plus d'un choix technique que physique (en ce qui concerne le calcul du potentiel thermodynamique). Toutefois, la difficulté est désormais déplacée dans la définition implicite des variables : dans l'ensemble grand canonique, les variables naturelles à partir desquelles toutes les grandeurs thermodynamiques s'expriment simplement sont le potentiel chimique μ , le volume V , et la température T . Si la situation physique requiert un nombre de particules N fixé, il est nécessaire de remplacer la variable μ par sa dépendance implicite avec N (et avec les autres variables considérées comme physiquement fixées). La démarche à suivre est décrite en Fig. 2.2. Par exemple, la dépendance de l'aimantation M sous champ magnétique à N fixé est alors donnée par

$$M(N, V, T) = M(\mu(N, V, T), V, T).$$

Dans les systèmes 3D, la relation implicite liant N et μ est facile à résoudre. Dans les systèmes de basse dimensionnalité, nous verrons par la suite que la résolution de cette relation implicite pose plus de difficultés.

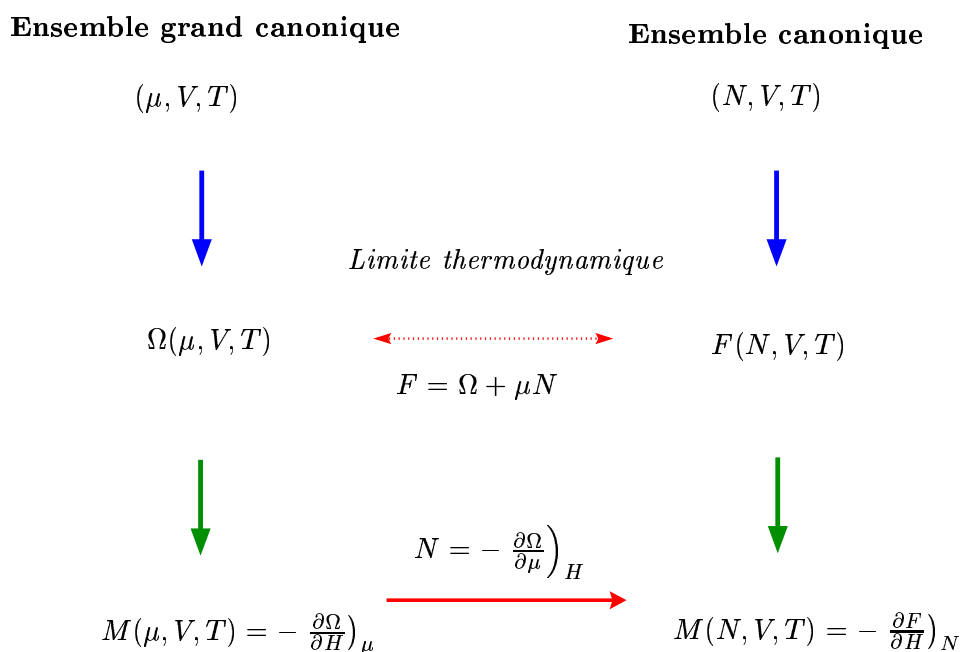


FIG. 2.2 – Équivalence des ensembles. L'aimantation est obtenue dans l'ensemble grand canonique, puis exprimée pour un nombre de particules fixé. La limite thermodynamique nous assure que l'expression alors trouvée pour l'aimantation est la même que la valeur que nous obtiendrions si nous avions fait les calculs entièrement dans l'ensemble canonique.

2.4 Calcul du grand potentiel thermodynamique

Pour obtenir l'aimantation, il faut avant tout calculer le potentiel thermodynamique Ω dans l'ensemble grand-canonique défini par

$$\Omega = -T \int_0^\infty g(\varepsilon) \ln \left(1 + e^{\frac{\mu - \varepsilon}{T}} \right) d\varepsilon. \quad (2.16)$$

Utilisant l'expression obtenue pour la densité d'états (2.13), la partie oscillante de Ω est obtenue en effectuant une intégration par parties et un changement de variables $x = (\varepsilon - \mu)/T$

$$\Omega_{\text{osc}} = \frac{g_0}{s} T \omega_c \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} R_D(l) R_s(l) J_0 \left(2\pi l \frac{2t}{\omega_c} \right) \frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\mu}{T}}^{+\infty} \frac{\sin(2\pi l \frac{(\mu + Tx)}{\omega_c})}{1 + e^x} dx. \quad (2.17)$$

La limite inférieure de l'intégrale peut être prise égale à $-\infty$ puisque nous considérons que $\mu \gg T$. Utilisant la valeur de l'intégrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\alpha y}}{1 + e^y} dy = -\frac{i\pi}{\sinh(\alpha\pi)}$$

nous trouvons alors

$$\Omega_{\text{osc}} = \frac{g_0}{s} \frac{\omega_c^2}{2\pi^2} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^l}{l^2} J_0(2\pi l \frac{2t}{\omega_c}) R_s(l) R_D(l) R_T(l) \cos(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}). \quad (2.18)$$

Les différents facteurs $R_T(l)$, $R_s(l)$ et $R_D(l)$ décrivant respectivement les effets de la température, du spin, et des impuretés sont les mêmes que ceux définis en Section 1.4.

La partie non-oscillante du potentiel thermodynamique donne quant à elle

$$\Omega_0 = -\frac{g_0}{s} \frac{\mu^2}{2}. \quad (2.19)$$

2.5 Oscillations du potentiel chimique

Dans les conditions expérimentales, c'est usuellement le nombre total des électrons qui est fixé et non le potentiel chimique. Comme déjà souligné,

ce dernier n'apparaît donc pas comme une bonne variable pour spécifier la dépendance des grandeurs thermodynamiques avec le champ magnétique. Utilisant l'équivalence des ensembles, le nombre d'électrons est alors défini par

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V, H}$$

et donc

$$N = \frac{g_0}{s} \mu + \frac{g_0}{s} \frac{\omega_c}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^l}{l} J_0\left(2\pi l \frac{2t}{\omega_c}\right) R_s(l) R_D(l) R_T(l) \sin\left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}\right). \quad (2.20)$$

Cette équation détermine le nombre de particules comme fonction de (H, T) à μ fixé. D'un autre côté, nous pouvons considérer l'équation (2.20) comme l'équation du potentiel chimique μ comme fonction de (H, T) à un nombre fixé de particules N . Reconnaisant l'énergie de Fermi définie à champ magnétique nul

$$\varepsilon_F = \frac{sN}{g_0}, \quad (2.21)$$

nous pouvons réécrire l'équation (2.20) comme

$$\mu = \varepsilon_F + \frac{\omega_c}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} J_0\left(2\pi l \frac{2t}{\omega_c}\right) R_s(l) R_D(l) R_T(l) \sin\left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}\right). \quad (2.22)$$

Cette équation est une équation implicite pour le potentiel chimique μ . Nous voyons qu'à $\mu \gg \omega_c$, le second terme oscillant $\mu_{\text{osc}} = \mu - \varepsilon_F$ présente une petite correction à la partie constante ε_F du potentiel chimique. Toutefois, la différence entre μ et ε_F est importante dans les arguments trigonométriques.

Il est utile de mettre en avant ici la différence entre l'énergie de Fermi ε_F et le potentiel chimique μ . En raison de la structure discrète des niveaux de Landau, le potentiel chimique μ (qui est l'énergie du dernier état occupé) est différent à température nulle du niveau de Fermi ε_F (l'énergie du dernier état occupé à H et $T = 0$) lorsque le nombre de particules est fixé. Ce problème de définition se pose principalement en basse dimensionnalité (en 3D cette subtilité n'a pas vraiment de grande importance). Sous champ magnétique, l'énergie de Fermi ε_F joue plutôt le rôle d'un point de référence pour l'énergie. Notamment, nous n'avons pas le droit de substituer l'énergie μ par ε_F dans

les expressions des différentes grandeurs thermodynamiques sans justification préalable (discussion qui va suivre).

Comme pour la densité d'états, nous pouvons facilement constater que la partie oscillante du potentiel chimique $\mu_{\text{osc}} = \mu - \varepsilon_F$ n'a pas la même amplitude dans les deux limites 2D et 3D.

Dans la limite 3D $t \gg \omega_c$, il est direct de voir que

$$\mu_{\text{osc}} \sim \omega_c \sqrt{\frac{\omega_c}{2t}}.$$

Les oscillations du potentiel chimique sont donc négligemment faibles autour de la valeur à champ nul du niveau de Fermi ε_F .

Dans la limite 2D $t \ll \omega_c$, l'équation du potentiel chimique en absence de levée de dégénérescence de spin s'écrit

$$\mu = \varepsilon_F + \frac{\omega_c}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} R_D(l) R_T(l) \sin(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}). \quad (2.23)$$

À température nulle, nous trouvons alors une expression simple en sommant sur l

$$\mu = \varepsilon_F + \frac{\omega_c}{\pi} \arctan \left(\frac{\sin(2\pi \frac{\mu}{\omega_c})}{\cos(2\pi \frac{\mu}{\omega_c}) + e^{2\pi \frac{\Gamma_0}{\omega_c}}} \right). \quad (2.24)$$

Nous en déduisons qu'en 2D (comme attendu d'après l'espacement entre les niveaux de Landau)

$$\mu_{\text{osc}} \sim \omega_c.$$

Pour tout Γ_0 fini, les oscillations du potentiel chimique sont lisses (pas de points singuliers comme c'est le cas à $\Gamma_0 = 0$). À faible champ magnétique, par exemple pour $2\pi\Gamma_0/\omega_c \geq 1$, nous pouvons remplacer μ par ε_F dans les arguments trigonométriques pour obtenir

$$\mu = \varepsilon_F + \frac{\omega_c}{\pi} \sin(2\pi \frac{\varepsilon_F}{\omega_c}) e^{-2\pi \frac{\Gamma_0}{\omega_c}}. \quad (2.25)$$

En revanche, à champ magnétique plus fort, le remplacement de μ par ε_F n'est pas valable, car la partie oscillante μ_{osc} n'est plus négligeable. Le traitement de cette difficulté est le sujet du chapitre suivant.

Conclusion

Nous avons calculé la densité d'états électroniques sous champ dans les métaux quasi-2D prenant en compte la présence des impuretés, et d'une éventuelle levée de dégénérescence de spin. La forme des oscillations quantiques de la densité d'états se rapproche tantôt de la forme 3D ou de la forme 2D respectivement dans les deux cas limites $t \gg \omega_c$ et $t \ll \omega_c$. Le rapport t/ω_c du terme de saut intercouches t et de l'énergie cyclotron ω_c contrôle l'amplitude des oscillations quantiques.

Puis, nous avons dérivé le grand potentiel thermodynamique Ω . Considérant la limite thermodynamique, nous avons alors exprimé les oscillations quantiques magnétiques du potentiel chimique pour un nombre d'électrons total fixé. De même que pour les oscillations de la densité d'états, nous avons montré que l'amplitude des oscillations du potentiel chimique à température nulle dépend du rapport t/ω_c dans les systèmes en couches.

Chapitre 3

Effet de Haas-van Alphen dans l'état normal

Dans ce chapitre, nous étudions les oscillations quantiques magnétiques d'aimantation (effet de Haas-van Alphen) dans les métaux quasi-2D. Nous considérons les deux situations possibles du potentiel chimique μ fixé ou du nombre total de particules N fixé. Pour N fixé, nous prenons en compte l'effet des oscillations du potentiel chimique pour le cas des métaux de basse dimensionnalité comprenant une bande d'énergie, puis pour le cas des métaux avec plusieurs bandes. Ce chapitre a fait l'objet de deux publications [17] et [18].

3.1 Oscillations d'aimantation à μ fixé

L'aimantation

$$M = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial H} \right)_{\mu, T}$$

s'obtient directement à partir de l'expression du potentiel thermodynamique Ω calculé dans le chapitre précédent. En gardant uniquement les termes dominants lors de la différentiation, nous avons

$$M_{\text{osc}} = Nm_0 \frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} R_T(l) R_s(l) R_D(l) \times \left\{ \sin\left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}\right) J_0\left(2\pi l \frac{2t}{\omega_c}\right) + \frac{2t}{\mu} \cos\left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}\right) J_1\left(2\pi l \frac{2t}{\omega_c}\right) \right\} \quad (3.1)$$

où $J_1(z) = -J'_0(z)$ est la fonction de Bessel du premier ordre. Si nous faisons l'hypothèse que l'intégrale de transfert t est beaucoup plus petite que l'énergie de Fermi ε_F , nous obtenons

$$M_{\text{osc}} = Nm_0 \frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} J_0\left(2\pi l \frac{2t}{\omega_c}\right) R_s(l) R_D(l) R_T(l) \sin\left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}\right). \quad (3.2)$$

Dans la limite 2D, $t \ll \omega_c$, les oscillations d'aimantation s'écrivent

$$M_{\text{osc}} = Nm_0 \frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} R_s(l) R_D(l) R_T(l) \sin\left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}\right). \quad (3.3)$$

Cette formule prise sans le facteur dû aux impuretés correspond à la formule 2D donnée par Schoenberg [6] (voir (1.47)). Dans la limite opposée $t \gg \omega_c$, la forme pour les oscillations d'aimantation est très semblable à la forme de Lifshitz-Kosevich (mêmes remarques que pour la densité d'états donnée en section 2.2).

Le système quasi-2D est par conséquent très particulier sous champ magnétique. Il passe d'un comportement 3D à un comportement 2D par simple augmentation du champ magnétique : la dimensionnalité apparente est réduite par le champ magnétique. La transition entre les deux comportements limites est contrôlée par le rapport t/ω_c via les facteurs de Bessel. La signification physique d'un tel crossover peut facilement être appréhendée en termes d'élargissement de niveaux de Landau. Dans le métal 3D, les niveaux de Landau sont intrinsèquement élargis en raison de la dispersion dans la direction parallèle au champ. Dans les métaux 2D, l'élargissement des niveaux de Landau est principalement occasionné par les impuretés. Dans les systèmes quasi-2D, l'élargissement des niveaux de Landau dû à la dimensionnalité est précisément piloté par l'intégrale de transfert intercouches t par rapport à l'énergie cyclotron ω_c .

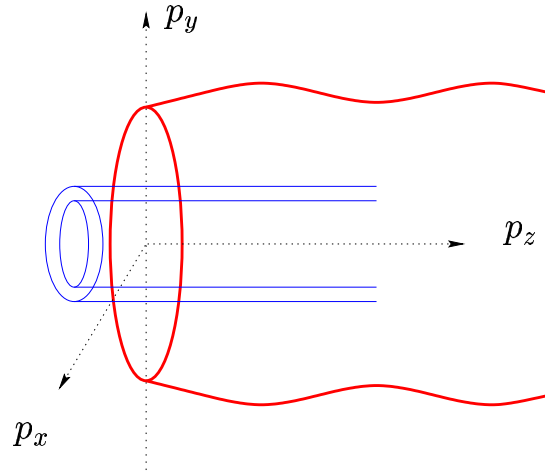


FIG. 3.1 – La distance entre deux tubes de Landau (les deux cylindres centraux) est beaucoup plus petite que la modulation t due au transport inter-couches (cylindre externe avec section modulée). Ainsi, le niveau de Fermi intersecte de nombreux tubes de Landau de rayons différents, comme dans les métaux 3D.

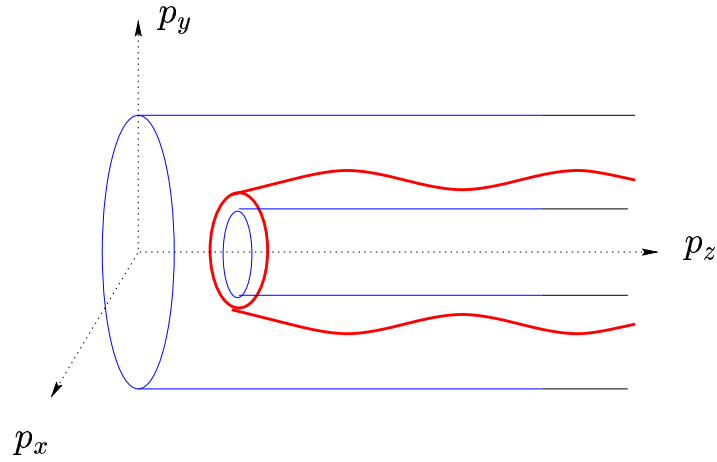


FIG. 3.2 – La distance entre deux tubes de Landau (cylindres en traits fins) est beaucoup plus grande que la modulation t (du cylindre avec section modulée en traits épais). Ainsi, le niveau de Fermi rencontre au plus un seul tube de Landau, comme dans le métal 2D.

Nous avons représenté schématiquement en Fig. 3.1 et Fig. 3.2 la surface de Fermi dans les cas limites 3D et 2D, afin d'illustrer l'effet de dimensionnalité apparente réduite causée par le champ magnétique dans les systèmes quasi-2D.

Remarque

L'expression (3.2) donne les oscillations d'aimantation sous champ magnétique à μ fixé. À N fixé, nous notons que, en comparant les relations (2.22) et (3.2) pour $\varepsilon_F \gg \omega_c$, l'aimantation est directement reliée à la partie oscillante du potentiel chimique μ par

$$M_{\text{osc}} = 2M_0 \frac{\mu_{\text{osc}}}{\omega_c}, \quad (3.4)$$

où $M_0 = Nm_0/2$ est l'aimantation à saturation. Cette relation a en fait une justification thermodynamique simple car

$$M = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial H} \right)_{\mu} = - \left(\frac{\partial \mu}{\partial H} \right)_N \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_N = N \left(\frac{\partial \mu}{\partial H} \right)_N \approx Nm_0 \frac{\delta \mu}{\delta \omega_c}.$$

Cette relation va nous servir par la suite pour décrire les oscillations d'aimantation à N fixé.

3.2 Effets des oscillations du potentiel chimique

3.2.1 Métaux comprenant une unique bande

Les calculs de cette section ont été publiés dans la Réf. [17].

Nous considérons désormais dans la suite de ce chapitre que le nombre d'électrons total est fixé. Par conséquent, le potentiel chimique est susceptible d'osciller avec le champ magnétique.

Un effet connu des oscillations du potentiel chimique est la symétrisation des oscillations d'aimantation à très basses températures dans des composés de basse dimensionnalité ultra-purs alors qu'une forme en dents de scie est attendue. Il a été montré que cet effet est lié à la présence de feuilles additionnelles quasi-1D de la surface de Fermi non quantifiées par le champ magnétique, et qui jouent le rôle d'un réservoir fini d'électrons [12].

Une relation entre la force de ce réservoir d'états et la forme des oscillations d'aimantation a clairement été trouvée numériquement par Itkovsky *et al.* [19]. Ces résultats indiquent qu'il est nécessaire de prendre en compte ces états qui ne sont pas quantifiés par le champ magnétique dans la description complète de l'effet de Haas-van Alphen dans les systèmes de basse dimensionnalité. Comme le spectre en énergie du réservoir n'est pas quantifié en niveaux de Landau par l'action du champ magnétique, il ne contribue pas à la partie oscillante sous champ Ω_{osc} du potentiel thermodynamique Ω . La dérivation du calcul de Ω_{osc} dans les métaux 2D est donc la même que celle donnée dans le chapitre précédent.

Dans le cas général, la variable μ/ω_c n'est pas appropriée pour donner la dépendance en champ magnétique des oscillations d'aimantation (cf. la section du Chapitre 2 sur les oscillations du potentiel chimique). La dépendance de μ avec le champ magnétique est déterminée par la condition de conservation du nombre d'électrons $N = -(\partial\Omega/\partial\mu)_{H,T}$. Ici N est le nombre total d'électrons se trouvant dans les couches 2D ainsi que dans le réservoir interne. Sous champ magnétique et pour des températures très basses, cette condition s'exprime comme

$$N = g_0\mu + \int_0^\mu g_R(\varepsilon) d\varepsilon - \left(\frac{\partial\Omega_{\text{osc}}}{\partial\mu} \right)_{T,H}, \quad (3.5)$$

où $g_R(\varepsilon)$ désigne la densité d'états du réservoir. À champ magnétique nul, le potentiel chimique μ_0 et le nombre d'électrons N sont reliés via

$$N = g_0\mu_0 + \int_0^{\mu_0} g_R(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.6)$$

La densité d'états $g_R(\varepsilon)$ est supposée quasi-constante sur une échelle d'énergie de l'ordre de $\omega_c/2$, de telle sorte que pour toute valeur du champ magnétique l'approximation

$$\int_0^\mu g_R(\varepsilon) d\varepsilon \approx \int_0^{\mu_0} g_R(\varepsilon) d\varepsilon + g_R(\mu_0) (\mu - \mu_0) \quad (3.7)$$

reste valable. Après substitution de l'équation (3.7) dans l'équation (3.5) et en utilisant (2.18) et (3.6), la partie oscillante $\mu_{\text{osc}} = \mu - \mu_0$ du potentiel chimique s'exprime comme

$$\mu_{\text{osc}} = \frac{\omega_c}{1+R} \frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} R_T(l) R_D(l) R_s(l) \sin \left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c} \right), \quad (3.8)$$

avec $R = g_R(\mu_0)/g_0$ un paramètre mesurant la force du réservoir. L'équation (3.8) joue un rôle central dans l'analyse quantitative de l'effet de Haas-van Alphen dans les métaux de basse dimensionnalité et est le sujet du développement qui suit.

À $\mu_0 \gg \omega_c$ la dépendance du potentiel chimique avec le champ est faible quelle que soit la valeur du paramètre R : le terme oscillant μ_{osc} représente une faible correction à la partie constante μ_0 car

$$\mu_{\text{osc}}/\mu_0 \sim \omega_c/2\mu_0(1 + R).$$

Dans le cas 3D, la partie oscillante μ_{osc} est de l'ordre de [2]

$$\mu_{\text{osc}}/\mu_0 \sim (\omega_c/\mu_0)^{3/2}.$$

Cette différence entre les métaux 2D et 3D a une conséquence importante sur le plan mathématique parce que c'est le rapport μ/ω_c qui apparaît dans l'argument des sinus dans l'expression des oscillations d'aimantation (voir (3.3)). Dans les systèmes 2D avec réservoir, la partie oscillante du potentiel chimique contribue comme

$$\mu_{\text{osc}}/\omega_c \sim 1/2(1 + R).$$

Dans les systèmes 3D

$$\mu_{\text{osc}}/\omega_c \sim (\omega_c/\mu_0)^{1/2}$$

et l'approximation

$$\sin(2\pi l\mu/\hbar\omega_c) \approx \sin(2\pi l\mu_0/\omega_c)$$

est justifiée [2] pour toutes les harmoniques l significatives. Dans les systèmes de basse dimensionnalité, une telle approximation mathématique est seulement possible quand $2\pi l\mu_{\text{osc}}/\omega_c \ll 1$, ce qui est satisfait seulement pour les harmoniques $l \ll (1 + R)/\pi$. Quand $R \gg 1$, cette condition est vérifiée pour toutes les harmoniques significatives exactement comme pour les métaux 3D. Dans les systèmes 2D, l'expression (3.3) n'est généralement plus le développement en série de Fourier des oscillations d'aimantation. Par conséquent, son utilisation en tant que tel n'est pas correct ; par exemple, la dépendance en température des oscillations n'est pas seulement contenue dans le facteur d'atténuation $R_T(l) = \lambda_l/\sinh \lambda_l$ mais aussi dans l'argument des sinus via le terme oscillant désormais significatif μ_{osc} . Par conséquent les masses effectives que l'on pourrait extraire en utilisant la formule (3.3) en omettant le

terme μ_{osc} peut conduire à des valeurs incorrectes. Une telle difficulté a été étudiée pour la première fois par Harrison *et al.* [12] dans le but d'expliquer l'obtention de masses effectives de valeur anormales à partir de la dépendance en température de différentes harmoniques.

Comme déjà souligné dans la section précédente et aussi dans de nombreux papiers [9, 12, 16, 19], les oscillations d'aimantation sont trouvées proportionnelles à la partie oscillante μ_{osc} du potentiel chimique (d'après les équations (3.3) et (3.8)) :

$$M_{\text{osc}} = 2M_0(1 + R) \frac{\mu_{\text{osc}}}{\omega_c}. \quad (3.9)$$

Ici M_0 est l'amplitude de l'aimantation à saturation ($T = 0$, $\Gamma_0 = 0$, $R_s(l) = 1$). La relation (3.9) implique que les effets d'atténuation dus à une température finie et à la présence d'impuretés agissent dans le même sens et simultanément pour les oscillations d'aimantation et les oscillations du potentiel chimique. Au contraire, les oscillations d'aimantation (3.3) dépendent du paramètre R seulement via les oscillations de potentiel chimique et donc ne sont pas réduites par la présence du réservoir. En utilisant (3.9), il est possible d'éliminer la partie oscillante du potentiel chimique dans l'expression (3.3). Les oscillations d'aimantation sont alors données par une équation non linéaire :

$$\frac{M_{\text{osc}}}{M_0} = \frac{2}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} R_T(l) R_D(l) R_s(l) \sin \left(2\pi l \frac{\mu_0}{\omega_c} + \frac{\pi l}{(1 + R)} \frac{M_{\text{osc}}}{M_0} \right). \quad (3.10)$$

Les zéros des oscillations d'aimantation apparaissent clairement pour

$$2\mu_0/\omega_c = n,$$

c'est à dire périodiquement. Cependant, la possibilité de décrire les oscillations d'aimantation de façon générale - en incluant les effets de la température finie, de la diffusion sur les impuretés, de la levée de dégénérescence de spin et d'un réservoir fini d'états - comme une série de Fourier pour toute valeur du champ magnétique est certainement perdue dans les métaux de basse dimensionnalité. Les formes des oscillations sont si différentes dans le régime de bas champ magnétique et dans le régime de fort champ magnétique (voir ci-dessous) que la description en terme d'une fréquence indépendante du champ magnétique peut être impossible.

L'effet de la température sur la forme des oscillations peut être démontré analytiquement en sommant l'équation (3.3) sur l quand $\lambda_1 \geq 1$. Alors $\mu_{\text{osc}}/\omega_c$ peut être négligé dans l'argument du sinus et l'expression finale (sans levée de dégénérescence de spin) est

$$M_{\text{osc}} \approx 2M_0 \frac{\pi T}{\omega_c} \sin \left(2\pi \frac{\mu_0}{\omega_c} \right) \exp \left(-2\pi \frac{(\Gamma_0 + \pi T)}{\omega_c} \right). \quad (3.11)$$

La température rend donc les oscillations symétriques quelles que soient les valeurs des autres paramètres car les extrema correspondent au rapport $2\mu_0/\omega_c = n + 1/2$. A contrario, notons que cela démontre précisément qu'il est nécessaire d'être à très basse température pour pouvoir espérer observer une forme des oscillations d'aimantation en dents de scie.

Le fait que les extrema des oscillations d'aimantation sont également très sensibles aux oscillations de potentiel chimique peut être démontré analytiquement à température nulle en sommant tout d'abord l'équation (3.8) sur les entiers l (cela est direct lorsqu'on reconnaît le développement de la partie imaginaire du logarithme $\ln(1+x)$ où

$$x = \exp(-2\pi l(\Gamma_0 + i\mu)/\omega_c)$$

est une variable complexe). Cela conduit à l'expression simple

$$\mu_{\text{osc}} = \frac{\omega_c}{\pi(1+R)} \arctan \left(\frac{\sin \left(2\pi \frac{\mu}{\omega_c} \right)}{\cos \left(2\pi \frac{\mu}{\omega_c} \right) + \exp \left(2\pi \frac{\Gamma_0}{\omega_c} \right)} \right). \quad (3.12)$$

L'amplitude de $\mu_{\text{osc}} = \mu - \mu_0$ est de l'ordre de $\omega_c/[2(1+R)]$. L'inversion de l'équation implicite (3.12) donnant μ/ω_c comme fonction de μ_0/ω_c est possible par une simple construction graphique : il suffit de représenter μ_0/ω_c comme fonction de μ/ω_c et de prendre la réflexion par rapport à la bissectrice d'équation $\mu/\omega_c = \mu_0/\omega_c$.

Pour $R = 0$ et dans la limite formelle $\Gamma_0 = 0$, le rapport μ/ω_c a exactement une forme en escalier (voir Fig. 3.3) et la partie oscillante $\mu_{\text{osc}}/\omega_c$ présente une forme en dents de scie avec des discontinuités apparaissant pour $\mu_0/\omega_c = n$. Donc, d'après la relation (3.9), les oscillations d'aimantation sont en accord formel avec le résultat du calcul de Peierls [5]. De façon plus générale, pour tous paramètres R et Γ_0 , les oscillations d'aimantation présentent des extrema sous champ magnétique quand

$$\cos(2\pi\mu/\omega_c) = -\exp(-2\pi\Gamma_0/\omega_c)$$

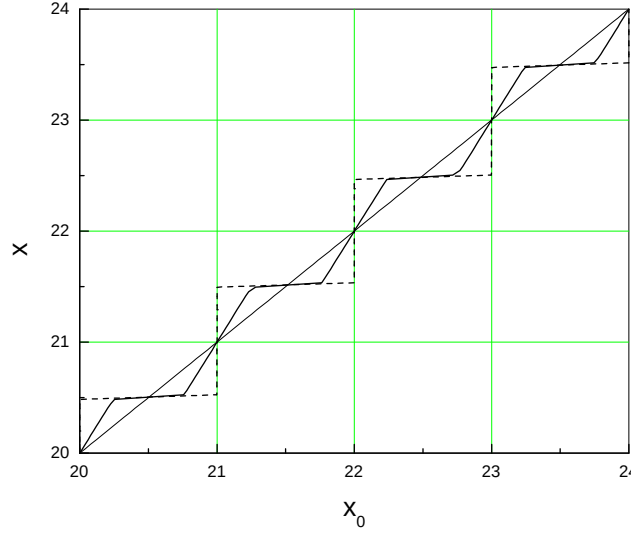


FIG. 3.3 – Variation de $x = \mu/\omega_c$ avec $x_0 = \mu_0/\omega_c$ à $T = 0$ d'après l'équation (3.12). La forme en escalier (ligne en pointillés) est obtenue dans la limite formelle $\Gamma_0 = 0$ et pour $R = 0$. La courbe représentée par la ligne solide correspond à un paramètre $R = 1$ et $\Gamma_0/\mu_0 = 5.10^{-5}$. La ligne bissectrice est obtenue pour $R \rightarrow +\infty$.

d'après (3.12). Pour $2\pi\Gamma_0/\omega_c \geq 1$, les oscillations sont symétriques quel que soit R comme attendu car les extrema sont obtenus pour

$$\frac{2\mu_0}{\omega_c} = n + \frac{1}{2} + \frac{2(-1)^{n+1}}{\pi(1+R)} \exp\left(-2\pi\frac{\Gamma_0}{\omega_c}\right). \quad (3.13)$$

Dans la limite formelle opposée $2\pi\Gamma_0/\omega_c \ll 1$, la position des extrema dépend fortement de la force du réservoir :

$$\frac{2\mu_0}{\omega_c} = 2n + 1 \pm \frac{1}{1+R}. \quad (3.14)$$

Pour $R \ll 1$, nous trouvons alors une forme en dents de scie avec des discontinuités pour les champs magnétiques $\mu_0/\omega_c = n$ comme trouvé par Peierls [5]. Pour $R \approx 1$, nous trouvons les oscillations symétriques comme montrées en Réf. [19] par une méthode numérique. Enfin, pour $R \gg 1$, quand le potentiel chimique reste invariablement égal à la valeur à champ magnétique nul μ_0 , les oscillations d'aimantation présentent une forme en dents de scie inversée [6]

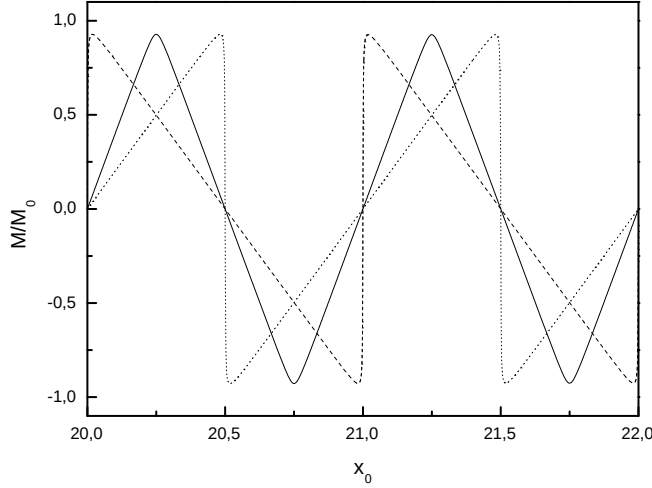


FIG. 3.4 – Oscillations d'aimantation pour différentes valeurs de R à $T \ll \omega_c$ dans les métaux 2D. Pour $R = 0$ (ligne en traits interrompus) les oscillations ont une forme en dents de scie avec des discontinuités positionnées aux valeurs entières de $x_0 = \mu_0/\omega_c$. La courbe symétrique (ligne solide) est trouvée pour $R = 1$. Pour $R \rightarrow +\infty$ (potentiel chimique constant) les sauts discontinus des oscillations en forme de dents de scie inversées ont lieu pour $x_0 = n + 1/2$ (ligne pointillée). Ici $\Gamma_0/\mu_0 = 5.10^{-5}$.

(voir la Fig. 3.4). Par conséquent, les résultats obtenus ici analytiquement sont en accord avec les résultats numériques obtenus dans l'approximation de quelques niveaux [19]. L'expression (3.14) valable à basses températures pour des métaux purs peut s'avérer utile pour estimer la valeur du paramètre R .

Considérons désormais le cas plus réaliste d'un spectre énergétique quasi-2D pour les métaux ayant une structure en couches. La présence d'un réservoir d'états va influencer de la même façon que pour le métal 2D. Les oscillations d'aimantation sont données pour $t \ll \mu$ par:

$$M_{\text{osc}} = M_0 \frac{2}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} R_T(l) R_D(l) R_s(l) \sin \left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c} \right) J_0 \left(2\pi l \frac{2t}{\omega_c} \right). \quad (3.15)$$

La généralisation correspondante pour un champ magnétique présentant un petit angle par rapport à la direction z est obtenue par simple substitution des paramètres dépendant de l'angle [9, 20]. Il est direct de montrer

que la relation (3.9) est également valable pour les métaux quasi-2D. L'influence des oscillations de potentiel chimique sur l'effet de Haas-van Alphen est directement reliée au facteur supplémentaire $J_0(2\pi l \frac{2t}{\omega_c})$. Pour $2t \ll \omega_c$, ce facteur se réduit à l'unité et donne par conséquent un comportement 2D où les effets des oscillations de potentiel chimique sont sensibles si le réservoir est faible (typiquement R inférieur à quelques unités). Pour $2t \geq \omega_c$, il induit un comportement 3D [9] pour lequel les oscillations de potentiel chimique sont réduites et la substitution de la quantité μ/ω_c par μ_0/ω_c dans les équations est raisonnable. Pour le cas intermédiaire, on s'attend à observer un crossover du comportement 3D vers le comportement 2D en augmentant le champ magnétique. Cela signifie que le comportement à haute température n'est désormais plus équivalent au comportement bas champ magnétique (et aussi vice versa) : l'équivalence est détruite par la présence du facteur $J_0(x)$ dépendant du champ magnétique. Celui-ci doit être pris en compte même lorsque le potentiel chimique est fixé. Par exemple, pour $x = 2\pi l 2t/\omega_c \leq 2$,

$$J_0(x) \approx 1 - x^2/4$$

et les amplitudes des harmoniques pour une valeur fixée du champ sont plus basses que celles données pour un métal 2D idéal.

3.2.2 Métaux multibandes : combinaison de fréquences

Cette section a été publiée dans la Réf. [18].

Dans les métaux 2D multibandes, et pour un nombre de particules total fixé, les contributions de chaque bande individuelle à l'aimantation se trouvent mélangées via les oscillations de potentiel chimique. Il en résulte l'apparition d'harmoniques avec combinaisons des fréquences individuelles dans le spectre de Fourier des oscillations d'aimantation [21, 22, 23, 24]. L'observation [27] de ces contributions additionnelles à l'effet de Haas-van Alphen avec des amplitudes significatives rend possible une comparaison quantitative avec la théorie. Dans ce but, une description analytique de l'effet de Haas-van Alphen dans les métaux 2D multibandes incluant les oscillations du potentiel chimique sur un plan quantitatif est nécessaire.

Récemment, Alexandrov and Bratkovsky [25] ont proposé une dérivation analytique pour les amplitudes des combinaisons de fréquence dans les oscillations magnétiques quantiques. Ils affirment que, pour un nombre fixé d'électrons N , les combinaisons de fréquence proviennent des oscillations

d'un terme au carré, seulement présent dans l'expression de l'énergie libre F dans l'ensemble canonique. Après avoir calculé le potentiel thermodynamique grand canonique Ω , ils obtiennent la forme explicite de l'énergie libre [Éq. (13) de la Réf. [25]] en utilisant la relation

$$F = \Omega + \mu N.$$

De leur expression (13), ils tirent directement les harmoniques de Fourier des combinaisons de fréquences.

D'après la Réf. [25], la partie oscillante F_{osc} sous champ magnétique de l'énergie libre F est reliée à la partie oscillante Ω_{osc} sous champ magnétique du potentiel thermodynamique grand canonique Ω via

$$F_{\text{osc}} = \Omega_{\text{osc}} - \frac{1}{2\rho} \left(\frac{\partial \Omega_{\text{osc}}}{\partial \mu} \right)_H^2, \quad (3.16)$$

où ρ est la densité d'états totale. Selon Alexandrov et Bratkovsky [25], c'est le second terme nonlinéaire oscillant dans l'Éq. (3.16), spécifique à l'ensemble canonique, qui produit les combinaisons de fréquences. Cependant, il est important de souligner ici que Ω_{osc} est une fonction explicite de la variable μ qui apparaît avec le rapport $\mu/\omega_{c\alpha}$ dans les arguments des composantes de Fourier (ici $\omega_{c\alpha}$ est la fréquence cyclotron de la bande individuelle α), voir la forme explicite donnée par l'Éq. (6), Réf. [25]. Pour un nombre total d'électrons N fixé, le traitement correct est donc d'éliminer la variable μ dans l'expression de Ω_{osc} avec la condition

$$N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_H. \quad (3.17)$$

Sous champ magnétique, le potentiel chimique est constitué d'une partie constante μ_0 (la valeur en absence de champ magnétique) plus une partie oscillante μ_{osc} donnée par l'équation implicite

$$\mu_{\text{osc}} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \Omega_{\text{osc}}}{\partial \mu} \right)_H. \quad (3.18)$$

Dans les métaux 3D, les oscillations de potentiel chimique peuvent être négligées [2] car $\mu_{\text{osc}} \sim \omega_c \sqrt{\omega_c/\mu_0}$ et $\mu_0 \gg \omega_c$ (dans cette partie, l'indice de bande α est omis par commodité d'écriture). La partie oscillante μ_{osc} apparaît dans les arguments des composantes de Fourier de Ω_{osc} selon la

combinaison $\mu_{\text{osc}}/\omega_c \sim \sqrt{\omega_c/\mu_0}$. Ainsi, le remplacement direct de la variable μ par la partie constante μ_0 dans l'expression explicite de Ω_{osc} est justifié [2] : $\Omega_{\text{osc}}(\mu) \approx \Omega_{\text{osc}}(\mu_0)$. Cela signifie que la résolution exacte de l'équation implicite (3.18) n'est pas nécessaire. Dans ce cas, l'expression explicite pour Ω_{osc} peut effectivement être considérée comme une sorte de développement en série de Fourier¹. En outre, le second terme de l'Éq. (3.16),

$$(\partial\Omega_{\text{osc}}/\partial\mu)_H^2/2\rho \sim \rho\omega_c^2(\omega_c/\mu_0),$$

est négligeable comparé à

$$\Omega_{\text{osc}} \sim \rho\omega_c^2\sqrt{\omega_c/\mu_0}.$$

Dans les métaux 3D multibandes, l'Éq. (3.16) est donc applicable mais les combinaisons de fréquences trouvant leur origine dans le terme au carré de l'expression (3.16) ont des amplitudes très petites.

Dans les métaux 2D multibandes et à très basse température $T \ll \omega_c$, la situation est bien différente. Comme attendu dans ces conditions, l'amplitude des oscillations du potentiel chimique est beaucoup plus importante que dans les métaux 3D. D'après l'Éq. (13) de la Réf. [25],

$$\Omega_{\text{osc}} \sim \rho\omega_c^2 \sim (\partial\Omega_{\text{osc}}/\partial\mu)_H^2/2\rho$$

à basse température et pour une faible diffusion sur les impuretés : les deux termes dans l'expression (3.16) sont alors du même ordre. Cependant, en même temps, nous avons désormais $\mu_{\text{osc}} \sim \omega_c$ de telle sorte que $\mu_{\text{osc}}/\omega_c = O(1)$. Par conséquent, le remplacement direct de la variable μ/ω_c par μ_0/ω_c dans les arguments des sinus de l'expression pour Ω_{osc} n'est plus valable. Contrairement aux métaux 3D, la résolution de l'Éq. implicite (3.17) est nécessaire. La considération de l'expression explicite pour F_{osc} comme un développement en série de Fourier, comme cela est fait dans la Réf. [25], est à présent incorrect. De plus, du fait de l'importance de la partie oscillante μ_{osc} , les contributions des bandes individuelles sont également mélangées via le couplage non linéaire dans Ω_{osc} , de telle sorte que les combinaisons de

1. En réalité, nous devrions plutôt parler d'une série de Fourier généralisée car les oscillations d'aimantation ne sont pas à strictement parler périodiques avec le champ magnétique : cela désigne une série pour laquelle les oscillations sont toujours données par des harmoniques, mais avec une amplitude dépendant du champ incluant par exemple les effets de température finie ou de diffusion sur les impuretés

fréquences peuvent être produites par les deux termes de l'Éq. (3.16). Par conséquent, nous concluons que l'analyse proposée par Alexandrov et Bratkovsky [25] pour expliquer l'apparition de combinaison de fréquences dans les métaux 2D multibandes est mathématiquement incorrecte.

En outre, le mécanisme proposé par Alexandrov et Bratkovsky repose sur la relation $F = \Omega + \mu N$ qui est applicable seulement à la limite thermodynamique. Dans cette limite, les quantités thermodynamiques évaluées dans l'ensemble canonique ou dans l'ensemble grand canonique sont égales pour les mêmes conditions expérimentales données. La fonction donnant les oscillations d'aimantation M_{osc} peut donc être dérivée de façon équivalente par

$$M_{\text{osc}} = - \left(\frac{\partial \Omega_{\text{osc}}}{\partial H} \right)_{\mu} = - \left(\frac{\partial F_{\text{osc}}}{\partial H} \right)_N.$$

Par conséquent, le mécanisme responsable des combinaisons de fréquences dans le spectre de Fourier des oscillations d'aimantation ne peut pas a priori dépendre de la façon dont l'aimantation est calculée, c'est à dire de l'utilisation d'un potentiel thermodynamique spécifique.

Dans la suite, nous nous intéressons à mettre en évidence comment les combinaisons de fréquences apparaissent en considérant directement l'expression des oscillations d'aimantation toujours dans la limite thermodynamique pertinente. Exactement comme dans la dérivation 3D de Lifshitz-Kosevich [2], les calculs des oscillations d'aimantation [9] sont techniquement plus faciles avec le potentiel thermodynamique grand canonique Ω . Ainsi, les oscillations d'aimantation sont dérivées à partir de

$$M_{\text{osc}} = - \left(\frac{\partial \Omega_{\text{osc}}}{\partial H} \right)_{\mu}, \quad (3.19)$$

qui est une fonction des variables grand canonique μ , V et T . Pour un nombre total d'électrons N fixé, la difficulté est toujours d'éliminer la variable μ dans l'expression de M_{osc} en utilisant la condition (3.18). Comme formulé précédemment, l'expression (3.18) pour les oscillations de potentiel chimique est l'équation-clé pour comprendre la différence entre l'effet de Haas-van Alphen en 2D et en 3D. Contrairement au cas 3D, sa résolution complète est nécessaire. La présence possible d'un réservoir fini d'électrons intrinsèque [12], qui réduit les oscillations du potentiel chimique doit également être envisagée comme paramètre additionnel. Comme résultat, dans les métaux 2D, les oscillations d'aimantation deviennent plus ou moins sensibles à la présence

d'oscillations du potentiel chimique et montrent des comportements significativement différents selon la présence ou non d'un réservoir fini d'électrons [12, 17, 26]. Dans les métaux 2D multibandes cette plus grande sensibilité aux oscillations du potentiel chimique s'exprime par la présence des combinaisons de fréquences dans le spectre de Fourier des oscillations d'aimantation à très basse température, comme l'a déjà montré numériquement Nakano [23]. Notre but est donc de prouver analytiquement l'existence de ces combinaisons de fréquences dans les oscillations d'aimantation.

Dans les métaux 2D à une bande, la partie oscillante μ_{osc} et les oscillations d'aimantation M_{osc} sont reliées par une relation de proportionnalité simple. Ainsi, l'équation (3.18) et l'équation (3.19) peuvent être réunies pour donner une équation unique [17]

$$\frac{M_{\text{osc}}}{M_0} = \frac{2}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} R_T(l) R_D(l) R_s(l) \sin \left(2\pi l \frac{\mu_0}{\omega_c} + \frac{\pi l}{(1+R)} \frac{M_{\text{osc}}}{M_0} \right). \quad (3.20)$$

Le paramètre sans dimension R mesure la force du couplage au réservoir [12]. Les oscillations de potentiel chimique sont responsables du caractère non-linéaire de l'Éq. (3.20). Pour $R \gg 1$, elles sont réduites de façon importante : alors, la formule (3.20) donne directement le développement en série de Fourier des oscillations d'aimantation dans les métaux 2D pour un potentiel chimique fixé [6].

Dans le cas multi-bande, les Éqs. (3.18) et (3.19) donnent pour $T \ll \mu$ et $\omega_c \ll \mu$

$$M_{\text{osc}} = \sum_{\alpha, l} M_{0\alpha} \frac{\mu_\alpha}{\mu_{0\alpha}} A_\alpha^l \sin \left(2\pi l \frac{\mu_{0\alpha} + \mu_{\text{osc}}}{\omega_{c\alpha}} \right), \quad (3.21)$$

$$\frac{\mu_{\text{osc}}}{\omega_{c\alpha}} = \frac{1}{2(1+R)} \frac{m_\alpha}{m} \sum_{\alpha', l'} A_{\alpha'}^{l'} \sin \left(2\pi l' \frac{\mu_{0\alpha'} + \mu_{\text{osc}}}{\omega_{c\alpha'}} \right), \quad (3.22)$$

où $\mu_\alpha = \mu_{0\alpha} + \mu_{\text{osc}}$, $\mu_{0\alpha} = \mu_0 - \Delta_{\alpha 0}$ est **indépendant du champ magnétique**, $M_{0\alpha} = \rho_\alpha \mu_{0\alpha} \omega_{c\alpha} / H$, ρ_α est la densité d'états par projection de spin à champ nul dans la bande α avec la masse effective m_α , $\omega_{c\alpha} = |e|H/m_\alpha c$, $m = \sum_\alpha m_\alpha$, $R = \rho_R / \sum_\alpha \rho_\alpha$ (avec ρ_R la densité d'états du réservoir), et

$$A_\alpha^l = \frac{2}{\pi} \frac{(-1)^{l+1}}{l} \frac{\lambda_{l\alpha}}{\sinh \lambda_{l\alpha}} \cos \left(2\pi l \frac{\mu_e H}{\omega_{c\alpha}} \right) \exp \left(-2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_{c\alpha}} \right).$$

Remarquons qu'ici les équations (3.21) et (3.22) ne peuvent pas être combinées pour donner une seule équation comme c'était le cas pour une bande. Néanmoins, les effets de μ_{osc} sur les oscillations d'aimantation restent qualitativement les mêmes. Comme pour le métal à une bande, lorsque $R \gg 1$, les oscillations de potentiel chimique sont considérablement réduites et nous retrouvons le développement de Fourier avec les fréquences classiques $f_\alpha = 2\pi c m_\alpha \mu_{0\alpha} / |e|$. Pour des valeurs plus petites de R , les contributions de chaque bande individuelle aux oscillations d'aimantation sont mélangées par l'intermédiaire de la partie oscillante du potentiel chimique μ_{osc} . Cependant, d'après les Éqs. (3.21) et (3.22), il n'est pas évident de savoir si une analyse de Fourier pour les oscillations d'aimantation est pertinente. Essayons de les écrire sous forme d'un développement de Fourier. Pour cela, dans les Éqs. (3.21) et (3.22) nous séparons les deux parties différentes du potentiel chimique présentes dans les arguments des sinus :

$$M_{\text{osc}} = \sum_{\alpha, l} M_{0\alpha} \frac{\mu_\alpha}{\mu_{0\alpha}} A_\alpha^l \left[\sin \left(2\pi l \frac{\mu_{0\alpha}}{\omega_{c\alpha}} \right) \cos \left(2\pi l \frac{\mu_{\text{osc}}}{\omega_{c\alpha}} \right) + \cos \left(2\pi l \frac{\mu_{0\alpha}}{\omega_{c\alpha}} \right) \sin \left(2\pi l \frac{\mu_{\text{osc}}}{\omega_{c\alpha}} \right) \right], \quad (3.23)$$

$$\frac{\mu_{\text{osc}}}{\omega_{c\alpha}} = \frac{1}{2(1+R)} \frac{m_\alpha}{m} \sum_{\alpha', l'} A_{\alpha'}^{l'} \left[\sin \left(2\pi l' \frac{\mu_{0\alpha'}}{\omega_{c\alpha'}} \right) \cos \left(2\pi l' \frac{\mu_{\text{osc}}}{\omega_{c\alpha'}} \right) + \cos \left(2\pi l' \frac{\mu_{0\alpha'}}{\omega_{c\alpha'}} \right) \sin \left(2\pi l' \frac{\mu_{\text{osc}}}{\omega_{c\alpha'}} \right) \right]. \quad (3.24)$$

À toute température finie ou élargissement dû aux impuretés fini, la quantité $\mu_{\text{osc}}/\omega_{c\alpha}$ est strictement inférieure à $0.5(1+R)^{-1}m_\alpha/m$ et se trouve réduite lorsque la température augmente ou le champ magnétique diminue. Par conséquent, en développant $\mu_{\text{osc}}/\omega_{c\alpha}$ en puissances des facteurs de réduction dus à la température ou aux impuretés, nous pourrions résoudre l'Éq. (3.24) par itérations successives. Toutefois, le caractère fortement non-linéaire des équations rend la résolution de ces équations self-consistentes quelque peu lourde, en particulier pour des oscillations du potentiel chimique importantes $|\mu_{\text{osc}}/\omega_{c\alpha}| \sim 1/2$. D'après la forme des Éqs. (3.23) et (3.24), nous pouvons noter que, de manière générale, pour un nombre fixé d'électrons, le développement de Fourier des oscillations d'aimantation pourrait bien ne pas exister. Néanmoins, dans quelques régimes particuliers ou suivant des condi-

tions spécifiques, la description en termes de série de Fourier semble possible **localement**, c'est à dire pour un intervalle fini de champ magnétique (qui dépend de la température, du paramètre R , du taux de diffusion par les impuretés Γ_0 et également de l'intégrale de transfert électronique t pour les métaux quasi-2D). En effet, dans le régime d'oscillations faibles du potentiel chimique mais non négligeables $|\mu_{\text{osc}}/\omega_{c\alpha}| < 1/2\pi$, nous pouvons linéariser les Éqs. (3.23) et (3.24) (pour les contributions des premiers l significatives) et obtenir au premier ordre par rapport aux oscillations du potentiel chimique

$$M_{\text{osc}} = \sum_{\alpha, l} M_{0\alpha} A_{\alpha}^l \left[\sin \left(2\pi l \frac{\mu_{0\alpha}}{\omega_{c\alpha}} \right) + 2\pi l \frac{\mu_{\text{osc}}}{\omega_{c\alpha}} \cos \left(2\pi l \frac{\mu_{0\alpha}}{\omega_{c\alpha}} \right) \right], \quad (3.25)$$

où

$$\frac{\mu_{\text{osc}}}{\omega_{c\alpha}} = \frac{1}{2(1+R)} \frac{m_{\alpha}}{m} \sum_{\alpha', l'} A_{\alpha'}^{l'} \sin \left(2\pi l' \frac{\mu_{0\alpha'}}{\omega_{c\alpha'}} \right). \quad (3.26)$$

La substitution de (3.26) dans (3.25) conduit au développement en série de Fourier

$$M_{\text{osc}} = \sum_{\alpha, l} M_{0\alpha} A_{\alpha}^l \sin \left(2\pi l \frac{\mu_{0\alpha}}{\omega_{c\alpha}} \right) + \sum_{\alpha, \alpha', l, l'} \frac{\pi l}{(1+R)} \frac{m_{\alpha}}{m} M_{0\alpha} A_{\alpha}^l A_{\alpha'}^{l'} \times \sin \left(2\pi l' \frac{\mu_{0\alpha'}}{\omega_{c\alpha'}} \right) \cos \left(2\pi l \frac{\mu_{0\alpha}}{\omega_{c\alpha}} \right). \quad (3.27)$$

En présence de plusieurs bandes, l'hypothèse de faibles oscillations du potentiel chimique n'est pas aussi restrictive même pour $R = 0$, car les amplitudes des oscillations sont d'emblée réduites par le facteur $m_{\alpha}/m < 1$. Dans ce régime, c'est le second terme de (3.27) qui est responsable de la présence des combinaisons de fréquences $f = lf_{\alpha} \pm l'f_{\alpha'}$. Leurs amplitudes sont

$$\frac{\pi A_{\alpha}^l A_{\alpha'}^{l'}}{2(1+R)} \left(l \frac{m_{\alpha}}{m} M_{0\alpha} \pm l' \frac{m_{\alpha'}}{m} M_{0\alpha'} \right). \quad (3.28)$$

À $T = 0$, le rapport de l'amplitude de l'harmonique de la combinaison de fréquence $f_{\alpha} + f_{\alpha'}$ à celle de l'harmonique de la bande individuelle α donné par le premier terme est ($A_{\alpha}^1 = 2/\pi$ en ne considérant pas les facteurs liés à la levée de dégénérescence de spin et aux impuretés)

$$\frac{1}{1+R} \frac{m_{\alpha}}{m} \left(1 + \frac{f_{\alpha'}}{f_{\alpha}} \right). \quad (3.29)$$

Cette valeur n'est pas incompatible avec la condition de linéarisation. Elle montre que la présence de combinaison de fréquences est significative si f_α et $f_{\alpha'}$ ne sont pas du même ordre de grandeur. Dans les expériences de Shepherd *et al.* [27], le rapport des fréquences de chaque bande est de l'ordre de 4, ce qui est cohérent avec cette condition pour l'observation des combinaisons de fréquences. Dans le travail numérique de Nakano [23], des amplitudes significatives pour les combinaisons de fréquences sont également trouvées dans la même configuration de $f_{\alpha'}/f_\alpha \sim 4$. Cela signifie que les métaux 2D multibandes ayant des fréquences pour les bandes individuelles telles que $f_{\alpha'}/f_\alpha \gg 1$ sont des systèmes idéaux pour espérer observer des combinaisons de fréquences dans le spectre de Fourier des oscillations d'aimantation à très basse température.

En outre, d'après l'Éq. (3.27) nous pouvons voir que les oscillations du potentiel chimique modifient aussi les amplitudes des fréquences des bandes individuelles. En effet, l'amplitude de la fréquence $f = Lf_\alpha$ consiste en l'amplitude habituelle (le premier terme dans le membre de droite de l'Éq. (3.27)) plus en une infinité de termes produits par les oscillations de potentiel chimique dans le second terme quand $L = l \pm l'$. Par exemple, le rapport de l'amplitude de l'harmonique L (fréquence Lf_α) en présence de faibles oscillations du potentiel chimique sur l'amplitude classique est

$$1 + \frac{\pi}{2(1+R)} \frac{m_\alpha}{m} \frac{L}{A_\alpha^L} \left(\sum_{l=1}^{L-1} A_\alpha^l A_\alpha^{L-l} - \sum_{l=L+1}^{+\infty} A_\alpha^l A_\alpha^{l-L} \right). \quad (3.30)$$

Pour le premier harmonique $L = 1$, ce rapport devient

$$1 - \frac{\pi}{2(1+R)} \frac{m_\alpha}{m} \frac{1}{A_\alpha^1} \sum_{l=1}^{+\infty} A_\alpha^l A_\alpha^{l+1}. \quad (3.31)$$

En utilisant la formule $\sum_l 1/l(l+1) = 3/2$, nous trouvons à température nulle et en absence de levée de dégénérescence de spin et de diffusion sur les impuretés:

$$1 + \frac{3}{2} \frac{1}{1+R} \frac{m_\alpha}{m}. \quad (3.32)$$

Dans le régime de faibles oscillations du potentiel chimique, le rapport (3.32) s'écarte légèrement de l'unité, de telle sorte que le rapport de l'amplitude de la combinaison de fréquence $f_\alpha + f_{\alpha'}$ sur l'amplitude de la bande individuelle f_α [Éq. (3.29)] n'est pas affecté par ce facteur de correction. Néanmoins, les

expressions (3.30), (3.31) et (3.32) dérivées avec la condition de linéarisation des oscillations du potentiel chimique indiquent que dans le régime des oscillations fortes de potentiel chimique (pour lequel un calcul numérique des oscillations d'aimantation est inévitable) les amplitudes usuelles des bandes individuelles sont alors significativement affectées [12, 26].

Conclusion

En conclusion, nous avons étudié de façon analytique l'effet de Haas-van Alphen dans les systèmes de basse dimensionnalité présentant une ou plusieurs bandes, lorsque le nombre d'électrons total est constant, en soulignant clairement la différence avec les métaux 3D. Les oscillations de potentiel chimique apparaissent dès que l'énergie cyclotron est plus importante que l'intégrale de transfert ($\omega_c \geq t$).

Dans la limite 2D $\omega_c \gg t$, les oscillations d'aimantation deviennent très sensibles aux oscillations de potentiel chimique. La présence d'un réservoir fini d'électrons doit être prise en compte comme un paramètre additionnel. Ce réservoir contrôle essentiellement l'amplitude des oscillations de potentiel chimique, et de façon indirecte les positions des extrema des oscillations d'aimantation à très basses températures dans les échantillons pratiquement absents de défauts.

En présence d'oscillations du potentiel chimique fortes, la description quantitative des oscillations d'aimantation en termes de série de Fourier pourrait bien ne plus être possible à fort champ magnétique et doit être abordée par des méthodes numériques. Ces complications apparaissant dans les systèmes quasi-2D rendent indubitablement l'effet de Haas-van Alphen moins pratique que dans les métaux 3D (décrits par la formule de Lifshitz-Kosevich "relativement simple" en comparaison).

Dans le régime d'oscillations du potentiel chimique faibles, l'analyse de Fourier reste une bonne approximation. Dans les métaux 2D multibandes, ces oscillations sont responsables de la présence de combinaison de fréquences qui peuvent apparaître avec une amplitude significative si les fréquences des bandes individuelles diffèrent significativement.

Chapitre 4

Effet de Haas-van Alphen dans l'état mixte supraconducteur

Dans ce chapitre, la théorie de l'effet de Haas-van Alphen dans l'état mixte supraconducteur des métaux quasi-2D est développée. Nous montrons que l'effet du réseau de vortex est d'introduire une atténuation supplémentaire des oscillations d'aimantation. Nous comparons le résultat obtenu avec les supraconducteurs 3D. Ce chapitre a été publié dans la Réf. [9].

4.1 Rétrospective

Parallèlement à l'étude de l'effet de Haas-van Alphen dans l'état normal des métaux de basse dimensionnalité, la possibilité d'effectuer des mesures d'oscillations quantiques dans l'état mixte supraconducteur a été reconnue après la première observation de l'effet par Graebner et Robbins [28] en 1976. Durant ces dix dernières années, l'effet de Haas-van Alphen a été observé à la fois dans l'état mixte et l'état normal de nombreux types de supraconducteurs comme NbSe₂ [29], Nb₃Sn [30], V₃Si [31], YNi₂B₂C [32, 33], CeRu₂ [34], UPd₂Al₃ [35], URu₂Si₂ [36], κ -(BEDT - TTF)₂Cu(NCS)₂ [37]. Mise à part la condition de basse température

$$T < \omega_{c2} \sim \frac{|e|H_{c2}}{mc} \sim \frac{T_c^2}{\varepsilon_F},$$

une condition pour l'observation de l'effet de Haas-van Alphen dans l'état mixte supraconducteur consiste en l'ultrapureté des échantillons

$$l_m > \frac{v_F}{\omega_{c2}} \sim \frac{\varepsilon_F}{T_c} \xi_0.$$

Ici l_m est le libre parcours moyen des quasi-particules, v_F est la vitesse au niveau de Fermi, T_c est la température critique, H_{c2} est le second champ critique, et ξ_0 est la longueur de cohérence supraconductrice. Ces deux conditions signifient que tous les échantillons de tous les composés cités ci-dessus sont ultrapurs et en même temps des supraconducteurs de type II forts avec un champ critique supérieur élevé. Ce dernier est fourni par une température critique plus élevée et un niveau de Fermi plus bas que dans les supraconducteurs de type II ordinaires.

L'observation principale est que la fréquence des oscillations dans l'état mixte reste la même que dans l'état normal. En revanche l'atténuation du signal avec $1/H$ est plus rapide dans l'état mixte que dans l'état normal. L'effet de Haas-van Alphen devient inobservable pour des champs plusieurs fois plus petits que H_{c2} mais toujours plus larges que le champ critique thermodynamique $H_c = H_{c2}/\kappa$. Ici κ est le paramètre de Ginzburg-Landau, qui est typiquement de l'ordre de 20-30 pour les matériaux dans lesquels l'effet de Haas-van Alphen a été observé dans l'état mixte. Cela signifie que la distance entre vortex est de l'ordre du diamètre de coeur dans la région complète d'observation. Ce champ peut donc être considéré comme le voisinage du champ critique supérieur où la solution d'Abrikosov pour le réseau de vortex est une bonne approximation.

Une autre observation importante [32, 33] est que l'effet de Haas-van Alphen dans l'état mixte persiste en dessous de H_{c2} non pas pour toutes les orbites électroniques mais pour celles qui ont un rayon (ou aire de section droite) relativement petit.

De nombreuses études ont été menées dans le but de comprendre l'influence du réseau de vortex sur les oscillations. Le point essentiel ici est la non-diagonalité du paramètre d'ordre matriciel dans la représentation de Landau empêchant une dérivation simple du spectre énergétique des quasi-particules dans l'état mixte. Le besoin de contourner ce problème a conduit à l'idée de travailler avec un spectre de type Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) sur-simplifié [38, 39, 40], ce qui est valable ou bien dans la région quasi-classique loin en dessous de H_{c2} où l'effet de Haas-van Alphen n'existe plus, ou bien dans la limite ultra-quantique ($\varepsilon_F \sim \omega_c$) avec seulement quelques ni-

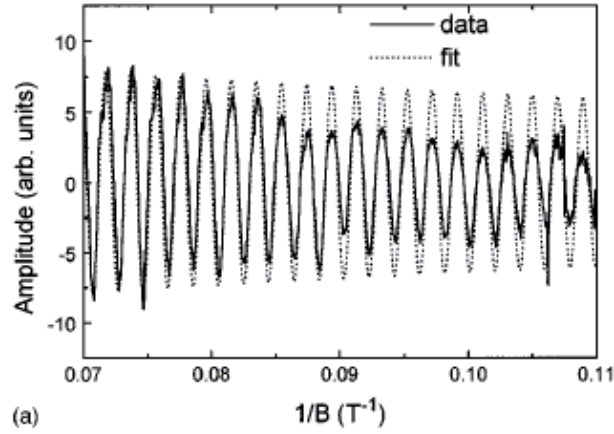


FIG. 4.1 – Oscillations d'aimantation dans l'état normal et dans l'état mixte supraconducteur de YNi_2B_2C (d'après la Réf. [32]). Le fit est une extension de l'état normal calculée à l'aide de la formule de Lifshitz-Kosevich. Les oscillations sont clairement atténuées dans l'état mixte ($B \leq 10.5$ T).

veaux de Landau remplis. Dans ce dernier cas, il existe toutefois des doutes quant à l'applicabilité de la théorie BCS et en outre quant à l'existence même de supraconductivité.

Nous devons mentionner également qu'une tentative a été menée pour développer une théorie pour des supraconducteurs anisotropes avec des noeuds dans le gap au niveau de la surface de Fermi loin en dessous de H_{c2} quand le rayon du coeur de vortex est beaucoup plus petit que la distance entre vortex, et quand nous pouvons assumer l'homogénéité dans l'espace du module du paramètre d'ordre [41]. Comme déclaré ci-dessus, cela ne correspond pas aux régions d'observation.

Une dérivation correcte a été proposée par Maki [42] et Stephen [43]. Ils ont établi une atténuation additionnelle de l'amplitude de Haas-van Alphen dans l'état mixte supraconducteur. Le paramètre d'ordre a été déterminé de façon self-consistante par Stephen, qui a permis l'identification de l'intervalle de champ près de H_{c2} où l'effet est susceptible d'être observé. Ces résultats mentionnés ci-dessus ont été obtenus en négligeant les éléments non-diagonaux de la matrice de self-énergie, où une sorte d'approximation sur un potentiel aléatoire dû au réseau de vortex a été utilisée. Quelque peu plus

tard, des calculs numériques pour le système 2D ont été établis [44, 45].

Un autre type de résultats analytiques (avec une atténuation du signal de Haas-van Alphen avec le champ magnétique décroissant moins rapidement dans la région supraconductrice) a été présenté dans le papier de Zhuravlev *et al.* [46], où l'approche ainsi appelée de cohérence de phase stricte a été appliquée. Bien que cette dernière ait un intérêt théorique indéniable, elle semble être moins réaliste que l'approximation d'un potentiel de réseau de vortex aléatoire qui a été utilisée dans le papier de Stephen.

Les traitements [43, 44, 45, 46] étaient limités par la condition $T > \omega_c/2\pi^2$ qui est nécessaire pour la convergence à basses températures. L'extension de la théorie à la région basse température $\omega_c > \Gamma_0 > T$ a été faite dans les papiers de Vavilov et Mineev [47, 48] et Mineev [49, 50] en introduisant l'épaisseur Γ_0 des niveaux de Landau dont l'origine est la diffusion sur les impuretés. Il a été montré qu'un état supraconducteur est sans gap dans la région de l'état mixte en dessous du champ critique supérieur si

$$\frac{H_{c2} - H}{H_{c2}} < \sqrt{\frac{\omega_c}{\varepsilon_F}} \ln \frac{\varepsilon_F}{\omega_c}, \quad (4.1)$$

où ε_F/ω_c est le nombre de niveaux de Landau sous le niveau de Fermi à $H = H_{c2}$. Cet intervalle de champ est négligeable pour tout supraconducteur de type II classique. Cependant, pour ces matériaux particuliers ultra purs avec un H_{c2} très élevé et un très petit ε_F , où l'effet de Haas-van Alphen a été observé dans l'état mixte supraconducteur, la valeur de $\sqrt{\varepsilon_F/\omega_c}$ est de l'ordre de, ou même plus petite, que dix et la théorie présentée a une région d'applicabilité sous le champ critique supérieure mesurable. Dans cette région, la contribution oscillante de la densité d'états et la réduction de l'amplitude des oscillations d'aimantation dans l'état supraconducteur est trouvée.

Il est également important de remarquer que les nombres des niveaux de Landau sous le niveau de Fermi sont différents pour les différentes bandes (ε_F dans (4.1) doit être diminuée de la valeur de l'énergie au centre de la bande considérée). C'est pourquoi la condition (4.1) est moins restrictive pour les orbites électronique avec un plus petit rayon ou aire de section droite. Ce fait correspond aux observations mentionnées ci-dessus.

Dans les états supraconducteurs non-conventionnels pour lesquels les lignes de section droite extrêmes de la surface de Fermi (dans le plan perpendiculaire au champ magnétique) coïncident avec les lignes de zéros du paramètre

d'ordre, les amplitudes des oscillations d'aimantation sont presque les mêmes que dans l'état normal. Dans l'état supraconducteur avec une autre distribution des zéros, la réduction des oscillations de Haas-van Alphen correspond qualitativement à la supraconductivité ordinaire.

La théorie de l'effet de Haas-van Alphen dans l'état mixte supraconducteur a été développée en détail par Mineev [50]. Dans le modèle isotrope 3D, l'expansion de Landau pour l'énergie libre de l'état mixte supraconducteur près du champ critique supérieur a été dérivée analytiquement en puissances du module au carré du paramètre d'ordre moyenné sur le réseau de vortex d'Abrikosov en prenant en compte la quantification en niveaux de Landau de l'énergie des quasi-particules.

La condition de validité pour une telle expansion a été établie et est donnée par l'équation (4.1). Comme dans le métal normal 3D, les termes oscillant avec le champ magnétique représentent de faibles corrections à l'énergie libre non-oscillante de l'état supraconducteur. Néanmoins, ils sont des fonctions du rapport $2\pi\varepsilon_F/\omega_c$, oscillant rapidement. À cause de cela, après différentiation par rapport au champ magnétique, la partie oscillante de l'aimantation $M = -\frac{\partial F}{\partial H}$ dans l'état mixte supraconducteur s'avère être plus importante que la partie de l'aimantation correspondante non-oscillante.

La théorie analytique de l'effet de Haas-van Alphen dans l'état mixte supraconducteur au voisinage du second champ critique est développée dans ce chapitre pour les supraconducteurs en couches 2D et quasi-2D. Notre traitement suit le papier [50] où les calculs correspondants avaient été faits pour les supraconducteurs 3D.

Dans ce chapitre, nous voulons déterminer l'effet de la basse dimensionnalité sur le facteur de réduction additionnel dû au réseau de vortex. Nous devons mentionner que sous la dénomination de systèmes 2D nous entendons des cristaux 3D en couches avec une interaction négligemment faible entre les couches, de telle sorte que l'état mixte en présence d'un champ magnétique perpendiculaire aux couches représente un réseau de vortex d'Abrikosov et non de Peierls. Le traitement du problème est effectué dans le cadre du formalisme de Gorkov pour un supraconducteur conventionnel.

4.2 Énergie libre

La densité d'énergie libre dans l'état mixte près du second champ critique H_{c2} est développée en puissances du module carré du paramètre d'ordre

moyenné sur le réseau de vortex d'Abrikosov [50]

$$F_s - F_n = \alpha \Delta^2 + \frac{\beta}{2} \Delta^4 \quad (4.2)$$

où

$$\alpha = \frac{1}{g} - \int e^{-\frac{H\rho^2}{2}} K_2(\mathbf{R}) d\mathbf{R} \quad (4.3)$$

et

$$\beta = \frac{1}{V} \int f^*(\mathbf{r}_1) f(\mathbf{r}_2) f^*(\mathbf{r}_3) f(\mathbf{r}_4) K_4(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 d\mathbf{r}_4. \quad (4.4)$$

Ici g est l'amplitude constante d'interaction de paire, $\rho^2 = R^2 - Z^2$,

$$f(\mathbf{r}) = 2^{1/4} \sum_{\nu=\text{entier}} \exp \left(i \frac{2\pi\nu}{a} y - \left(\frac{x}{l_H} + \frac{\pi\nu}{a} l_H \right)^2 \right)$$

est la solution d'Abrikosov pour le paramètre d'ordre pour un réseau de vortex carré où la longueur de la cellule élémentaire a est telle que $a^2 = \pi l_H^2$, $l_H \propto H^{-1/2}$ est la longueur magnétique et Δ est l'amplitude du paramètre d'ordre.

Les fonctions K_2 et K_4 peuvent être exprimées comme :

$$K_2(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=\pm 1} T \sum_n \tilde{G}^\sigma(\mathbf{R}, \tilde{\omega}_n) \tilde{G}^{-\sigma}(\mathbf{R}, -\tilde{\omega}_n) \quad (4.5)$$

$$G^\sigma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tilde{\omega}_n) = \exp \left(i \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} \mathbf{A}(\mathbf{s}) d\mathbf{s} \right) \tilde{G}^\sigma(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \tilde{\omega}_n), \quad (4.6)$$

$$K_4(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \frac{1}{2} \sum_{\sigma=\pm 1} T \sum_n G^\sigma(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tilde{\omega}_n) G^{-\sigma}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, -\tilde{\omega}_n) \\ \times G^\sigma(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4, \tilde{\omega}_n) G^{-\sigma}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_4, -\tilde{\omega}_n), \quad (4.7)$$

$$\tilde{\omega}_n = \omega_\nu + \Gamma_0 \operatorname{sgn} \omega_n, \quad \omega_n = \pi T(2n + 1). \quad (4.8)$$

Pour obtenir cette formule, le champ magnétique est supposé uniforme et coïncidant avec le champ externe, ce qui est une bonne approximation au voisinage de H_{c2} pour les supraconducteurs ayant un grand paramètre de Ginzburg-Landau.

Les coefficients α et β , qui dépendent de la dimensionnalité du système considéré via les fonctions de Green, sont calculés en Annexe B dans le régime $\mu \gg \omega_c$. En annexe, nous montrons que ces coefficients peuvent se décomposer en une partie dépendant de façon monotone du champ magnétique et une partie oscillant rapidement avec le champ magnétique :

$$\alpha(H, T) = \bar{\alpha}(H, T) + \alpha_{\text{osc}}(H, T), \quad (4.9)$$

$$\beta(H, T) = \bar{\beta}(H, T) + \beta_{\text{osc}}(H, T). \quad (4.10)$$

Pour un supraconducteur 2D, les différents paramètres ont pour expression

$$\bar{\alpha}(H, T) = \frac{g_0}{4} \frac{H - \bar{H}_{c2}(T)}{H_{c2o}} \quad (4.11)$$

où $\bar{H}_{c2}(T)$ est le second champ critique à basse température moyenné sur les oscillations (H_{c2o} est défini en Annexe B),

$$\alpha_{\text{osc}}(H, T) = -2\pi^{3/2} g_0 \frac{T}{\sqrt{\mu\omega_c}} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^l}{\sinh \lambda_{l+2}} \cos \left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c} \right) R_s(l+2) \times R_D(l+2) \quad (4.12)$$

et

$$\bar{\beta}(H, T=0) = g_0 \frac{\omega_c}{32\pi\mu} \frac{\Gamma_0^2 - (\mu_e H)^2}{[\Gamma_0^2 + (\mu_e H)^2]^2} \approx g_0 \frac{\omega_c}{32\pi\mu\Gamma_0^2} \quad (4.13)$$

expression valable pour $\mu_e H < \Gamma_0 < \omega_c$,

$$\beta_{\text{osc}}(H, T=0) = g_0 \frac{\omega_c}{4\pi\mu\Gamma_0^2} \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l R_D(l) \cos \left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c} \right) I \left(2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c} \right) \quad (4.14)$$

où

$$I(x) = \int_0^\infty \left[\frac{1}{(y+1)^3} + \frac{x}{(1+y)^2} \right] e^{-xy} dy$$

est une fonction bornée. La minimisation de l'énergie libre par rapport à Δ donne

$$F_s = F_n - \frac{\alpha^2}{2\beta}. \quad (4.15)$$

4.3 Aimantation

L'aimantation est définie par

$$M_s = -\frac{\partial F_s}{\partial H}.$$

Lors de la différentiation, nous ne conservons que les termes oscillant le plus rapidement

$$M_{s,\text{osc}} \simeq M_{n,\text{osc}} + \frac{\bar{\alpha}}{\bar{\beta}} \frac{\partial \alpha_{\text{osc}}}{\partial H} - \frac{\bar{\alpha}^2}{2\bar{\beta}^2} \frac{\partial \beta_{\text{osc}}}{\partial H}. \quad (4.16)$$

Ici $M_{n,\text{osc}}$ est la partie oscillante de l'aimantation dans l'état normal (calculée dans les chapitres 1 et 3). Comme dans le cas 3D [50], à $4\pi\Gamma_0 \sim \omega_c$, nous avons l'inégalité concernant les différentes contributions

$$|M_{n,\text{osc}}| > \left| \frac{\bar{\alpha}}{\bar{\beta}} \frac{\partial \alpha_{\text{osc}}}{\partial H} \right| > \left| -\frac{\bar{\alpha}^2}{2\bar{\beta}^2} \frac{\partial \beta_{\text{osc}}}{\partial H} \right| \quad (4.17)$$

avec une nouvelle condition plus restrictive que dans le cas 3D (voir équation (4.1)):

$$\frac{\bar{H}_{c2}(T) - H}{H_{c2o}} < \left(\frac{\omega_c}{\mu} \right)^{1/2}. \quad (4.18)$$

Dans cette condition, nous ne devons pas oublier que μ est le potentiel chimique moins l'énergie de bande ε_b , de telle sorte que cette limite est différente selon les bandes et moins restrictive pour les bandes ayant la plus petite valeur de $\mu - \varepsilon_b$. Avec la condition précédente, nous pouvons nous contenter de ne garder que les deux premières contributions dans (4.16); les oscillations d'aimantation sont donc données par

$$M_{s,\text{osc}} = M_{n,\text{osc}} + \frac{\bar{\alpha}}{\bar{\beta}} \frac{\partial \alpha_{\text{osc}}}{\partial H} = \sum_{l=1}^{+\infty} M_{nl} M_{sl}, \quad (4.19)$$

où

$$M_{nl} = \frac{1}{\pi} m_0 g_0 \mu \frac{(-1)^{l+1}}{l} R_T(l) R_s(l) R_D(l) \sin \left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c} \right) \quad (4.20)$$

et

$$M_{sl} = 1 - \sqrt{\pi} \left(\frac{4\pi\Gamma_0}{\omega_c} \right)^2 \sqrt{\frac{\mu}{\omega_c}} \frac{\bar{H}_{c2} - H}{H_{c2o}} \frac{l^2 R_T(l+2)}{(l+2) R_T(l)} \frac{R_s(l+2)}{R_s(l)} e^{-\frac{4\pi\Gamma_0}{\omega_c}} \quad (4.21)$$

où les facteurs $R_T(l)$, $R_s(l)$ et $R_D(l)$ respectivement dus à la température, à la levée de dégénérescence de spin, et aux impuretés sont définis dans le Chapitre 1.

Tous les calculs précédents peuvent être conduits de la même façon dans le cas d'un métal quasi-2D. Nous obtenons pour la contribution due au réseau de vortex

$$M_{sl}^{q2D} = M_{sl}^{2D}. \quad (4.22)$$

L'intervalle de champ (4.18) pour lequel les résultats (4.19), (4.20), (4.21) sont valables est minuscule pour les supraconducteurs de type II ordinaires. Cependant, pour ces matériaux particuliers ultrapurs avec un H_{c2} très élevé et des très petits ε_F , $\sqrt{\mu/\omega_{c2}} \sim 10$ et la théorie présentée ici a une région d'applicabilité significative sous le second champ critique.

Conclusion

Nous avons développé la théorie de l'effet de Haas-van Alphen dans l'état mixte supraconducteur des systèmes de basse dimensionnalité, prenant en considération la température finie, l'élargissement des niveaux de Landau dû à la diffusion sur les impuretés, et la levée de dégénérescence de spin paramagnétique. Nous avons trouvé un terme de suppression additionnelle des oscillations dû à la distribution inhomogène du paramètre d'ordre dans l'état mixte. Le critère d'observation des oscillations quantiques de l'aimantation près du second champ critique dans les supraconducteurs quasi-2D est plus restrictif que dans le cas des supraconducteurs 3D.

Chapitre 5

Oscillations quantiques magnétiques de la conductivité longitudinale σ_{zz}

Dans ce chapitre, les oscillations quantiques magnétiques de la magnéto-résistance longitudinale ρ_{zz} dans les métaux quasi-2D pour un champ magnétique perpendiculaire aux couches sont étudiées dans le cadre de la théorie du transport quantique. Nous montrons que les oscillations Shubnikov-de Haas deviennent gigantesques dans la limite $t \ll \omega_c$. À fort champ magnétique et à basse température, les minima de $\sigma_{zz} = \rho_{zz}^{-1}$ exhibent un comportement thermiquement activé en présence d'oscillations de potentiel chimique négligeables. Les questions concernant la self-énergie due aux impuretés dans la limite 2D sont abordées. Ce Chapitre a été publié dans la Réf. [51].

5.1 Problématique

Dans les conducteurs organiques quasi-2D, c'est typiquement la composante de résistivité dans la direction perpendiculaire aux couches ρ_{zz} qui est étudiée expérimentalement [10], quand le courant électrique et le champ magnétique sont simultanément parallèles à la même direction z (voir la Fig. D.1 dans l'annexe D).

Récemment, J. Wosnitza *et al.* [52] et M.-S. Nam *et al.* [53] ont rapporté des oscillations inhabituellement fortes de ρ_{zz} dans le conducteur organique quasi-2D β'' -(BEDT-TTF)₂SF₅CH₂CF₂SO₃ pour des champs magnétiques

élevées et des basses températures. Les auteurs de la Réf. [52] ont appelé leur observation une transition métal-isolant induite par le champ magnétique. M.-S. Nam *et al.* [53] ont proposé que le comportement de type isolant provenait de la présence d'un gap dans la densité d'états en mettant en évidence le comportement thermiquement activé des maxima de ρ_{zz} (ou des minima de la conductivité $\sigma_{zz} = \rho_{zz}^{-1}$), quand le potentiel chimique prend des valeurs entre les niveaux de Landau. Leur interprétation repose sur l'existence d'oscillations de potentiel chimique avec le champ magnétique négligemment faibles à cause de la partie quasi-1D de la surface de Fermi qui joue le rôle d'un réservoir d'états fini. L'hypothèse d'un potentiel chimique presque fixe est confortée par l'observation d'oscillations d'aimantation en forme de dents de scie inversées précisément dans ce même composé [52, 54] (voir la Fig. 5.1), ce qui est une forte indication d'oscillations de potentiel chimique négligemment petites (voir par exemple [17] et les chapitres précédents).

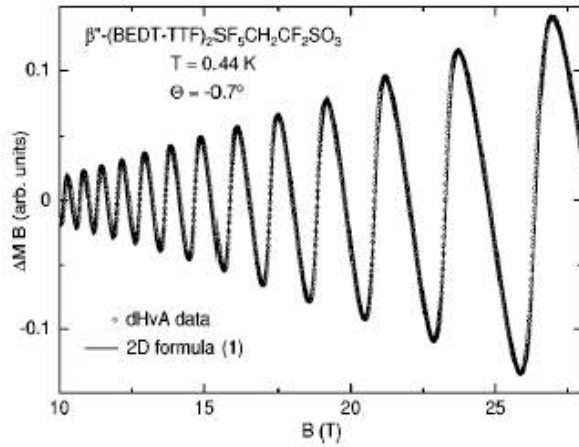


FIG. 5.1 – Oscillations de Haas-van Alphen en dents de scie dans le conducteur organique β'' -(BEDT-TTF) $_2$ SF $_5$ CH $_2$ CF $_2$ SO $_3$ (d'après la Réf. [54]). Les données expérimentales (cercles ouverts) concordent avec la formule 2D de Shoenberg (ligne solide) avec un potentiel chimique fixé.

Quelques articles [12, 55, 56, 57, 58] s'intéressent à l'étude théorique des oscillations de la magnétoconductivité σ_{zz} dans les métaux quasi-2D. Très récemment, P.D. Grigoriev *et al.* ont proposé dans une série d'articles [55, 56, 57] une explication d'autres caractéristiques concernant les oscillations

de σ_{zz} telles que le décalage dépendant du champ des battements et les oscillations lentes de σ_{zz} (voir la Fig. 5.2), dans le cadre à la fois de la théorie du transport semi-classique de Boltzmann [55] et de la théorie du transport quantique [56, 57]. Ils ont montré que ces caractéristiques observées dans de nombreux conducteurs organiques présentant une structure en couches autres que β'' -(BEDT-TTF) $_2$ SF $_5$ CH $_2$ CF $_2$ SO $_3$ provenaient de la basse dimensionnalité prononcée du spectre énergétique (2.1) dans la limite de bas champ magnétique (ou grand t) $\omega_c \leq 4\pi t$.

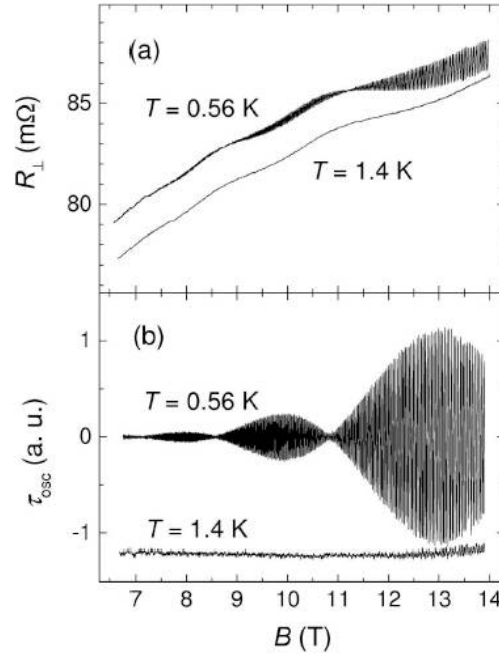


FIG. 5.2 – Oscillations de la magnétorésistance (a) et de l'aimantation (b) dans le conducteur organique β -(BEDT-TTF) $_2$ IBr $_2$ (d'après la Réf. [59]). Les oscillations lentes de la magnétorésistance sont indépendantes de la température (a). De plus, les battements des oscillations de Haas-van Alphen (b) sont légèrement décalés par rapport aux battements des oscillations Shubnikov-de Haas (a) (courbes à $T = 0.56$ K). Ces deux particularités sont liées à la basse dimensionnalité du composé.

Il est utile de faire remarquer que cette dernière condition n'est certainement pas remplie dans l'intervalle de champs magnétiques où les expériences des Réfs. [52, 53] se sont déroulées. L'observation d'extrema très piqués dans les oscillations de Haas-van Alphen [52, 54] (faites à plus bas champ magnétique, voir la Fig. 5.1) indique que la limite 2D (i.e. $4\pi t \ll \omega_c$) est déjà très probablement atteinte [17].

Dans ce chapitre, nous étudions les oscillations de la magnétoconductivité en ayant pour but de donner une explication aux expériences rapportées par J. Wosnitza *et al.* [52] et M.-S. Nam *et al.* [53]. Les calculs des oscillations Shubnikov-de Haas de la magnétoconductivité σ_{zz} dans les métaux quasi-2D sont établis dans le cadre de la théorie du transport quantique pour une diffusion sur les impuretés à courte portée. Dans la section suivante, l'expression générale pour σ_{zz} est présentée dans une forme plus pratique valable pour $\mu \gg \omega_c$ et une self-énergie arbitraire. Nous démontrons en section 5.3 l'existence d'un comportement thermiquement activé pour les minima de la magnétoconductivité dans les métaux quasi-2D de bonne qualité et pour des champs magnétiques élevés. Nous montrons que ce comportement n'est pas relié à la présence d'un gap dans la densité d'états mais plutôt à la présence d'une sorte de pseudo-gap dans la magnétoconductivité spectrale $\sigma_{zz}(\mu/\omega_c)$. En section 5.4, la self-énergie due aux impuretés pour les métaux quasi-2D est étudiée dans le cadre de l'approximation de Born self-consistante. Enfin, en section 5.5, nos résultats sont discutés à la lumière des observations expérimentales dans β'' -(BEDT-TTF)₂SF₅CH₂CF₂SO₃ [52, 53]. La description détaillée du modèle microscopique étudié et les calculs du transport correspondants sont donnés en Annexes C et D.

5.2 La conductivité longitudinale σ_{zz}

En absence de corrections de vertex, la conductivité longitudinale σ_{zz} dans les métaux quasi-2D sous un champ magnétique perpendiculaire aux couches peut être exprimée comme (voir Annexes C et D)¹

1. Les constantes de Planck, de Boltzmann et la vitesse de la lumière sont prises égales à l'unité tout au long de ce chapitre.

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} = e^2 \frac{g_0}{2} \omega_c \sum_{n,\sigma} \int \frac{dp_z}{2\pi} v_z^2(p_z) \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} (-n'_F(\varepsilon)) \\ \times \left(G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^R G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^A - \Re \left(G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^R \right)^2 \right), \end{aligned} \quad (5.1)$$

où la sommation doit s'effectuer sur l'énergie ε et les nombres quantiques magnétiques n des niveaux de Landau, les projections de spin $\sigma = \pm 1$, et le moment intercouche p_z . Ici $\Re$ désigne la partie réelle, g_0 est la densité d'états en absence de champ magnétique, $n'_F(\varepsilon)$ est la dérivée de la fonction de distribution de Fermi-Dirac

$$n'_F(\varepsilon) = -\frac{1}{4T \cosh^2(\varepsilon/2T)}, \quad (5.2)$$

et T la température. Les limites d'intégration sur p_z sont $[-\pi/s, +\pi/s]$, et celles sur ε sont $[-\infty, +\infty]$. Les fonctions G^R et G^A sont respectivement les fonctions de Green retardées et avancées définies par

$$G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^A = \left(G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^R \right)^* = \frac{1}{\varepsilon - \xi_{\sigma,n,p_z} + i\Gamma_{\varepsilon+\mu}}, \quad (5.3)$$

où

$$\xi_{\sigma,n,p_z} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega_c - 2t \cos p_z s - \mu - \sigma \mu_e H, \quad (5.4)$$

μ_e est le moment magnétique de l'électron, et $\Sigma(\varepsilon) = i\Gamma_\varepsilon$ est la self-énergie due aux impuretés dépendant de l'énergie. La partie réelle de la self-énergie Σ est incluse dans la définition du potentiel chimique μ . Dans notre modèle, Σ est indépendante des nombres quantiques n, p_z, σ car nous considérons uniquement la diffusion sur les impuretés comme des points. Finalement, v_z est la vitesse dans la direction z

$$v_z(p_z) = \frac{\partial \xi_{\sigma,n,p_z}}{\partial p_z} = 2st \sin p_z s. \quad (5.5)$$

La formule (5.1) est moitié plus petite que la formule utilisée par Grigoriev *et al.* [57] sans avoir été dérivée.

Dans l'Éq. (5.1), deux termes contribuent à σ_{zz} : un terme provenant du produit des fonctions de Green retardées et avancées (contribution que nous appelons par la suite *RA*), un autre terme provenant du produit de

deux fonctions de Green retardées (ou deux fonctions de Green avancées ; nous appelons ces contributions RR). Plus loin, nous choisissons de calculer séparément ces deux termes RR et RA afin de voir clairement comment ils contribuent chacun à l'expression finale :

$$\sigma_{RA} = e^2 \frac{g_0}{2} \omega_c \sum_{n,\sigma} \int \frac{dp_z}{2\pi} v_z^2(p_z) \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} (-n'_F(\varepsilon)) G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^R G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^A \quad (5.6)$$

et

$$\sigma_{RR} = e^2 \frac{g_0}{2} \omega_c \sum_{n,\sigma} \int \frac{dp_z}{2\pi} v_z^2(p_z) \int \frac{d\varepsilon}{2\pi} n'_F(\varepsilon) \Re (G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^R)^2. \quad (5.7)$$

À la différence du cas des métaux sans champ magnétique où les contributions de type RR sont absentes (voir par exemple B.L. Altshuler *et al.* [60]), nous montrons dans la deuxième partie de ce chapitre que les termes RR contribuent ici à la conductivité totale, et ce principalement dans la limite 2D.

Désormais, nous réécrivons les expressions (5.6) et (5.7) en effectuant la sommation sur les niveaux de Landau n . Par commodité, nous négligeons à partir de maintenant la levée de dégénérescence de spin, qui peut être prise en compte relativement facilement dans les calculs suivants. Pour transformer la somme sur les niveaux de Landau, nous utilisons la formule sommatoire de Poisson

$$\sum_{n=0}^{+\infty} f(n) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \int_a^{+\infty} du f(u) e^{-2\pi i l u}, \quad (5.8)$$

où a est un nombre quelconque compris entre -1 et 0 , pour obtenir pour la première contribution RA

$$\begin{aligned} \sigma_{RA} = e^2 g_0 \omega_c \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \int \frac{dp_z}{2\pi} v_z^2(p_z) \int d\varepsilon (-n'_F(\varepsilon)) \int \frac{du}{2\pi} e^{-2\pi i l u} \\ \times \frac{1}{(\varepsilon - \xi_{u,p_z} - i\Gamma_{\varepsilon+\mu})(\varepsilon - \xi_{u,p_z} + i\Gamma_{\varepsilon+\mu})}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

En effectuant le changement de variable u en $x = \xi_{u,p_z} - \varepsilon$, et en remplaçant la limite inférieure de l'intégrale sur la variable x par $-\infty$ car nous considérons le régime pertinent $\mu \gg \omega_c$ pour les oscillations Shubnikov-de Haas, nous obtenons

$$\sigma_{RA} = e^2 g_0 \sum_{l=-\infty}^{+\infty} (-1)^l \int \frac{dp_z}{2\pi} v_z^2(p_z) e^{-2\pi i l \frac{2t}{\omega_c} \cos p_z s} \int d\varepsilon (-n'_F(\varepsilon)) e^{-2\pi i l \frac{\mu+\varepsilon}{\omega_c}} \\ \times \int \frac{dx}{2\pi} e^{-2\pi i l \frac{x}{\omega_c}} \frac{1}{(x - i\Gamma_{\varepsilon+\mu})(x + i\Gamma_{\varepsilon+\mu})}. \quad (5.10)$$

Un calcul direct de résidus pour l'intégrale sur x conduit à

$$\sigma_{RA} = e^2 \frac{g_0}{2} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} (-1)^l \int \frac{dp_z}{2\pi} v_z^2(p_z) e^{-2\pi i l \frac{2t}{\omega_c} \cos p_z s} \int d\varepsilon \frac{(-n'_F(\varepsilon))}{\Gamma_{\varepsilon+\mu}} \\ \times e^{-2\pi i l \frac{\varepsilon+\mu}{\omega_c}} e^{-2\pi |l| \frac{\Gamma_{\varepsilon+\mu}}{\omega_c}}. \quad (5.11)$$

Regroupant les l positifs et négatifs, et introduisant la fonction de Bessel du premier ordre $J_1(x)$ définie par

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \sin^2 \varphi e^{-ix \cos \varphi} = \frac{J_1(x)}{x},$$

nous réécrivons l'Éq. (5.11) comme

$$\sigma_{RA} = \sigma_0 \int d\varepsilon (-n'_F(\varepsilon)) \frac{\Gamma_0}{\Gamma_{\varepsilon+\mu}} \left[1 + \frac{\omega_c}{\pi t} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^l}{l} J_1 \left(\frac{4\pi l t}{\omega_c} \right) e^{-2\pi l \frac{\Gamma_{\varepsilon+\mu}}{\omega_c}} \right. \\ \left. \times \cos \left(2\pi l \frac{\varepsilon + \mu}{\omega_c} \right) \right], \quad (5.12)$$

où

$$\sigma_0 = e^2 g_0 \frac{t^2 s}{\Gamma_0} = e^2 \frac{g_0}{s} \langle v_z^2 \rangle \tau_0 \quad (5.13)$$

est la conductivité longitudinale en absence de champ magnétique, $\Gamma_0 = 1/2\tau_0$ est la partie imaginaire de la self-énergie due aux impuretés à champ magnétique nul, τ_0 le temps de vie moyen des quasi-particules également à champ magnétique nul. Quant à σ_{RR} , nous calculons la somme sur les niveaux de Landau de la même façon pour obtenir

$$\sigma_{RR} = \sigma_0 \int d\varepsilon (-n'_F(\varepsilon)) \frac{2\Gamma_0}{t} \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l J_1 \left(\frac{4\pi l t}{\omega_c} \right) e^{-2\pi l \frac{\Gamma_{\varepsilon+\mu}}{\omega_c}} \\ \times \cos \left(2\pi l \frac{\varepsilon + \mu}{\omega_c} \right). \quad (5.14)$$

Comparons les deux contributions RA et RR . Si nous considérons la limite de champ magnétique nul, la contribution σ_{RR} disparaît et nous retrouvons la formule de Drude habituelle donnée par

$$\sigma_{zz} = \sigma_{RA} = \sigma_0. \quad (5.15)$$

Nous retrouvons qu'en l'absence de champ magnétique la contribution RA correspond à la contribution semi-classique du transport [60]. Le terme RR n'a pas d'équivalent semi-classique. Dans la limite 3D (i.e. $4\pi t \gg \omega_c$), ou dans la limite sale $2\pi\Gamma_\varepsilon \gg \omega_c$, la contribution RR ne représente en réalité qu'une faible correction par rapport à la contribution principale RA . Toutefois, pour un champ magnétique arbitaire, la comparaison des deux contributions n'est pas triviale, car les deux termes sont exprimés sous forme de série alternée. Nous démontrons dans la section suivante que la contribution RR devient plutôt significative particulièrement dans la limite 2D quand $4\pi t \ll \omega_c$.

5.3 σ_{zz} dans la limite 2D

Dans la limite 2D, $\omega_c \gg 4\pi t$, les deux contributions σ_{RA} et σ_{RR} (données par les Éqs. (5.12) et (5.14)) se simplifient car les facteurs faisant intervenir les fonctions de Bessel peuvent se développer comme $J_1(x) \sim x/2$ pour les petites valeurs de l'argument x :

$$\sigma_{RA} = \sigma_0 \int d\varepsilon (-n'_F(\varepsilon)) \frac{\Gamma_0}{\Gamma_{\varepsilon+\mu}} \left[1 + 2 \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l e^{-2\pi l \frac{\Gamma_{\varepsilon+\mu}}{\omega_c}} \cos \left(2\pi l \frac{\varepsilon + \mu}{\omega_c} \right) \right] \quad (5.16)$$

et

$$\sigma_{RR} = \sigma_0 \int d\varepsilon (-n'_F(\varepsilon)) \frac{4\pi\Gamma_0}{\omega_c} \sum_{l=1}^{+\infty} l (-1)^l e^{-2\pi l \frac{\Gamma_{\varepsilon+\mu}}{\omega_c}} \cos \left(2\pi l \frac{\varepsilon + \mu}{\omega_c} \right). \quad (5.17)$$

Dans cette limite, la partie de σ_{zz} oscillant avec le champ devient indépendante de l'intégrale de saut intercouches t , qui intervient uniquement dans le facteur de normalisation à champ magnétique nul σ_0 . Cela établit clairement l'origine physique des oscillations de σ_{zz} comme étant la quantification du mouvement dans le plan perpendiculaire au champ magnétique, qui affecte le transport intercouches par l'intermédiaire du spectre des quasi-particules (2.1).

Dans le but de comparer les deux contributions σ_{RA} et σ_{RR} pour un champ magnétique arbitraire tel que $\omega_c \gg 4\pi t$, nous effectuons la sommation sur les entiers l pour chaque contribution. Ainsi, la magnétoconductivité totale prend la forme

$$\sigma_{zz} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon (-n'_F(\varepsilon - \mu)) [\sigma_{RA}(\varepsilon) + \sigma_{RR}(\varepsilon)], \quad (5.18)$$

où

$$\sigma_{RA}(\varepsilon) = \sigma_0 \frac{\Gamma_0}{\Gamma_\varepsilon} \frac{\sinh\left(2\pi \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right)}{\cosh\left(2\pi \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right) + \cos\left(2\pi \frac{\varepsilon}{\omega_c}\right)} \quad (5.19)$$

et

$$\sigma_{RR}(\varepsilon) = -\sigma_0 \frac{2\pi\Gamma_0}{\omega_c} \frac{1 + \cosh\left(2\pi \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right) \cos\left(2\pi \frac{\varepsilon}{\omega_c}\right)}{\left(\cosh\left(2\pi \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right) + \cos\left(2\pi \frac{\varepsilon}{\omega_c}\right)\right)^2}. \quad (5.20)$$

A température nulle, les oscillations de magnétoconductivité sont données par

$$\sigma_{zz} = \sigma_{RA}(\mu) + \sigma_{RR}(\mu) = \sigma_{zz}(\mu). \quad (5.21)$$

Comme déjà noté à la fin de la section précédente, le terme σ_{RR} contribue de façon négligeable à la conductivité totale σ_{zz} dans la limite sale $2\pi\Gamma_\varepsilon \gg \omega_c$. À partir de l'Éq. (5.20) nous pouvons voir qu'à température nulle σ_{RR} donne toujours une contribution négative à $\sigma_{zz}(\mu)$ quand $\mu \sim n\omega_c$, et une contribution positive quand $\mu \sim (n + 1/2)\omega_c$.

Quand $\omega_c \gg 2\pi\Gamma_\varepsilon$, $\omega_c \gg 4\pi t$ et $\mu \neq (n + 1/2)\omega_c$, les deux contributions RA et RR sont, au premier ordre, opposées de telle sorte que la magnétoconductivité totale à température nulle disparaît périodiquement, $\sigma_{zz}(\mu) \rightarrow 0$ (voir Fig. 5.3). Une telle limite suggère l'existence d'un comportement particulier pour la forme des oscillations Shubnikov-de Haas à basses températures, ce qui est l'objet du développement qui suit.

Considérons désormais que les oscillations de la self-énergie sont négligemment faibles, c'est-à-dire $\Gamma_\varepsilon \approx \Gamma_0$. Cette hypothèse n'est pas un ingrédient indispensable pour notre théorie. Nous l'utilisons seulement dans le but d'étudier le comportement de σ_{zz} à forts champs magnétiques à un niveau plus quantitatif. Néanmoins, nous prouvons dans la section prochaine que la relation $\Gamma_\varepsilon \approx \Gamma_0$ est correcte en particulier dans l'approximation de Born self-consistante en présence d'un réservoir d'états dans les conditions de l'expérience [53].

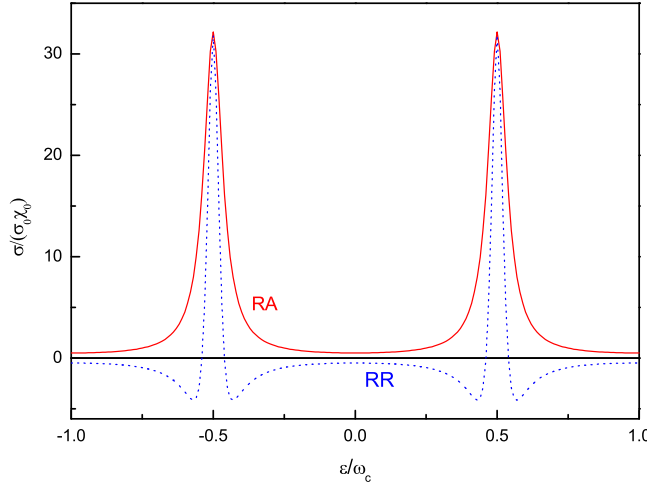


FIG. 5.3 – Les deux contributions σ_{RA} (ligne solide) et σ_{RR} (ligne pointillée) pour $2\pi\Gamma_\varepsilon/\omega_c = 0.25$. Elles se compensent mutuellement entre les niveaux de Landau et s'ajoutent sur les niveaux de Landau.

L'analyse numérique de la fonction $\sigma_{zz}(\varepsilon)$ révèle l'existence de deux régimes pour la forme des oscillations caractérisés par le rapport $\alpha = 2\pi\Gamma_0/\omega_c$:

- Un régime bas champ magnétique $\omega_c < 2\pi\Gamma_0$ (ou $\alpha > 1$), pour lequel la contribution RR représente une correction comparée à la contribution RA , et cela pour l'intervalle entier en énergie ε ,
- Un régime fort champ magnétique défini par $\omega_c > 2\pi\Gamma_0$ (ou $\alpha < 1$), pour lequel des pseudo-gaps centrés sur les énergies $\varepsilon = n\omega_c$ existent dans la fonction spectrale $\sigma_{zz}(\varepsilon)$.

Dans la Fig. 5.4 nous avons représenté la fonction $\sigma_{zz}(\varepsilon)$ pour différentes valeurs du champ magnétique, en utilisant les valeurs expérimentales données dans la Réf. [53], à savoir $\Gamma_0 = 0.22$ meV et $m^* = 1.96 m_e$ (ici m_e est la masse de l'électron). Comme montré en Fig. 5.4, l'ouverture d'un pseudo-gap se produit pour un champ magnétique d'environ 20 T, ce qui correspond à un paramètre $\alpha \sim 1$. La largeur du pseudo-gap croît clairement avec le champ magnétique.

Un tel comportement à fort champ peut aussi être déduit à partir de considérations analytiques. En effet, la présence d'un pseudo-gap dans $\sigma_{zz}(\varepsilon)$

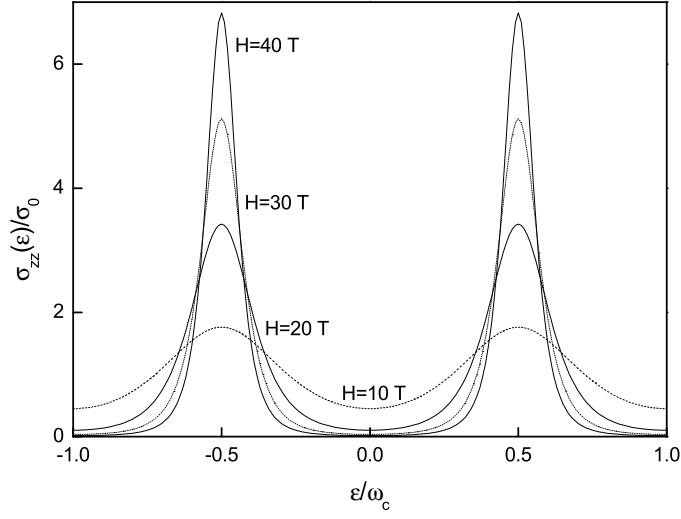


FIG. 5.4 – *Présence d'un pseudo-gap dans la fonction spectrale $\sigma_{zz}(\varepsilon)$ pour des champs magnétiques élevés. L'ouverture du pseudo-gap se produit pour 20 T, c'est-à-dire pour un paramètre $\alpha = 2\pi\Gamma_0/\omega_c \approx 1$. Ainsi, les autres champs magnétiques $H = 10, 30$ et 40 T correspondent respectivement à $\alpha = 2, 2/3$ et 0.5 .*

est claire si nous écrivons la conductivité totale comme

$$\sigma_{zz}(\varepsilon) = \sigma_0 \left[\frac{\sinh \alpha - \alpha \cos \left(2\pi \frac{\varepsilon}{\omega_c} \right)}{\cosh \alpha + \cos \left(2\pi \frac{\varepsilon}{\omega_c} \right)} - \alpha \frac{\sin^2 \left(2\pi \frac{\varepsilon}{\omega_c} \right)}{\left(\cosh \alpha + \cos \left(2\pi \frac{\varepsilon}{\omega_c} \right) \right)^2} \right]. \quad (5.22)$$

Pour $\varepsilon \sim n\omega_c$ et $\alpha < 1$, $\sigma_{zz}(\varepsilon)$ devient très petit sur une gamme en énergie, qui devient de plus en plus étendue lorsque α diminue.

Des valeurs si faibles pour σ_{zz} quand $\alpha < 1$ conduisent à des maxima de la magnétorésistance ρ_{zz} gigantesques à basses températures quand $\mu/\omega_c \sim n$. Pour illustrer le comportement à température finie, nous avons calculé numériquement σ_{zz} en utilisant les Éqs. (5.18)-(5.20) toujours en prenant les données expérimentales [53]. Nous avons estimé la valeur du potentiel chimique à $\mu \approx 11.8$ meV (pour l'étude numérique, nous avons explicitement

considéré que les oscillations du potentiel chimique sont négligemment petites ; les effets des oscillations du potentiel chimique sont évoqués dans la discussion). Dans la Fig. 5.5, la forme générale des oscillations de $\rho_{zz} = \sigma_{zz}^{-1}$ pour des oscillations de self-énergie négligeables est représentée dans la gamme de champs magnétiques 20 - 60 T. Dans cette figure, nous avons choisi exactement les mêmes températures que dans la Fig. 1 de la Réf. [53] (reproduite quelques pages plus loin en Fig. 5.8) dans le but de comparer plus facilement les formes expérimentales et théoriques des oscillations de magnétorésistance.

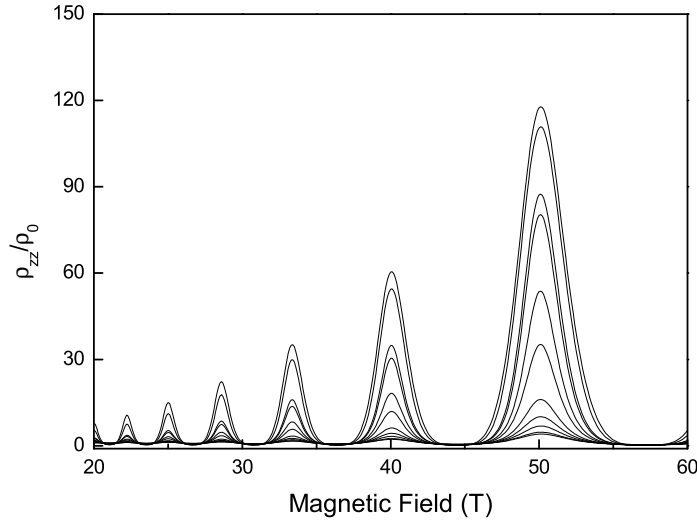


FIG. 5.5 – Oscillations de la magnétorésistance $\rho_{zz}/\rho_0 = \sigma_0/\sigma_{zz}$ comme fonction du champ magnétique pour différentes températures (à partir du haut, 0.59, 0.94, 1.48, 1.58, 1.91, 2.18, 2.68, 3.03, 3.38, 3.80, et 4.00 K).

Comme dans la Réf. [53], nous avons également étudié numériquement la dépendance en température des maxima de résistivité. La présence d'un pseudo-gap pour des champs magnétiques élevés donne lieu à température finie à un comportement thermiquement activé des minima de conductivité pour les champs magnétiques $\mu \sim n\omega_c$. En effet, d'après l'Éq. (5.18) et quand $\mu \sim n\omega_c$ (alors les minima de $\sigma_{zz}(\varepsilon)$ sont en correspondance avec le maximum de $-n'_F(\varepsilon)$), le principal moyen de conduction est l'excitation thermique des quasi-particules aux bords du pseudo-gap. La figure 5.6 montre $\ln \sigma_{zz}$ versus

$1/T$ pour les valeurs entières $\mu/\omega_c = n = 4, 5, 6, 7$ et 8 . Dans cette figure, une dépendance linéaire est clairement trouvée pour l'intervalle de températures $2 < T < 4$ K (ou $0.25 < T^{-1} < 0.5$ K $^{-1}$), mettant en évidence le comportement activé des minima de σ_{zz} . À très basses températures $T < 2$ K (ou $T^{-1} > 0.5$ K $^{-1}$), σ_{zz} sature (Fig. 5.6) : les quasi-particules dont l'énergie se trouve dans le pseudo-gap contribuent principalement à la conduction.

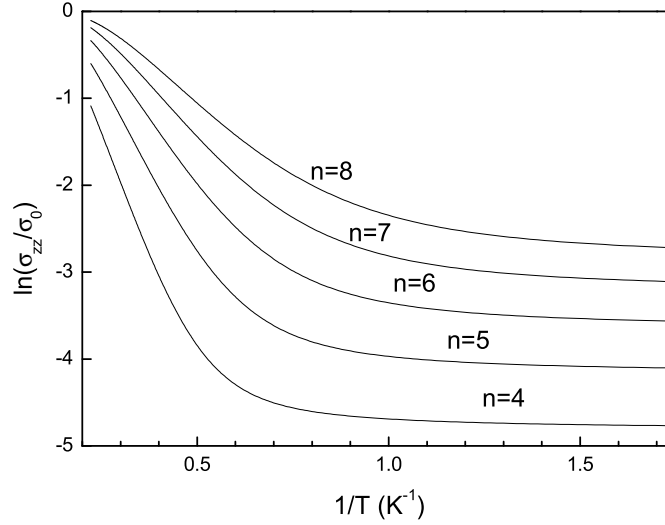


FIG. 5.6 – Dépendance de $\ln \sigma_{zz}/\sigma_0$ versus $1/T$ (T en Kelvins) pour les entiers $n = \mu/\omega_c$ (maxima de résistivité).

5.4 La self-énergie due aux impuretés

Pour l'étude numérique faite dans la section précédente, nous avons fait l'hypothèse que les oscillations de self-énergie sont très faibles dans la limite 2D $\omega_c \gg 4\pi t$. Le but de cette section est de justifier un tel choix dans le composé organique β'' -(BEDT-TTF) $_2$ SF $_5$ CH $_2$ CF $_2$ SO $_3$. La self-énergie due aux impuretés est calculée dans l'approximation de Born self-consistente. Dans les métaux quasi-2D, nous devons habituellement prendre en compte la présence d'un réservoir d'états électroniques intrinsèque [12, 54]. Dans un

modèle de centres de diffusion sur les impuretés à courte portée, la partie imaginaire Γ de la self-énergie est directement proportionnelle à la densité d'états totale g^{tot} , qui est la somme de la densité d'états quasi-2D $\tilde{g}$ et de la densité d'états g^R du réservoir indépendante du champ magnétique. En supposant que la même relation de proportionnalité est valable à la fois en présence et en absence de champ magnétique, nous avons

$$\frac{\Gamma_\varepsilon}{\Gamma_0} = \frac{g^{tot}(\varepsilon)}{g_0^{tot}} = \frac{1}{1+R} \left(R + \frac{\tilde{g}(\varepsilon)}{\tilde{g}_0} \right), \quad (5.23)$$

où $R = g^R/\tilde{g}_0$ est un paramètre mesurant la force du réservoir, $\tilde{g}(\varepsilon)$ est la densité d'états du métal quasi-2D en présence de champ magnétique, et $\tilde{g}_0 = g_0/s$ la densité d'états du métal quasi-2D à champ magnétique nul. Par simplicité, nous négligeons la dépendance de la densité d'états du réservoir g^R avec l'énergie. La densité d'états quasi-2D $\tilde{g}(\varepsilon)$ dépend de la self-énergie due aux impuretés via l'expression

$$\tilde{g}(\varepsilon) = \frac{i}{2\pi} \sum_{\sigma, n, p_z} (G_{\sigma, n, p_z, \varepsilon - \mu}^R - G_{\sigma, n, p_z, \varepsilon - \mu}^A), \quad (5.24)$$

qui pour $\mu \gg \omega_c$ peut également s'écrire (sans levée de dégénérescence de spin) après application de la formule sommatoire de Poisson

$$\tilde{g}(\varepsilon) = \tilde{g}_0 \left[1 + 2 \sum_{l=1}^{+\infty} \int s \frac{dp_z}{2\pi} (-1)^l e^{-2\pi l \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}} \cos \left(\frac{2\pi l}{\omega_c} (\varepsilon + 2t \cos p_z s) \right) \right]. \quad (5.25)$$

Ainsi, après sommation sur le moment p_z nous obtenons [9]

$$\tilde{g}(\varepsilon) = \tilde{g}_0 \left[1 + 2 \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l J_0 \left(\frac{4\pi l t}{\omega_c} \right) e^{-2\pi l \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}} \cos \left(2\pi l \frac{\varepsilon}{\omega_c} \right) \right], \quad (5.26)$$

où J_0 est la fonction de Bessel d'ordre zéro. La combinaison des Éqs. (5.23) et (5.26) conduit à une équation self-consistante compliquée à résoudre pour déterminer la self-énergie due aux impuretés Γ_ε .

Pour $4\pi t \geq \omega_c$, il est raisonnable de ne garder que le premier terme $l = 1$ dans la somme discrète de l'Éq. (5.26). Comme résultat, la self-énergie due aux impuretés est une fonction faiblement oscillante de H . En l'absence de

réservoir ($R = 0$), cette dépendance en champ doit être prise en compte dans les expressions (5.12) et (5.14) de la conductivité longitudinale σ_{zz} . Ce régime a déjà été étudié par Grigoriev *et al.* [55, 56, 57] qui ont montré que la différence en phase des battements dépendante du champ entre le signal de Haas-van Alphen et le signal Shubnikov-de Haas, ainsi que les faibles oscillations de σ_{zz} sont précisément des traits caractéristiques des oscillations Shubnikov-de Haas dans les métaux de basse dimensionnalité.

En général, nous devons prendre en compte de nombreux termes dans la somme discrète de l'Éq. (5.26). En sommant sur les entiers l avant d'effectuer l'intégration sur le moment p_z dans l'Éq. (5.25), nous pouvons écrire la densité d'états quasi-2D $\tilde{g}(\varepsilon)$ sous une forme différente et plus pratique pour l'étude du cas général

$$\tilde{g}(\varepsilon) = \tilde{g}_0 \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{\sinh\left(2\pi \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right)}{\cosh\left(2\pi \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right) + \cos\left(2\pi \frac{\varepsilon}{\omega_c} + \frac{4\pi t}{\omega_c} \cos \varphi\right)}, \quad (5.27)$$

de telle sorte que l'équation self-consistante qu'il est nécessaire de résoudre dans les métaux quasi-2D devient

$$\frac{\Gamma_\varepsilon}{\Gamma_0} = \frac{1}{1+R} \left(R + \int \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{\sinh\left(2\pi \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right)}{\cosh\left(2\pi \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right) + \cos\left(2\pi \frac{\varepsilon}{\omega_c} + \frac{4\pi t}{\omega_c} \cos \varphi\right)} \right). \quad (5.28)$$

Pour $\omega_c \ll 2\pi\Gamma_0$, les niveaux de Landau sont fortement dispersés par la diffusion sur les impuretés et les oscillations de la self-énergie sont négligemment faibles; il ne s'agit pas du régime intéressant. L'expression (5.28) permet l'étude de la self-énergie pour des champs magnétiques arbitraires. L'équation self-consistante à résoudre dans la limite 2D $\omega_c \gg 4\pi t$ prend la forme

$$\frac{\Gamma_\varepsilon}{\Gamma_0} = \frac{R}{1+R} + \frac{1}{1+R} \frac{\sinh\left(2\pi \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right)}{\cosh\left(2\pi \frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right) + \cos\left(2\pi \frac{\varepsilon}{\omega_c}\right)}. \quad (5.29)$$

Cette équation prise pour $R = 0$ est exactement similaire à celle obtenue il y a plusieurs années par T. Ando pour le métal exactement 2D [61, 62]. Pour des champs magnétiques $\omega_c \geq \pi\Gamma_0$, elle conduit formellement à une valeur nulle pour la self-énergie Γ_ε quand l'énergie ε est comprise entre deux

niveaux de Landau adjacents [61, 62]. Mais pour $\Gamma_\varepsilon = 0$, nous ne pouvons pas satisfaire la sommation dans (5.25) (prise avec $t = 0$ pour le métal 2D). Cette contradiction démontre que l'approximation de Born self-consistante est inappropriée dans la région de fort champ magnétique $\omega_c \geq \pi\Gamma_0$. Pour éviter un tel résultat non physique obtenu pour un modèle de diffusion sur les impuretés à courte portée, M.E. Raikh et T.V. Shahbazyan [63] (voir aussi la Réf. [64]) ont discuté le système électronique 2D dans un modèle plus général de potentiel d'impuretés aléatoire avec un rayon de corrélation fini R_c . Il a été montré que l'approximation de Born self-consistante n'est justifiée que dans la région de bas champ magnétique quand la longueur magnétique $l_H \ll R_c$. À forts champs magnétiques tels que $R_c \geq l_H$, les diagrammes d'ordre plus élevés contribuent de façon importante et doivent par conséquent également être pris en compte dans les calculs. Comme résultat, la densité d'états est alors finie à toute énergie et pour tout champ magnétique.

Toutefois, pour $R \neq 0$, nous remarquons que la coupure non physique pour la self-énergie n'existe plus. Nous pouvons facilement nous persuader de cela en réécrivant l'Éq. (5.29) ainsi

$$\cos\left(2\pi\frac{\varepsilon}{\omega_c}\right) = \frac{\sinh\left(2\pi\frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right)}{(1+R)\Gamma_\varepsilon/\Gamma_0 - R} - \cosh\left(2\pi\frac{\Gamma_\varepsilon}{\omega_c}\right). \quad (5.30)$$

De façon évidente, cette équation admet des solutions pour la gamme complète des énergies ε et des champs magnétiques quand $\Gamma_\varepsilon > \Gamma_0 R/(1+R)$. Par conséquent, il est toujours possible de trouver une self-énergie finie pour toute énergie et tout champ. Pour cette raison, nous considérons ici que, dans la limite 2D, les oscillations de Γ_ε sont données par l'Éq. (5.30). La validité complète de l'approximation de Born self-consistante dans la limite 2D et en présence d'un réservoir d'états sera adressée dans le futur.

Nous avons représenté en Fig. 5.7 le résultat du calcul numérique des oscillations de Γ_ε pour différents champs magnétiques $H = 20, 40$ et 60 T, et pour un paramètre du réservoir $R = 5$ (le choix d'une telle valeur avait été suggérée pour le composé en question dans la Réf. [54]), effectué en utilisant les mêmes paramètres que dans la Fig. 5.4. Comme attendu, l'amplitude des oscillations croît avec le champ (voir Fig. 5.7). Cependant, pour $R = 5$, les oscillations de self-énergie Γ_ε sont relativement faibles comparées à la valeur non-oscillante Γ_0 même pour des champs magnétiques de l'ordre de 60 T. En l'absence d'autres informations sur l'importance de l'influence du réservoir sur les oscillations de self-énergie, nous supposons par conséquent à ce niveau

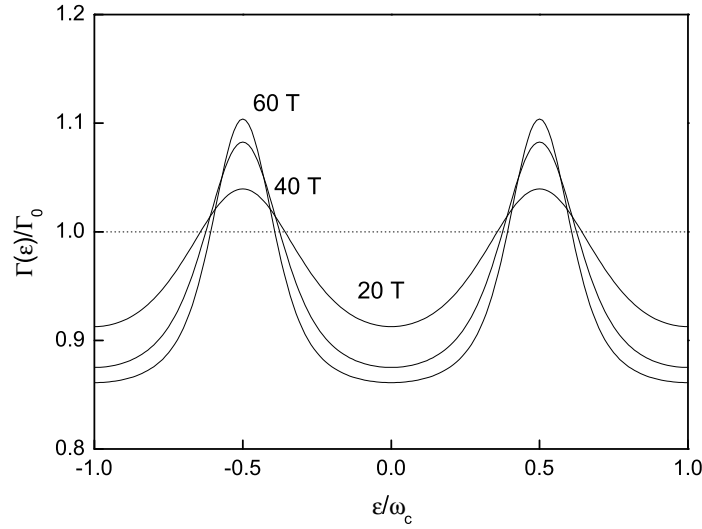


FIG. 5.7 – Oscillations de la self-énergie due aux impuretés Γ_ε dans la limite 2D pour différents champs magnétiques (20, 40 et 60 T). Ici $R = 5$, $\Gamma_0 = 0.22$ meV et $m^* = 1.96m_e$.

que les oscillations de Γ_ε sont relativement faibles dans les conditions des expériences des Réfs. [52, 53].

5.5 Discussion

Le traitement numérique des Éqs. (5.18)-(5.20) permet une comparaison avec les expériences [52, 53] (voir la Fig. 5.5 et la figure expérimentale reportée en Fig. 5.8). Nos calculs théoriques considérant de faibles oscillations de self-énergie reproduisent bien le comportement des oscillations géantes dans les mêmes conditions de températures et de champs magnétiques que dans les expériences [52, 53]. Comme démontré précédemment, le processus thermiquement activé des maxima de ρ_{zz} est bien établi théoriquement en correspondance avec les observations de la Réf. [53]. En outre, nous trouvons un accord quantitatif pour le champ magnétique minimal pour avoir l'activation thermique, c'est-à-dire $2\pi\Gamma_0 \sim \omega_c$ (dans les conditions de l'expérience [53],

la valeur correspondante de ce champ magnétique est d'environ 20 T).

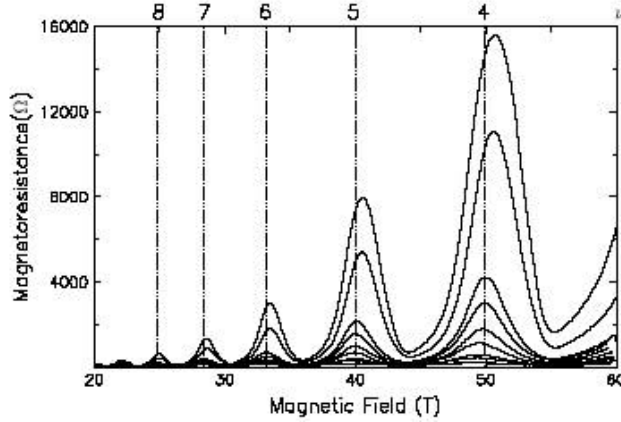


FIG. 5.8 – Oscillations de la magnétorésistance dans le conducteur organique β'' -(BEDT-TTF) $_2$ SF $_5$ CH $_2$ CF $_2$ SO $_3$ (d'après la Réf. [53]). Les différentes courbes correspondent aux mêmes températures qu'en Fig. 5.5.

Néanmoins, nous pouvons également remarquer l'existence de quelques désaccords entre nos calculs et les expériences [52, 53], et cela spécialement à très basses températures. En effet, nos calculs numériques ne reproduisent pas qualitativement le comportement des minima de résistivité, qui croissent avec le champ (comparer la Fig. 5.5 et la figure expérimentale reproduite en Fig. 5.8). Des désaccords quantitatifs existent aussi concernant les maxima de résistivité à très basse température. Une raison possible pour ces derniers désaccords pourrait être la considération d'oscillations de self-énergie négligeables dans nos calculs. En effet, bien que la présence d'oscillations de self-énergie ne supprime pas le comportement thermiquement activé des maxima de ρ_{zz} , elle induit toutefois des modifications quantitatives pour les valeurs du pseudo-gap et par conséquent pour les maxima de résistivité. Cependant, cela n'est pas suffisant pour expliquer qualitativement la dépendance en champ des minima de résistivité à très basses températures.

Une limitation possible de notre modèle pour décrire intégralement le signal expérimental [52, 53] à fort champ magnétique est la considération des impuretés comme des points, ce qui nous a permis de négliger les corrections de vertex. En effet, partant d'un modèle microscopique avec le spectre en

énergie (2.1) (soit un modèle 3D), nous avons trouvé qu'en présence d'une diffusion des électrons sur des impuretés ponctuelles le comportement des oscillations quantiques magnétiques de σ_{zz} est complètement dicté par le mouvement 2D pour les champs magnétiques $\omega_c \gg 4\pi t$. Sous la même condition, et parallèlement, l'équation pour la densité d'états dans les métaux quasi-2D étudiée dans le cadre de l'approximation de Born self-consistente prend également une forme 2D. D'un autre côté, dans le cas d'un métal exactement 2D, il est connu que le traitement des effets des impuretés sur les oscillations quantiques magnétiques avec un modèle où les impuretés sont décrites comme des points n'est plus valable à forts champs magnétiques pour décrire correctement la densité d'états. D'après la Réf. [63], quand typiquement la longueur magnétique $l_H \leq R_c$, il devient nécessaire d'inclure également les effets de la diffusion sur les impuretés de portée finie R_c dans les calculs de la densité d'états. Probablement, de manière semblable, des contributions spécifiques dues à la diffusion sur les impuretés de portée finie doivent être aussi prises en compte dans les calculs des oscillations de magnétoconductivité à forts champs magnétiques. À notre avis, c'est ce problème ouvert qui pourrait expliquer que nos calculs présents ne rendent pas compte correctement du comportement complet des oscillations quantiques magnétiques de ρ_{zz} dans le régime de fort champ magnétique.

Jusqu'ici, nous n'avons pas encore discuté des effets possibles des oscillations du potentiel chimique sur les oscillations de magnétoconductivité. Comme déclaré dans l'introduction de ce chapitre, le signal de Haas-van Alphen [54] indique clairement que les oscillations de potentiel chimique sont négligemment faibles dans le composé β'' -(BEDT-TTF)₂SF₅CH₂CF₂SO₃, ce que nous avons exploité en dernier recours pour effectuer les calculs numériques. Le mécanisme responsable pour la quasi-fixation du potentiel chimique n'est pas clairement établi. En réalité, cette question est en partie reliée au problème théorique évoqué ci-dessus concernant la densité d'états du métal 2D en présence d'impuretés à fort champ magnétique. Néanmoins, il est intéressant de remarquer que la valeur du pseudo-gap apparaissant dans la dépendance en champ de la conductivité spectrale $\sigma_{zz}(\mu)$ (la conductivité à température nulle) dépend fortement de la présence d'oscillations de potentiel chimique ou non. Précédemment, il a été montré que dans la limite $\omega_c \rightarrow \infty$, la magnétoconductivité $\sigma_{zz}(\mu)$ s'annule partout excepté pour $\mu = (n+1/2)\omega_c$. Dans un métal 2D pur en absence de réservoir intrinsèque, le potentiel chimique reste piégé sur les niveaux de Landau, soit $\mu = (n+1/2)\omega_c$ quand le champ magnétique varie. Par conséquent, σ_{zz} reste fini (non nul)

sauf lorsque le potentiel chimique saute d'un niveau de Landau à un autre. Donc, dans le cas pur (non réaliste), le pseudo-gap dans σ_{zz} est réduit à un point et il n'y a pas de régime thermiquement activé pour les minima de conductivité. Dans un système réel, les oscillations de potentiel chimique à température nulle réduisent la valeur du pseudo-gap par rapport à la valeur maximale obtenue à potentiel chimique constant. Bien que nous n'ayons pas obtenu un accord quantitatif complet entre nos calculs numériques et les expériences concernant la valeur du pseudo-gap, l'observation [53] d'un régime thermiquement activé bien visible avec une valeur du pseudo-gap relativement importante semble concorder avec l'existence d'oscillations de potentiel chimique extrêmement petites.

Nous soulignons que l'observation d'un changement drastique dans le comportement en température et en champ magnétique des oscillations de σ_{zz} est un trait caractéristique unique de la limite 2D avec le spectre en énergie (2.1). Puisque le passage entre les deux régimes se produit pour $\omega_c \sim 2\pi\Gamma_0$, cela implique nécessairement qu'il faut avoir $\Gamma_0 > 2t$. Une telle condition est précisément attendue dans le composé organique β'' -(BEDT-TTF)₂SF₅CH₂-CF₂SO₃ [52]. Il est utile de mentionner que la même condition est proposée pour avoir du transport incohérent entre les couches [52]. Dans ce dernier cas, l'existence d'une dispersion entre couches dans le spectre en énergie (2.1), ou en d'autres termes une description de type liquide de Fermi, est remise en cause. C'était avec une telle idée que les auteurs de la Réf. [52] ont tenté d'extraire une magnétorésistance superposée aux oscillations Shubnikov-de Haas. Dans une expérience récente [65] effectuée avec le même composé organique, d'autres arguments en faveur d'un transport incohérent ont été proposés pour interpréter les observations de la dépendance angulaire de ρ_{zz} à forts champs magnétiques. Cependant, nous remarquons que le magnéto-transport cohérent dans les composés quasi-2D est usuellement (et parfois exclusivement) discuté dans le cadre de la théorie du transport de Boltzmann. Or ici, nous avons clairement trouvé des différences importantes entre les résultats obtenus avec la théorie du transport quantique et ceux obtenus avec la théorie du transport de Boltzmann particulièrement à forts champs magnétiques $\omega_c \gg 4\pi t$ et $\omega_c \geq \Gamma_0$. Par conséquent, des études théoriques développées exclusivement dans le cadre de la théorie du transport quantique sont nécessaires pour mieux comprendre d'éventuels traits caractéristiques inhabituels du magnéto-transport cohérent dans les systèmes de basse dimensionnalité. Quant à la possible absence d'une description en termes de quasi-particules à $t < \tau_0^{-1}$ dans les métaux quasi-2D [65], nous pouvons re-

marquer qu'il n'y a aucun doute concernant les concepts de quasi-particules dans le cas 2D pur où $t = 0$, et le seul critère pour cela repose sur l'énergie de Fermi : $\varepsilon_F > \tau_0^{-1}$. Il semble que la possibilité d'avoir un mouvement entre couches à $t \neq 0$ n'altère pas la description en termes de quasi-particule, parce que la diffusion dans le plan conduit juste à l'indétermination $\delta k \sim (v_F \tau_0)^{-1}$ du moment dans le plan (v_F est la vitesse au niveau de Fermi) mais pas à l'indétermination du quasi-moment entre couches k_z . Ceci explique à notre opinion les observations de la cohérence dans le conducteur organique quasi-2D κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂ reportée à $\tau_0^{-1} \sim 6t$ dans la Réf. [66].

Enfin, l'importance de la contribution σ_{RR} dans la limite 2D et dans les conducteurs en couche de très bonne qualité démontrée en Section 5.2 empêche toute séparation de la magnétoconductivité σ_{zz} en une partie oscillant avec le champ et une partie constante selon la manière utilisée par les auteurs de la Réf. [52]. La relation de proportionnalité entre la dérivée du signal de Haas-van Alphen et le signal Shubnikov-de Haas utilisée dans la Réf. [52] n'est plus valable à forts champs magnétiques et dans les systèmes de basse dimensionnalité. Cela est déjà le cas pour $\omega_c \leq 4\pi t$ à cause des oscillations faibles (mais non négligeables) de la self-énergie en absence de réservoir [55, 56, 57]. De plus, même en présence d'oscillations de self-énergie négligemment petites, la relation de proportionnalité peut ne plus être valable. En effet, dans ce dernier cas l'intégration sur l'énergie ε dans (5.16) peut être effectuée analytiquement et donne pour la partie oscillante de la contribution RA dans la limite 2D :

$$\begin{aligned} \sigma_{RA} - \sigma_0 &= 2\sigma_0 \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l e^{-2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c}} \cos\left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}\right) \int d\varepsilon (-n'_F(\varepsilon)) \\ &\quad \times \cos\left(2\pi l \frac{\varepsilon}{\omega_c}\right) \end{aligned} \quad (5.31)$$

$$= 2\sigma_0 \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l e^{-2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c}} \cos\left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}\right) \frac{\lambda_l}{\sinh \lambda_l}, \quad (5.32)$$

où nous avons introduit

$$\lambda_l = \frac{2\pi^2 l T}{\omega_c}. \quad (5.33)$$

Dans les métaux quasi-2D, les oscillations d'aimantation M sont données

dans la limite 2D par [9]

$$M = g_0 \mu \frac{\omega_c}{H} \frac{1}{\pi} \sum_{l=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{l+1}}{l} \frac{\lambda_l}{\sinh \lambda_l} e^{-2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c}} \sin \left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c} \right). \quad (5.34)$$

À partir des Éqs. (5.32) et (5.34), nous pouvons dériver (dans le cas d'oscillations de potentiel chimique négligeables) une relation valable à toute température entre la dérivée de M et la partie oscillante de la contribution RA en ne conservant uniquement que les termes oscillant rapidement :

$$\frac{\sigma_{RA} - \sigma_0}{\sigma_0} \approx \frac{H^2}{g_0 \mu^2} \frac{dM}{dH}. \quad (5.35)$$

Dans la limite sale $\omega_c \ll 2\pi\Gamma_0$, il a été démontré en Section 5.2 que σ_{RR} contribue de façon négligeable à la conductivité totale, c'est-à-dire $\sigma_{zz} \approx \sigma_{RA}$, de telle sorte que les oscillations Shubnikov-de Haas sont approximativement proportionnelles à $H^2 dM/dH$, exactement comme dans les métaux 3D. Quand $\omega_c \geq 2\pi\Gamma_0$, la contribution σ_{RR} devient plutôt importante et il n'existe alors plus de simple correspondance entre les signaux de Haas-van Alphen et Shubnikov-de Haas.

Conclusion

Nous avons étudié les oscillations quantiques de la magnéto-résistance longitudinale dans les métaux organiques quasi-2D pour une diffusion sur des impuretés ponctuelles dans un champ magnétique perpendiculaire. Des oscillations de magnéto-résistance géantes avec des dépendances en champ magnétique et en température non conventionnelles pour des oscillations quantiques magnétiques ont été trouvées à forts champs magnétiques et pour des basses températures dans les conducteurs en couches présentant des oscillations de potentiel chimique négligeables, et dont l'intégrale de transfert intercouches $4\pi t \ll \omega_c$. En particulier, nous avons montré que le comportement thermiquement activé des maxima de résistivité récemment observé dans le conducteur organique β'' -(BEDT-TTF)₂SF₅CH₂CF₂SO₃ [53] constitue un trait caractéristique des oscillations Shubnikov-de Haas dans la limite 2D $\omega_c \gg 4\pi t$ dans des échantillons relativement purs et/ou à forts champs magnétiques $\omega_c \geq 2\pi\Gamma_0$. L'origine d'un tel comportement n'est pas reliée à la présence d'un gap dans la densité d'états mais plutôt à la présence d'un pseudo-gap dans la magnétoconductivité spectrale $\sigma_{zz}(\mu/\omega_c)$.

PARTIE II

Étude de la symétrie de l'état supraconducteur dans le composé UPt₃

Chapitre 6

Le supraconducteur UPt₃

Dans ce chapitre nous rapportons rapidement les connaissances actuelles sur le composé UPt₃. Notamment, nous axons la présentation sur les propriétés supraconductrices de ce composé, comme son diagramme de phase supraconducteur champ magnétique - température très particulier. Les différentes théories proposées pour expliquer le diagramme de phase sont introduites. Pour plus de détails, voir la thèse [67] et la revue récente [68] consacrée intégralement au supraconducteur UPt₃.

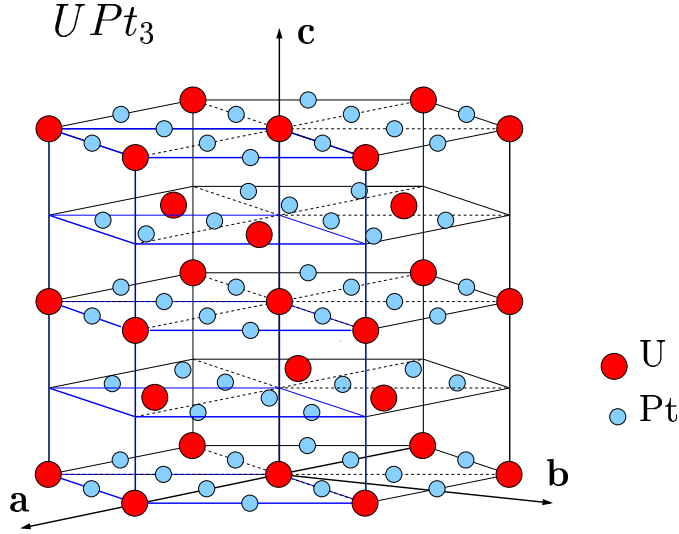
6.1 Le composé

6.1.1 Structure cristalline

Le composé UPt₃ a une structure hexagonale compacte. Son groupe d'espace est $P6_3/mmc$ et son groupe ponctuel D_{6h} . Comme représenté sur la Fig. 6.1, les atomes d'uranium forment un réseau hexagonal dans le plan basal (a, b) alterné entre les différents plans d'empilement dans la direction cristallographique c .

6.1.2 Propriétés électroniques

Comme beaucoup de composés réalisés à partir d'actinide ou de terre rare, l'alliage intermétallique UPt₃ fait partie des composés dits à fermions lourds. Ces derniers se caractérisent par un comportement liquide de Fermi avec une forte renormalisation de la masse effective, due à l'hybridation des électrons de conduction avec les électrons f .

FIG. 6.1 – Structure hexagonale du composé UPt_3

La surface de Fermi de UPt_3 est assez bien caractérisée par effet de Haas-van Alphen. Elle se compose de plusieurs feuilles (5 ou 6) avec différentes masses effectives qui font plusieurs fois la masse électronique [68]. Ces feuilles ont des formes 3D très différentes et pour la majorité présentant la symétrie d'ordre 6 de la structure hexagonale.

6.1.3 Propriétés magnétiques

Des fluctuations de spin importantes se manifestent pour des températures inférieures à 30 K. En dessous d'une température $T_N \approx 6$ K, un ordre antiferromagnétique avec un très faible moment magnétique (de l'ordre de $0.02 \mu_B$) semble être observé par diffraction de neutrons [69]. La structure magnétique suggérée par les mesures de diffraction présente une structure orthorhombique qui brise la symétrie hexagonale du cristal (voir Fig. 6.2). Elle se composerait de trois domaines également peuplés. Toutefois, notons que certains points concernant la structure de l'ordre antiferromagnétique ne sont pas complètement clairs à ce jour [67].

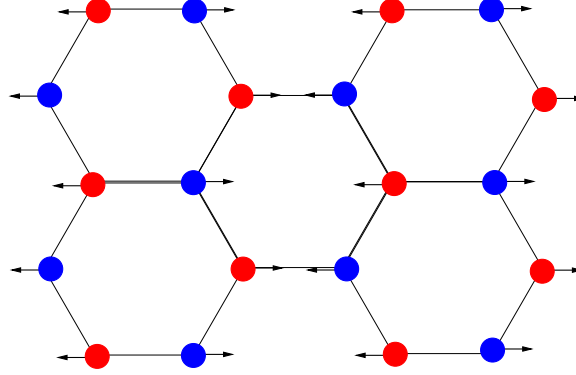


FIG. 6.2 – *Configuration de l'ordre antiferromagnétique probable dans UPt_3 . Les moments antiferromagnétiques sont portés par les atomes de uranium.*

6.2 Diagramme de phase supraconducteur

Malgré sa très faible température critique de 550 mK, il ne fait aucun doute que le supraconducteur fermion lourd UPt_3 présente un pairing anisotrope lorsque l'on considère son diagramme de phase champ magnétique-température (H-T) particulier pour l'état mixte, comme révélé par les études expérimentales de la fin des années 80 et du début des années 90 [70, 71, 72]. Le diagramme supraconducteur H-T est composé de trois phases supraconductrices distinctes : la phase A à haute T - bas H, la phase B à basse T - bas H, et la phase C à basse T - haut H (voir la Fig. 6.3). Les lignes de transition entre ces différentes phases ont été identifiées expérimentalement comme étant des lignes de transition de phase du second ordre [68]. Par conséquent, elles délimiteraient des phases supraconductrices de symétrie différente d'après la théorie de Landau.

Il est désormais bien accepté que le supraconducteur fermion lourd est la réalisation d'un état supraconducteur à plusieurs composantes dans UPt_3 . Les modèles théoriques qui ont été proposés pour expliquer le diagramme de phase peuvent être divisés en deux catégories. Dans la première classe de modèles théoriques la double transition à champ nul est due à une levée de dégénérescence entre les composantes d'un état supraconducteur à plusieurs composantes [73, 74, 75]. Cette levée résulte de l'action d'un champ briseur de symétrie qui est probablement connecté avec l'ordre antiferromagnétique des petits moments magnétiques situés sur les atomes d'uranium [69, 76, 77]. Les

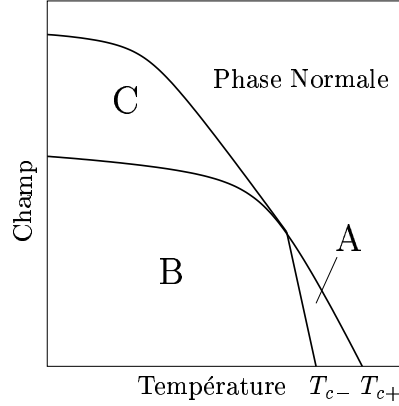


FIG. 6.3 – *Diagramme de phase schématisé de l'état mixte supraconducteur de UPt_3 pour $H \parallel c$.*

autres sources possibles du champ briseur de symétrie qui ont été discutées sont :

- (i) la faible anisotropie du champ cristallin ou l'interaction spin-orbite [78, 79, 80] et
- (ii) les possibles modulations incommensurables de la densité du cristal [81].

Le deuxième type de traitement théorique du diagramme de phase est donné dans la Réf. [82] où la double transition est déduite de l'existence de deux états supraconducteurs à une composante de symétrie différente avec des températures critiques accidentellement proches. Un des deux états correspond à la phase A, l'autre à la phase C et le mélange des deux à la phase B.

Dans la suite de ce chapitre, nous proposons de détailler un peu plus ces différentes théories de l'état supraconducteur de UPt_3 .

6.3 Les différentes théories de l'état supraconducteur dans UPt_3

Dans la théorie BCS, les seuls diagrammes de phase possibles se composent d'une unique phase Meissner (où le champ est intégralement expulsé du volume supraconducteur), ou d'une phase Meissner et d'une phase mixte (où le champ pénètre de façon inhomogène sous forme de vortex dans

d_Γ	pair (S=0)	impair (S=1)
1	A_{1g}	A_{1u}
1	A_{2g}	A_{2u}
1	B_{1g}	B_{1u}
1	B_{2g}	B_{2u}
2	E_{1g}	E_{1u}
2	E_{2g}	E_{2u}

TAB. 6.1 – Représentations irréductibles du groupe ponctuel D_{6h} et leur dimension d_Γ .

l'échantillon).

En plus de ces 3 phases mixtes A, B, et C, UPt_3 possède 2 phases Meissner (non représentées sur la Fig. 6.3). De toute évidence donc, l'origine de la supraconductivité dans ce composé n'est pas de type BCS. Une autre indication de la réalisation d'un état supraconducteur non conventionnel dans UPt_3 est la forte sensibilité de la température critique avec la concentration en impuretés [83].

Comme rappelé dans l'annexe E, la théorie de la supraconductivité non conventionnelle envisage la réalisation d'une brisure de symétrie spontanée du groupe ponctuel cristallin en plus de la brisure de la symétrie de jauge caractérisant la supraconductivité. Ces éléments de symétrie non triviaux du paramètre d'ordre conduisent à une caractéristique typique, comme la présence de noeuds dans le spectre des excitations. La signature de noeuds dans le paramètre d'ordre supraconducteur est donnée par des dépendances en loi de puissances des grandeurs thermodynamiques (comme la chaleur spécifique par exemple) en fonction de la température.

La démarche pour l'identification du mécanisme microscopique de supraconductivité non conventionnelle, consiste à rechercher d'abord la symétrie ponctuelle brisée du cristal à partir de considérations phénoménologiques. Nous sommes aidés en cela par le principe de classification des états supraconducteurs [84] (voir Annexe E). Concernant UPt_3 , la symétrie orbitale réalisée par l'état supraconducteur doit être choisie parmi les 12 représentations irréductibles (6 représentations irréductibles de parité paire et 6 représentations irréductibles de parité impaire) du groupe ponctuel de symétrie D_{6h} .

Nous voyons dans le tableau 6.1 ci-dessus que le groupe ponctuel D_{6h} admet quatre représentations de dimension $d_\Gamma = 2$, deux de parité paire E_{1g}

et E_{2g} , et deux de parité impaire E_{1u} et E_{2u} . Pour une représentation (donc une symétrie) donnée, les différentes composantes orbitales du paramètre d'ordre s'écrivent comme

$$\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0(T)\Delta(\hat{\mathbf{k}})$$

où $\Delta_0(T)$ est l'amplitude du paramètre d'ordre dépendant de la température et $\Delta(\hat{\mathbf{k}})$ donne la dépendance directionnelle avec le vecteur d'onde sur la surface de Fermi.

Toutes les formes possibles pour $\Delta(\hat{\mathbf{k}})$ se construisent à partir des fonctions de base correspondant à chaque représentation irréductible listées dans la référence [85] (pour plus de détails voir également la Réf [68]).

6.3.1 Partie de spin

L'identification de la symétrie de la partie de spin de la paire de Cooper pour un état supraconducteur non-conventionnel détermine le nombre de paramètres pertinents. Pour un spin triplet, le paramètre d'ordre supraconducteur possède à priori 3 composantes de spin

$$\Delta_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} -d_x + id_y & d_z \\ d_z & d_x + id_y \end{pmatrix}. \quad (6.1)$$

En revanche, la paire singulet est décrite par une seule composante g :

$$\Delta_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & g \\ -g & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

Les mesures du second champ critique dans UPt₃ pour différentes orientations du champ [86] ont révélé un croisement des courbes $H_{c2}(T)$ à basse température lorsque le champ est dans le plan basal ($\mathbf{H} \perp \mathbf{c}$) et lorsque le champ est en dehors du plan basal (la différence la plus flagrante apparaît quand $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}$). Ce croisement a été interprété avec succès par Choi et Sauls [87, 88] par l'existence d'une limite paramagnétique avec le champ brisant la paire uniquement dans la direction z (voir la Fig. 6.4). En revanche, la brisure de paire par effet paramagnétique n'a pas lieu dans le plan basal, car le spin de la paire s'oriente librement avec le champ. Une telle anisotropie est possible pour un appariement triplet si seule la composante $d_z \neq 0$. Dans une telle configuration, le spin de la paire est dans le plan basal (a, b) . Le paramètre d'ordre vectoriel $\mathbf{d}$ serait bloqué $\parallel \mathbf{c}$ à cause du couplage spin-orbite

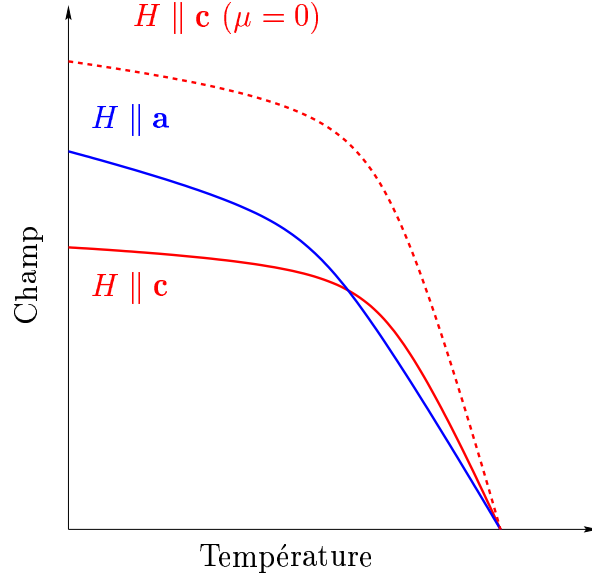


FIG. 6.4 – Croisement des lignes de second champ critique pour différentes orientations du champ appliqué. En absence d'effet paramagnétique ($\mu = 0$), comme ce serait le cas pour un appariement singulet, les lignes de champ critique pour $H \parallel c$ et $H \perp c$ ne se croiseraient pas à basse température.

fort dans le composé UPt_3 . En absence de couplage spin-orbite, le vecteur $\mathbf{d}$ serait libre relativement aux axes cristallins.

D'après la considération précédente des représentations irréductibles du groupe ponctuel D_{6h} , l'interprétation de Choi et Sauls implique que seuls deux états supraconducteurs à deux composantes (parmi les quatre) sont a priori possibles : E_{1u} et E_{2u} .

Notons que l'interprétation du croisement des lignes de $H_{c2}^{\parallel}(T)$ et $H_{c2}^{\perp}(T)$ a été critiquée par Joynt *et al.* [89, 90]. Ces auteurs, partisans de l'appariement singulet, ont souligné que l'explication de Choi et Sauls présupposait une susceptibilité de Pauli isotrope, ce qui n'a pas été démontré jusqu'ici.

Toutefois, l'appariement triplet semble être confirmé par les expériences de Knight shift faites par Tou *et al.* [91, 92]. Le Knight shift permet de mesurer de façon plus directe que le second champ critique la susceptibilité de Pauli des électrons. Pour un appariement singulet, la paire de Cooper ne peut pas être polarisée, et l'on s'attend par conséquent à ce que la susceptibilité de Pauli s'annule à température nulle pour toutes les directions du champ

magnétique. Or, Tou *et al.* n'ont observé pratiquement aucun changement de Knight shift à la transition entre l'état normal et l'état supraconducteur pour toute orientation du champ. Ce résultat indiquerait par conséquent un appariement triplet mais est contradictoire avec l'hypothèse de Choi et Sauls, qui prévoit une variation de Knight shift pour $H \parallel c$.

Enfin, Machida *et al.* [93, 94, 75] ont également cherché à interpréter le diagramme de phase général en termes de supraconductivité triplet non-unitaire (le spectre des excitations dépend de la projection de spin de la paire) mais en supposant, contrairement à Choi et Sauls, que le couplage spin-orbite est faible dans UPt_3 . Dans ce cas, la fonction d'onde de paire de spin (6.1) a trois composantes non nulles, $\mathbf{d} = d_x \hat{x} + d_y \hat{y} + d_z \hat{z}$, avec $\mathbf{d} \times \mathbf{d}^* \neq \mathbf{0}$. Nous ne détaillerons pas par la suite ce dernier modèle.

6.3.2 Partie orbitale

• Les modèles avec champ briseur de symétrie : E_{1g} et E_{2u}

Les modèles avec champ briseur de symétrie [73] ont été suggérés par la faible zone d'existence de la phase A. En effet, à champ nul, l'écart entre les deux transitions supraconductrices successives est $\Delta T_c \sim 50$ mK, ce qui est très faible en comparaison avec la température critique $T_c = 550$ mK (ΔT_c est de l'ordre de 1/10 de T_c). Dans ces modèles, le paramètre d'ordre supraconducteur appartient à une représentation de dimension 2. Le splitting de la température critique est causé par le couplage du paramètre d'ordre supraconducteur avec un champ briseur de symétrie (voir ci-dessous et la Fig. 6.5). Deux candidats de symétrie différente ont été proposés pour l'état supraconducteur de UPt_3 .

Dans le modèle de parité paire E_{1g} de Joynt *et al.* [89, 90], l'état supraconducteur est décrit par un vecteur $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2)$ à deux composantes complexes qui se transforme comme la représentation irréductible E_{1g} . La fonction orbitale de gap est

$$\Delta_{E_1}(\mathbf{k}) = \eta_1 k_x k_z + \eta_2 k_y k_z.$$

Un vecteur $\boldsymbol{\eta}$ à deux composantes complexes est aussi considéré dans le modèle spin-triplet E_{2u} de Sauls [95] où la fonction orbitale de gap a la forme

$$\Delta_{E_2}(\mathbf{k}) = \hat{z} k_z (\eta_1 k_x k_y + \eta_2 (k_x^2 - k_y^2)).$$

La différence principale entre les deux modèles E_{1g} et E_{2u} se situe au niveau de la symétrie dans le plan basal (dépendance avec k_x et k_y).

Ces deux états supraconducteurs E_{1g} et E_{2u} ont la même densité d'énergie libre de Ginzburg-Landau, et par conséquent, sont caractérisés par les mêmes conditions d'équilibre.

À champ magnétique nul

À champ magnétique nul, la densité d'énergie libre pour les deux états supraconducteurs E_{1g} et E_{2u} s'écrit

$$f_{2D} = \alpha_0 \tau |\boldsymbol{\eta}|^2 + \beta_1 (\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\eta}^*)^2 + \beta_2 |\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\eta}|^2, \quad (6.3)$$

où $\tau = T - T_{c0}$, β_1 et β_2 sont deux paramètres constants, et α_0 est une constante positive. La température T_{c0} est la température critique (ou valeur propre) associée à une représentation irréductible de dimension 2 donnée. Des représentations différentes donnent a priori des T_{c0} différents. Le couplage avec le champ briseur de symétrie est pris en compte dans la densité d'énergie libre avec le terme

$$f_{SBF} = \varepsilon (|\eta_1|^2 - |\eta_2|^2). \quad (6.4)$$

La densité d'énergie libre totale s'écrit alors à champ nul

$$f = \alpha_0 \tau_1 |\eta_1|^2 + \alpha_0 \tau_2 |\eta_2|^2 + \beta_1 (\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\eta}^*)^2 + \beta_2 |\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\eta}|^2 \quad (6.5)$$

avec $\tau_i = T - T_i$, $T_1 = T_{c0} + \varepsilon/\alpha_0$ et $T_2 = T_{c0} - \varepsilon/\alpha_0$.

Les solutions d'équilibre sont déterminées à partir des équations de Ginzburg-Landau (obtenues par minimisation de f). Les contraintes de stabilité pour avoir une double transition [73] sont $\beta_1 > 0$ et $\beta_2 > 0$. Le minimum d'énergie libre est atteint pour un paramètre d'ordre de la forme $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1(T), 0)$ où $\eta_1^2(T) = \alpha_0 |\tau_1| / 2(\beta_1 + \beta_2)$ dans la phase supraconductrice haute température ($T_{c-} < T < T_1 = T_{c+}$); seule une composante du paramètre d'ordre existe. Dans la phase basse température ($T < T_{c-}$), le minimum d'énergie libre est obtenu pour un paramètre d'ordre de la forme $\boldsymbol{\eta}_{\pm} = (a(T), \pm ib(T))$ où $a(T)$ et $b(T)$ sont des fonctions réelles décroissantes de la température. Le coefficient $b(T)$ s'annule continûment à T_{c-} . Dans la phase basse température (doublement dégénérée et brisant la symétrie par

renversement du temps), les deux composantes du paramètre d'ordre sont non nulles. La transition à champ nul à T_{c2} est une transition de phase du second ordre délimitant deux phases supraconductrices caractérisées par une symétrie différente.

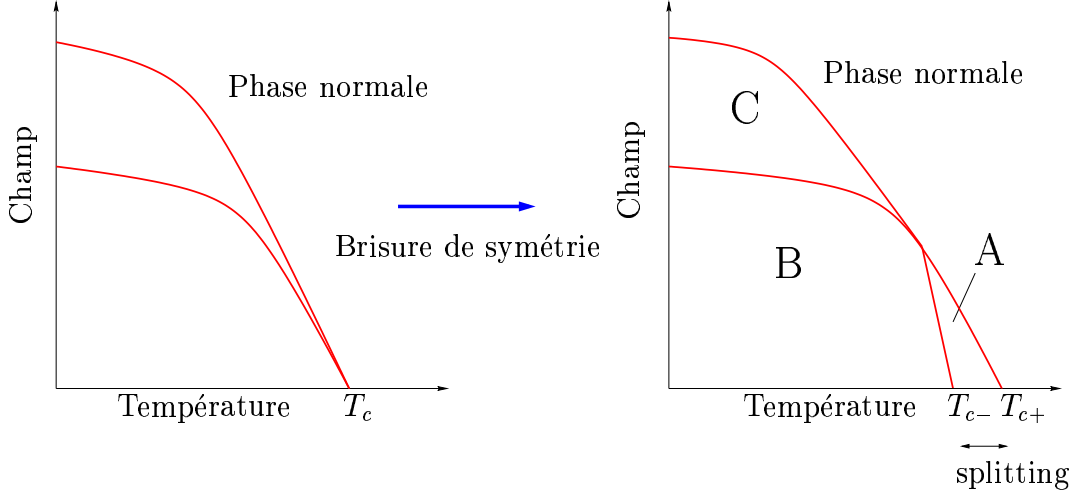


FIG. 6.5 – Action du champ briseur de symétrie sur un état supraconducteur 2D.

À champ magnétique non nul

En présence d'un champ magnétique externe, la densité d'énergie libre contient des termes supplémentaires en gradients du paramètre d'ordre induisant un paramètre d'ordre d'équilibre inhomogène :

$$f = \alpha_0 \tau_1 |\eta_1|^2 + \alpha_0 \tau_2 |\eta_2|^2 + \beta_1 (\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\eta}^*)^2 + \beta_2 |\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\eta}|^2 + K_1 |D_i \eta_j|^2 + K_2 (D_i \eta_i) (D_j \eta_j)^* + K_3 (D_i \eta_j) (D_j \eta_i)^* + K_4 |D_z \eta_i|^2, \quad (6.6)$$

où $i = x, y$, $D_i = -i\nabla_i + 2\pi A_i/\Phi_0$ (ici $\mathbf{A}$ est le potentiel vecteur et Φ_0 est le quantum de flux magnétique), et les coefficients K_1, K_2, K_3 et K_4 sont des constantes positives.

Du fait de la complexité des équations de Ginzburg-Landau, la détermination de la forme du paramètre d'ordre à l'équilibre est plus difficile qu'à champ nul. Nous pouvons toutefois différencier deux orientations particulières du champ.

Pour $\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}$ ou $\mathbf{b}$ (directions cristallographiques dans le plan basal), il est possible de déterminer le second champ critique car les équations de Ginzburg-Landau linéarisées se découplent [73].

Pour $\mathbf{H} \parallel c$, les équations de Ginzburg-Landau s'écrivent

$$\begin{aligned} (\alpha_0\tau_1 + 2\beta_1 |\boldsymbol{\eta}|^2) \eta_1 + 2\beta_2 \eta_2^2 \eta_1^* + 2\beta_2 |\eta_1|^2 \eta_1 + (K_{123}D_x^2 + K_1D_y^2) \eta_1 \\ + (K_2D_xD_y + K_3D_yD_x) \eta_2 = 0, \end{aligned} \quad (6.7)$$

$$\begin{aligned} (\alpha_0\tau_2 + 2\beta_1 |\boldsymbol{\eta}|^2) \eta_2 + 2\beta_2 \eta_1^2 \eta_2^* + 2\beta_2 |\eta_2|^2 \eta_2 + (K_{123}D_y^2 + K_1D_x^2) \eta_2 \\ + (K_3D_xD_y + K_2D_yD_x) \eta_1 = 0, \end{aligned} \quad (6.8)$$

avec $K_{123} = K_1 + K_2 + K_3$. Pour cette direction du champ, la théorie est très peu développée même près du second champ critique. La difficulté provient des termes de mélange

$$K_{23} [(D_x\eta_1) (D_y\eta_2)^* + (D_y\eta_1) (D_x\eta_2)^* + c.c.]$$

présents dans la densité d'énergie libre (6.6). Ici, $K_{23} = K_2 + K_3$ (et *c.c.* désigne le complexe conjugué). Dès que le champ n'est plus appliqué parallèlement aux directions $\mathbf{a}$ et $\mathbf{b}$ du plan basal, les termes de mélange sont responsables du couplage des équations de Ginzburg-Landau. Notons qu'ils sont spécifiques à un état supraconducteur à deux composantes.

Par conséquent, à défaut de pouvoir résoudre les équations, beaucoup d'éléments concernant la théorie de Ginzburg-Landau dans l'état mixte ont été plus ou moins spéculés (voir la Fig. 6.6).

À partir des équations de Ginzburg-Landau linéarisées, il a été avancé par de nombreux auteurs [96, 93, 82] que l'effet des termes de mélange est d'induire sous champ une répulsion entre les lignes des différentes transitions supraconductrices. Par conséquent, les modèles avec champ briseur de symétrie ne sont pas capables de rendre compte de l'observation du croisement des lignes délimitant par exemple la phase A et B, et la phase A et l'état normal pour toutes les orientations du champ magnétique (la Fig. 6.5 ne serait alors correcte que lorsque le champ est appliqué $\parallel \mathbf{a}$ ou $\mathbf{b}$). Nous reviendrons sur l'effet des termes de mélange sur le diagramme de phase supraconducteur dans le Chapitre 8.

Enfin, si les deux modèles E_{1g} et E_{2u} ont la même forme pour la densité d'énergie libre, ils se différencient toutefois par les valeurs attendues des coefficients associés aux termes de gradients, notamment par la valeur des

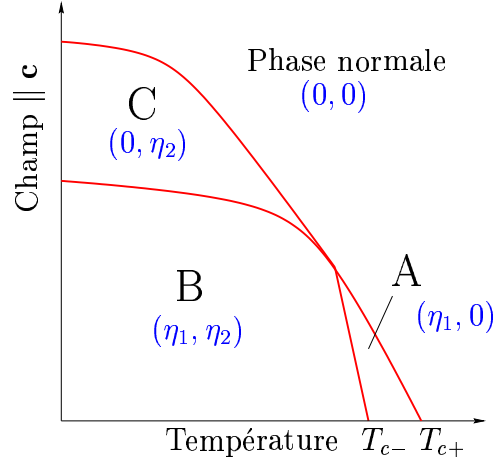


FIG. 6.6 – Diagramme de phase supposé pour $H \parallel c$ dans le cadre des modèles 2D avec champ briseur de symétrie. Notons qu'il existe une autre variante (non représentée ici) pour laquelle les lignes de transition supraconductrices ne se croisent pas (alors la phase $A=C$) mais forment une constriction.

coefficients K_2 et K_3 caractérisant les termes de mélange. D'après la théorie de couplage faible, il est prédit que

$$K_1 \sim K_2 = K_3$$

pour l'état supraconducteur E_{1g} , alors que

$$K_1 \gg K_2 = K_3$$

pour E_{2u} [95]. Cette différence (presque qualitative) fondamentale entre les deux modèles théoriques au niveau des termes de mélange (en fait, la seule dans l'approche de Ginzburg-Landau) sera exploitée dans les deux chapitres suivants.

Le rapport K_1/K_{123} a été estimé [68] à partir des lignes du second champ critique $H_{c2}(T)$ calculées pour $\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}$ et $\mathbf{b}$. Le changement de pente du second champ critique observé expérimentalement au niveau du point de rencontre des phases conduit à $K_1/K_{123} \approx 0.42$. Par conséquent les coefficients K_1 , K_2 et K_3 seraient du même ordre grandeur, ce qui a été avancé comme étant une forte indication de la réalisation de l'état supraconducteur E_{1g} [68]. Nous devons toutefois nuancer la validité et la portée de cette estimation, car :

(i) les pentes de $H_{c2}(T)$ au dessus et en dessous du point de croisement sont théoriquement extrapolées à partir des pentes $H_{c2}(T)$ calculées au niveau de la température critique. Cette extrapolation serait correcte si les deux lignes restaient rectilignes. Or, il est clairement visible sur le diagramme de phase expérimental (voir par exemple les figures 3 et 4 de la référence [97]) que la ligne délimitant les phases A et B présente une courbure prononcée pour $\mathbf{H} \perp \mathbf{c}$.

(ii) Le calcul de la ligne A-B (dans l'état mixte) avant le point de croisement nécessite en toute rigueur de prendre en compte les termes non-linéaires de type $|\eta_1|^2|\eta_2|^2$ (dans l'énergie libre) couplant les deux composantes du paramètre d'ordre. Ces termes ne conduisent pas seulement à une renormalisation de la température critique T_{c-} mais aussi probablement à une modification de la pente de la ligne de transition A-B, peut-être même à T_{c-} .

(iii) Il y a trois types de domaines antiferromagnétiques orientés différemment. L'influence d'une telle structure du champ briseur de symétrie sur les propriétés supraconductrices reste une question ouverte.

• Les modèles mixtes

Pour expliquer le point de croisement des différentes phases dans l'état mixte, de nombreuses théories alternatives comme les modèles mixtes ont vu le jour. Ces modèles reposent sur l'hypothèse que les deux transitions supraconductrices à champ nul se produisant à T_{c-} et T_{c+} ne sont pas reliées par symétrie, mais sont accidentellement proches. La réalisation de deux états supraconducteurs associés à deux différentes représentations irréductibles (donc deux mécanismes microscopiques d'appariement) est par conséquent nécessaire.

Le modèle mixte qui a été le plus développé est le modèle dit *A-B* de Chen et Garg [82, 98]. Ces auteurs ont considéré un paramètre d'ordre supraconducteur qui est la superposition de deux paramètres d'ordre à une composante indépendants, η_A et η_B , qui se transforment respectivement comme des représentations irréductibles de même parité A et B du groupe D_{6h} . Pour une parité donnée il y a quatre possibilités à envisager : $(\eta_A, \eta_B) \sim (A_1, B_1)$, (A_1, B_2) , (A_2, B_1) ou (A_2, B_2) . Ainsi, les symétries orbitales possibles des fonctions de gap de parité impaire sont

$$\Delta_{AB}(\mathbf{k}) = \eta_A \Delta_A(\mathbf{k}) + \eta_B \Delta_B(\mathbf{k})$$

avec pour fonctions de base

$$\begin{aligned}\Delta_{A_1}(\mathbf{k}) &= \hat{\mathbf{z}} \cos \theta, \\ \Delta_{A_2}(\mathbf{k}) &= \hat{\mathbf{z}} \cos \theta \sin^6 \theta \sin 6\varphi, \\ \Delta_{B_1}(\mathbf{k}) &= \hat{\mathbf{z}} \cos \theta \sin^3 \theta \cos 3\varphi \\ \Delta_{B_2}(\mathbf{k}) &= \hat{\mathbf{z}} \cos \theta \sin^3 \theta \sin 3\varphi.\end{aligned}$$

Ici, nous avons introduit les angles azimuthal (φ) et polaire (θ) du moment $\hat{\mathbf{k}}$ sur la surface de Fermi. Dans ce modèle mixte, le paramètre d'ordre orbital pour la phase A a la forme

$$\Delta_{AB}(\mathbf{k}) \sim \eta_A \Delta_A(\mathbf{k}).$$

Dans la phase C, seule la composant η_B existe. En revanche, dans la phase B, le paramètre d'ordre est la superposition des paramètres d'ordre η_A et η_B des deux états supraconducteurs de symétrie différentes. Par conséquent, ce modèle permet d'expliquer simplement le croisement des différentes lignes de transition. Toutefois, ce modèle ne permet pas d'expliquer l'observation expérimentale évoquée dans la partie précédente sur la détermination du spin de la paire de Cooper.

Notons que dans l'autre modèle mixte étudié par Zhitomirskii et Ueda [80], le paramètre d'ordre supraconducteur est un vecteur à trois composantes complexes. Les deux premières composantes sont associées à la représentation irréductible E_{1g} et la troisième composante se transforme selon la représentation A_{1g} .

6.4 Objectif de cette deuxième partie

L'analyse récente compréhensive des données thermodynamiques (chaleur spécifique) et de transport (conductivité thermique, atténuation transverse du son) présentée dans le papier [99] parle en faveur de l'état supraconducteur spin-triplet à deux composantes E_{2u} avec la dépendance angulaire particulière du potentiel d'appariement proposée dans la Réf. [95] comme développement du modèle initial avec champ briseur de symétrie [73]. L'accomplissement d'une correspondance entre une théorie microscopique et les expériences implique à chaque fois quelques hypothèses spécifiques au modèle. C'est pourquoi les manifestations directes expérimentales de la symétrie des états supraconducteurs sont souhaitables pour l'identification sans ambiguïté des phases.

Une telle expérience - la diffusion de neutrons à petits angles avec la direction du champ magnétique parallèle à l'axe hexagonal de UPt_3 - a été menée récemment à Grenoble [100] pour les phases A et B. Dans cette expérience (décrite dans le Chapitre 7), un réseau de vortex inhabituel a été observé dans la phase A. Le but du chapitre suivant est de développer une théorie du réseau de vortex pour la direction du champ $H \parallel c$, et de déterminer l'influence de l'anisotropie de gap sur ce réseau.

Notons que les modèles théoriques à deux composantes avec champ briseur de symétrie ont été très peu développés pour une telle direction du champ magnétique. Notamment, la compréhension de l'état mixte de UPt_3 sur la base de la théorie de Ginzburg-Landau n'est pas aboutie et repose jusqu'ici essentiellement sur des spéculations. Dans le Chapitre 8, nous donnons notre interprétation de l'effet des termes de mélange présents dans la densité d'énergie libre sur la forme du diagramme de phase dans l'état mixte pour $H \parallel c$.

Enfin, dans le dernier Chapitre, nous étudions l'influence des impuretés sur les propriétés supraconductrices de UPt_3 toujours pour $H \parallel c$. Une étude similaire a déjà été faite par Choi et Sauls [88], mais dans le cadre de l'état supraconducteur de symétrie E_{1u} . En ce qui nous concerne, nous calculons la dépendance de la pente du second champ critique à la température critique en fonction de la concentration en impuretés pour les états supraconducteurs E_{1g} et E_{2u} . Le but d'une telle étude est d'évaluer s'il est possible de discriminer E_{1g} et E_{2u} par la mesure expérimentale de cette dépendance.

Chapitre 7

Réseau de vortex

Dans ce chapitre, nous étudions les structures à l'équilibre du réseau d'Abrikosov dans le supraconducteur non-conventionnel UPt_3 pour un champ magnétique parallèle à l'axe hexagonal du cristal. Prenant en compte toutes les symétries de l'état supraconducteur envisagées pour décrire le diagramme de phase, nous montrons que seul l'état supraconducteur à deux composantes E_{2u} est compatible avec l'observation du réseau de vortex par diffraction de neutrons. Ce chapitre a fait l'objet d'une publication [101].

7.1 L'expérience

Tout comme les grandeurs thermodynamiques à basse température, le réseau de vortex de nature macroscopique est également sensible à la structure nodale (microscopique) du paramètre d'ordre supraconducteur et peut donc nous éclairer sur la symétrie de l'appariement. C'est ce qui a motivé l'expérience de Huxley *et al.* [100] qui a consisté à observer pour un même champ magnétique parallèle à l'axe c du cristal le réseau de vortex dans la phase B et dans la phase A par diffraction de neutrons pour un champ magnétique de l'ordre de $H_{c2}/10$ (voir le principe de l'expérience en Fig. 7.1).

Dans la phase A de UPt_3 un alignement inhabituel du réseau d'Abrikosov à $\pm 15^\circ$ de la direction cristallographique $\mathbf{a}$ a été découvert (voir la Fig. 7.2). Au contraire, dans la phase B, l'orientation du réseau de vortex n'a pas révélé un mauvais alignement par rapport aux directions hexagonales (voir les détails de la performance expérimentale dans [100]). Dans les deux phases

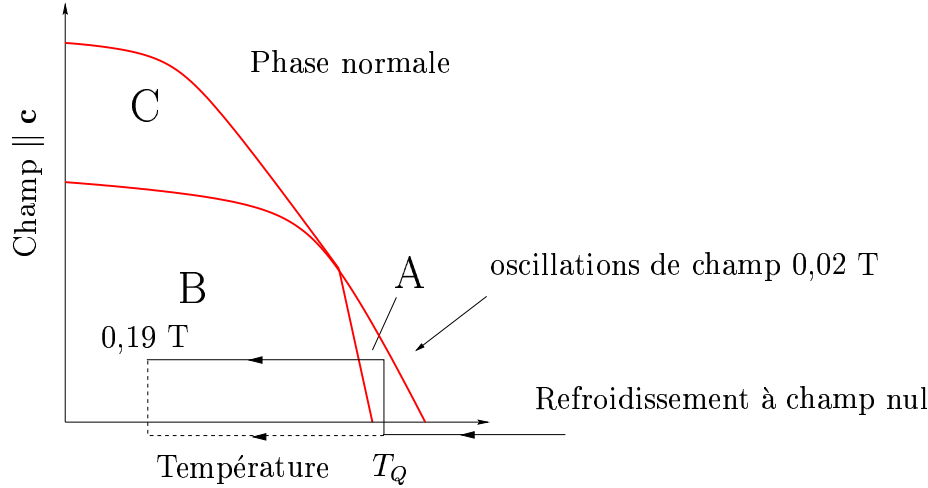


FIG. 7.1 – *Principe de l'expérience de diffusion de neutrons dans UPt_3 décrit en référence [100].*

A et B les réseaux de vortex étaient proches d'un hexagone parfait¹.

Ces observations ont été interprétées par les auteurs de [100] comme la preuve de l'identification des phases A et B avec un état supraconducteur correspondant au modèle à deux composantes E_{2u} . Étant en accord avec cette assertion nous devons remarquer qu'elle a été faite sur la base de l'approche de London avec les premières corrections non locales développée pour le cas d'états supraconducteurs conventionnels [107] et non-conventionnels [106] à une composante. La théorie correspondante pour la supraconductivité à deux composantes a ses propres particularités, de telle sorte que notre but est de développer la description propre des structures d'équilibre du réseau de vortex pour les états supraconducteurs à deux composantes dans les cristaux à symétrie hexagonale avec le champ magnétique parallèle à l'axe du cristal. Les précédentes expériences de diffusion sur le réseau de vortex de UPt_3 [102, 103] ainsi que leur théorie [104] considéraient le cas d'un champ magnétique orienté dans le plan basal.

Nous montrons que pour un champ magnétique parallèle à l'axe c :

(i) l'orientation du réseau d'Abrikosov est donnée par des considérations

1. Notons toutefois que la résolution expérimentale de l'expérience ne permet pas d'être complètement catégorique sur ce point dans la phase A. La détermination précise d'une éventuelle distorsion du réseau nécessite l'observation de plusieurs spots lumineux bien nets, ce qui n'est pas complètement le cas dans la phase A, voir la Fig. 7.2.

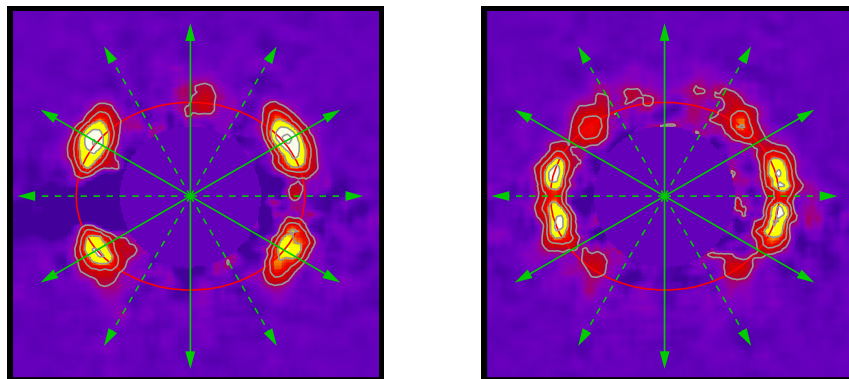


FIG. 7.2 – Le réseau de vortex dans les phases B (à gauche) et A (à droite) de UPt_3 observé par Huxley et al. [100]. Dans la phase A, l'image représentée est la superposition de deux réseaux de vortex orientés à $\pm 15^\circ$ par rapport à l'axe cristallographique **a**. Pour plus de clarté voir la figure schématique 7.3.

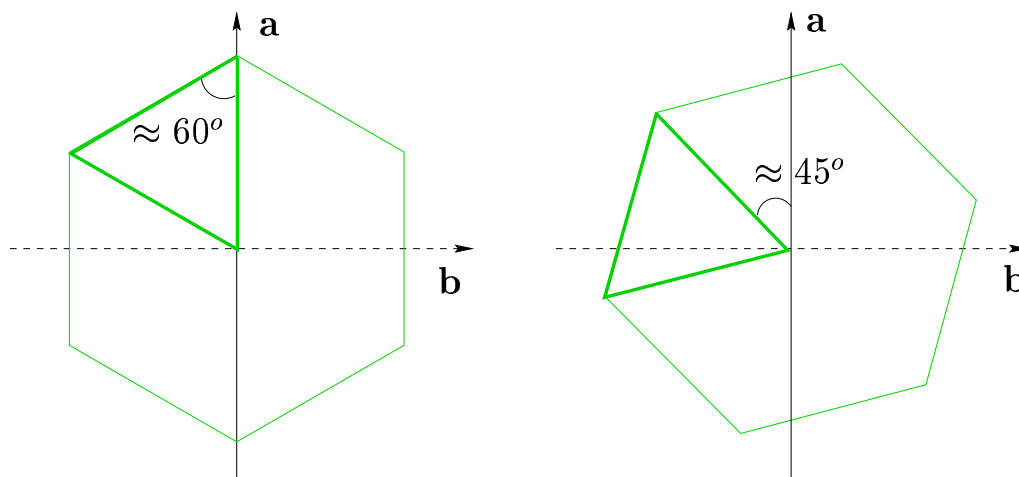


FIG. 7.3 – Représentation schématique du réseau de vortex observé dans les phases B (à gauche) et A (à droite). Dans la phase A, seule l'une des deux configurations observée a été représentée.

générales de symétrie,

(ii) la distortion de la cellule élémentaire du réseau peut être trouvée partiellement dans le cadre de l'approximation locale de London.

Ce dernier point est une propriété unique de la supraconductivité à deux composantes dans les cristaux uniaxiaux où, à la différence de la supraconductivité à une composante, l'anisotropie dans le plan basal du tenseur de densité suprafluide apparaît. Comme résultat, le réseau de vortex dans la phase A pour l'état supraconducteur E_{1g} doit être fortement distordu et aligné avec les directions cristallographiques hexagonales du plan basal. Au contraire le réseau de vortex hexagonal faiblement distordu tourné des angles $\approx \pm 15^\circ$ (ou de façon équivalente $\pm 45^\circ$) par rapport à la direction cristallographique $\mathbf{a}$ observé dans la phase A de UPt₃ correspond à l'état supraconducteur à deux composantes E_{2u} .

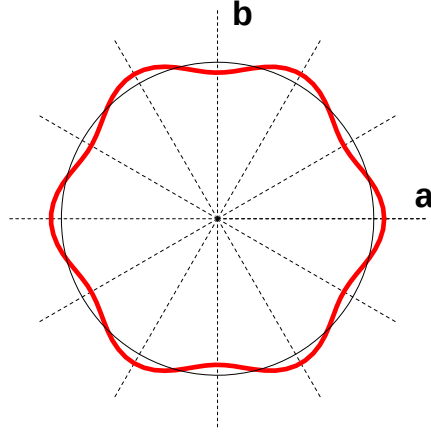
7.2 Les sources d'anisotropie

Quand le champ magnétique est orienté le long de l'axe hexagonal il existe seulement deux sources d'anisotropie dans le plan basal : l'anisotropie d'ordre six du cristal lui-même et l'anisotropie possible de l'état supraconducteur non-conventionnel ou plus explicitement la dépendance directionnelle du module de la fonction de gap dans l'espace des moments $\mathbf{k}$ déterminant l'expression pour les courants supraconducteurs dans l'électrodynamique de London. Pour tout état supraconducteur à une composante dans le cristal hexagonal avec couplage spin-orbital fort cette dernière symétrie coïncide avec la symétrie hexagonale du cristal [84]. C'est pourquoi il n'existe pas de directions préférentielles dans le plan basal à part $\mathbf{a}$, $\mathbf{a}^*$ et les directions tournées des angles $n\pi/3$, $n = 1, 2$ par rapport aux axes. Dans ce cas il n'y a pas de raison pour la mauvaise orientation du réseau de vortex dans la phase A. Par conséquent nous nous contenterons de considérer que les états supraconducteurs à deux composantes. Nous nous limiterons nous-mêmes aux états les plus populaires, l'état singulet E_{1g} et l'état triplet E_{2u} .

Dans le modèle de parité paire E_{1g} , l'état supraconducteur est décrit par un vecteur à deux composantes complexes $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2)$. La fonction de gap est

$$\Delta^{E_{1g}}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \cos \theta \sin \theta [\eta_1(\mathbf{r}, T) \cos \varphi + \eta_2(\mathbf{r}, T) \sin \varphi].$$

Ici φ et θ sont respectivement les angles azimutaux (dans le plan basal) et polaires du moment relatif des particules formant la paire de Cooper par rapport aux axes cristallins. Un paramètre d'ordre à deux composantes complexes $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2)$ est également considéré dans le modèle E_{2u} où la fonction

FIG. 7.4 – *Anisotropie hexagonale de la surface de Fermi dans le plan basal.*

de gap orbitale a la forme

$$\Delta^{E_{2u}}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{z}} \cos \theta \sin^2 \theta [\eta_1(\mathbf{r}, T) \cos 2\varphi + \eta_2(\mathbf{r}, T) \sin 2\varphi].$$

À champ magnétique nul le paramètre d'ordre est identifié comme $\boldsymbol{\eta} = (1, 0)$ dans la phase haute température et comme $\boldsymbol{\eta} = (1, ib(T))$ dans la phase basse température où $b(T)$ est une fonction décroissante de la température qui s'annule à T_{c-} . Il est couramment admis que la transition de phase à champ nul résulte d'un champ briseur de symétrie antiferromagnétique qui agit en faveur de l'une des deux composantes de l'état supraconducteur. En réalité il y a trois types de domaines antiferromagnétiques avec des directions différentes de l'aimantation inversée [105]. On peut cependant voir que deux types des 3 domaines orientés différemment agissent en faveur de la même composante du paramètre d'ordre supraconducteur. Le troisième type de domaine agit en faveur de l'autre composante. Son apparition créerait des inhomogénéités additionnelles au niveau des parois entre domaines. En vue des plus ou moins grosses tailles des domaines antiferromagnétiques et de la longueur de cohérence supraconductrice dans la phase A, l'état supraconducteur inhomogène semble énergétiquement non profitable en comparaison avec un état supraconducteur homogène à une composante dans tout le volume de l'échantillon. C'est pourquoi nous ferons notre dérivation dans le cadre d'une image à un seul domaine du champ briseur de symétrie causant tout d'abord l'apparition d'une composante définie de l'état supraconducteur 2D dans l'intégralité du volume de l'échantillon.

Sous un champ magnétique les deux composantes de $\boldsymbol{\eta}$ **coexistent à la fois dans les phases A et B** et dépendent des coordonnées spatiales. Nous pouvons affirmer toutefois que dans la phase A, à proximité de la température critique supérieure $T \approx T_{c+}$, la seconde composante est beaucoup plus petite que la première: $|\eta_2| \ll |\eta_1|$ (voir Fig. 7.5). En effet dans la phase A près de la transition, (η_1, η_2) sont reliés via les équations de Ginzburg-Landau linéarisées (voir par exemple la Réf. [84])

$$(K_{123}D_x^2 + K_1D_y^2)\eta_1 + (K_2D_xD_y + K_3D_yD_x)\eta_2 + \alpha_0\tau_1\eta_1 = 0 \quad (7.1)$$

$$(K_{123}D_y^2 + K_1D_x^2)\eta_2 + (K_3D_xD_y + K_2D_yD_x)\eta_1 + \alpha_0\tau_2\eta_2 = 0 \quad (7.2)$$

où $\tau_1 = (T - T_{c+})/T_{c+} < 0$, $\tau_2 = (T - T_{c-})/T_{c-} > 0$, $K_{123} = K_1 + K_2 + K_3$, $D_i = -i\nabla_i + 2\pi A_i/\phi_0$ (ici ϕ_0 est le quantum de flux magnétique et $\mathbf{A}$ est le potentiel vecteur) et les coefficients K_1, K_2, K_3 et α_0 sont des constantes positives. En négligeant les termes contenant les opérateurs différentiels agissant sur η_2 (ce qui est justifié par le résultat) nous résolvons tout d'abord l'équation (7.1) :

$$(K_{123}D_x^2 + K_1D_y^2)\eta_1 + \alpha_0\tau_1\eta_1 = 0. \quad (7.3)$$

Prenant la jauge de Landau $\mathbf{A} = (0, Hx, 0)$ (alors $D_x^2 = -\partial_x^2$ et $D_y^2 = -\partial_y^2 - 2i\frac{2\pi H}{\phi_0}x\partial_y + (\frac{2\pi H}{\phi_0})^2x^2$), nous cherchons η_1 sous la forme $\eta_1(x, y) = \exp(ipy)f(x)$, où $f(x)$ satisfait l'équation

$$f''(x) + \left(\frac{\alpha_0|\tau_1|}{K_{123}} - \frac{K_1}{K_{123}} \left(\frac{2\pi H}{\phi_0} \right)^2 (x - x_0)^2 \right) f(x) = 0 \quad (7.4)$$

avec $x_0 = -p\phi_0/2\pi H$. Nous reconnaissons l'équation de l'oscillateur harmonique

$$f''(x)/2m + (E - m\omega_c^2(x - x_0)^2/2)f(x) = 0$$

avec $E = \frac{1}{2m} \frac{\alpha_0|\tau_1|}{K_{123}}$ et $\omega_c = \frac{1}{m} \sqrt{\frac{K_1}{K_{123}}} \left(\frac{2\pi H}{\phi_0} \right)$. Ainsi nous avons

$$(2n + 1) \sqrt{\frac{K_1}{K_{123}}} \left(\frac{\pi H}{\phi_0} \right) = \frac{\alpha_0|\tau_1|}{2K_{123}}.$$

Alors pour $n = 0$,

$$f(x) = C \exp \left(-(x - x_0)^2 \frac{\alpha_0|\tau_1|}{2K_{123}} \right).$$

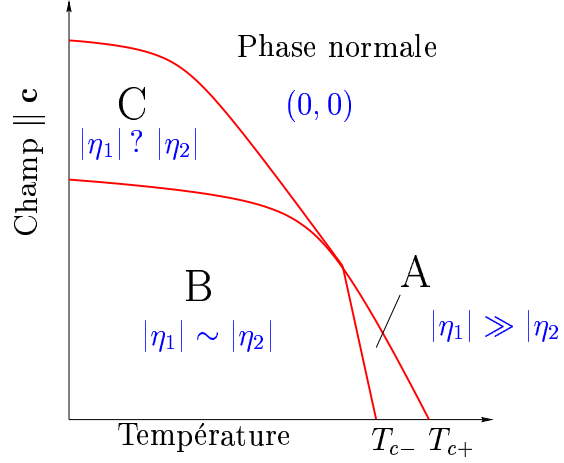


FIG. 7.5 – Diagramme de phase pour $H \parallel c$. Dans les deux modèles E_{1g} et E_{2u} , les deux composantes η_1 et η_2 coexistent dans les trois phases A, B et C de l'état mixte. Au moins près de T_{c+} , nous pouvons affirmer que $|\eta_2| \ll |\eta_1|$.

Puis en substituant le résultat dans l'équation (7.2) simplifiée

$$\eta_2 = -\frac{(K_3 D_x D_y + K_2 D_y D_x) \eta_1}{\alpha_0 |\tau_2|}, \quad (7.5)$$

et comme $(x - x_0)p \sim \sqrt{\frac{K_{123}}{K_1}}$, nous obtenons

$$\eta_2 \sim i \frac{K_2 + K_3}{\sqrt{K_{123} K_1}} \frac{|\tau_1|}{|\tau_2|} \eta_1. \quad (7.6)$$

Tant que $|\tau_1| \ll |\tau_2|$ nous avons $|\eta_2| \ll |\eta_1|$. Pour l'état supraconducteur E_{2u} cette dernière propriété prend effet dans la région complète d'existence de la phase A en vue de l'inégalité $K_2 + K_3 \ll K_1$ spécifique pour cet état [95] (voir également ci-dessous).

Ainsi, nous pouvons dire que dans la phase A nous avons une source d'anisotropie additionnelle qui correspond grossièrement à la symétrie du module de la fonction de gap de l'état supraconducteur à deux composantes. Cette symétrie est déterminée par la symétrie des fonctions $|\eta_1 \cos \varphi + \eta_2 \sin \varphi|$ pour l'état E_{1g} et $|\eta_1 \cos 2\varphi + \eta_2 \sin 2\varphi|$ pour l'état E_{2u} . La première fonction a seulement les plans (xz) et (yz) comme plans de symétrie contenant

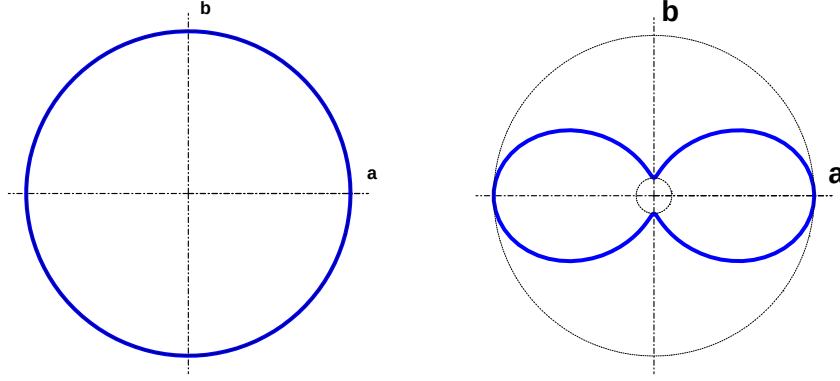


FIG. 7.6 – *Anisotropie dans le plan basal de la fonction de gap dans les phases B (à gauche) et A (à droite) pour le modèle E_{1g} .*

l'axe hexagonal du cristal. La seconde fonction possède en plus deux plans de symétrie obtenus des premiers en effectuant des rotations d'angles $\pm 45^\circ$ autour de l'axe z (il s'agit des plans bissecteurs). Cela signifie que l'état supraconducteur E_{1g} ne crée pas d'anisotropie du plan basal correspondant aux orientations du réseau de vortex dans la phase A à $\pm 45^\circ$ par rapport aux directions du cristal hexagonal dans le plan basal (voir la Fig. 7.6). Au contraire, une telle anisotropie existe précisément dans l'état supraconducteur E_{2u} (voir la Fig. 7.7). En présence d'une faible anisotropie hexagonale les configurations pour le réseau de vortex doivent être légèrement déviées de $\pm 45^\circ$ car les plans bissecteurs ne sont pas des plans de symétrie pour la surface de Fermi. Les poids des composantes du paramètre d'ordre dans la phase B sont approximativement égaux de telle sorte qu'ils recréent effectivement l'isotropie du plan basal et éliminent la raison pour le mauvais alignement du réseau de vortex par rapport aux directions du cristal.

Si les orientations du réseau de vortex peuvent être établies purement à partir de considérations de symétrie, la recherche des distortions du réseau requiert des considérations d'ordre plus quantitatif. UPt_3 est un supraconducteur de type II fort avec un paramètre de Ginzburg-Landau $\kappa \approx 60$: cela signifie que la description de l'électrodynamique locale et linéaire de London est valable pour toute température et champ magnétique $H \ll H_{c2}$. L'expérience [100] s'est déroulée à champ magnétique plus élevé $H \approx 0.4 H_{c2}$. Toutefois, par simplicité nous discuterons la forme d'équilibre du réseau de vortex dans le cadre de l'approche de London. Alors nous démontrerons la coïncidence

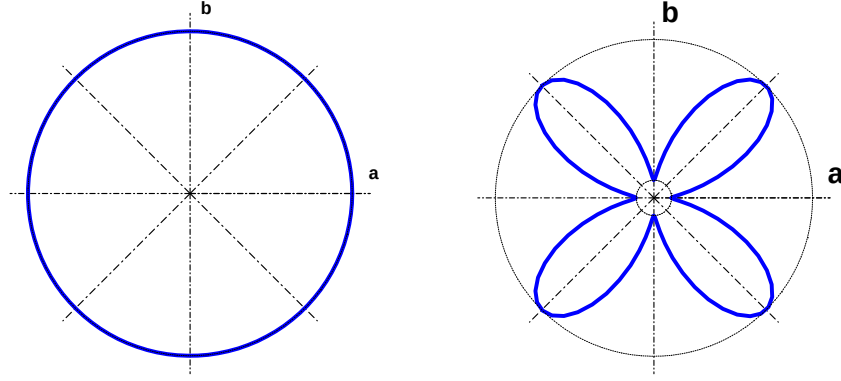


FIG. 7.7 – Anisotropie dans le plan basal de la fonction de gap dans les phases *B* (à gauche) et *A* (à droite) pour le modèle E_{2u} .

des configurations d'équilibre de London avec celles qui sont établies dans l'approximation de Ginzburg-Landau valable pour des champs plus élevés $H \approx H_{c2}$.

7.3 Électrodynamique locale de London

Dans la théorie de London (qui rappelons-le est valable pour des champs magnétiques $H \ll H_{c2}$) la densité de courant supraconducteur $\mathbf{j}$ est reliée au potentiel vecteur $\mathbf{A}$ ($\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ est l'induction magnétique) par la loi locale $j_i(\mathbf{r}) = K_{ij}A_j(\mathbf{r})$ où K_{ij} est un tenseur. Dans le cas le plus général, la densité de courant supraconducteur n'est pas simplement donnée par le potentiel vecteur $\mathbf{A}$ à la position $\mathbf{r}$ mais dans un volume de l'ordre de ξ^3 (ξ est la longueur de cohérence) autour de la position $\mathbf{r}$. La relation est alors non-locale :

$$j_i(\mathbf{r}) = \int d^3r' K_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') A_j(\mathbf{r}'). \quad (7.7)$$

Dans le cas des supraconducteurs de type II forts, la longueur caractéristique λ sur laquelle l'induction magnétique varie dans le supraconducteur est beaucoup plus grande que la longueur caractéristique ξ des coeurs de vortex ($\kappa = \lambda/\xi \gg 1$) et donc l'induction magnétique varie très peu dans un volume de l'ordre de ξ^3 soit $A_j(\mathbf{r}') \approx A_j(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$: nous retrouvons alors l'équation de London dans cette limite.

Dans l'espace de Fourier, les composantes de la densité de courant supraconducteur $\mathbf{j}(\mathbf{q})$ et du potentiel $\mathbf{A}(\mathbf{q})$ sont reliées via :

$$j_i(\mathbf{q}) = -\frac{c}{4\pi} Q_{ij}(\mathbf{q}) A_j(\mathbf{q}). \quad (7.8)$$

Dans la limite propre le tenseur de réponse électromagnétique $Q_{ij}(\mathbf{q})$ s'écrit pour un état supraconducteur arbitraire et une surface de Fermi quelconque [106]:

$$Q_{ij}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi T}{\lambda_0^2} \sum_{n>0} \left\langle \frac{|\Delta_{\hat{\mathbf{k}}}|^2 \hat{v}_{Fi} \hat{v}_{Fj}}{\sqrt{\omega_n^2 + |\Delta_{\hat{\mathbf{k}}}|^2} (\omega_n^2 + |\Delta_{\hat{\mathbf{k}}}|^2 + \gamma_{\mathbf{q}}^2)} \right\rangle, \quad (7.9)$$

où $\mathbf{v}_F$ est la vitesse au niveau de Fermi et $\hat{v}_{Fi} = v_{Fi}/v_F$, $\gamma_{\mathbf{q}} = \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}/2$, $\omega_n = \pi(2n-1)T$ sont les fréquences de Matsubara, λ_0 est la longueur de pénétration de London à $T=0$ et les crochets anguleux signifient la moyenne sur la surface de Fermi.

Le réseau de vortex à l'équilibre minimise la densité d'énergie libre de Gibbs $G = F - H\bar{B}$ (où $\bar{B} = \phi_0/\Omega$ est l'induction moyenne, ϕ_0 est le quantum de flux et Ω est l'aire de la cellule unité du réseau de vortex) [107]. La densité d'énergie libre magnétique de London, F , est donnée dans l'espace de Fourier par :

$$F = \sum_{\mathbf{q}=\mathbf{G}} (\mathbf{B}_{\mathbf{q}}^2 + (\mathbf{q} \times \mathbf{B}_{\mathbf{q}}) \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{q}) (\mathbf{q} \times \mathbf{B}_{\mathbf{q}})) / 8\pi. \quad (7.10)$$

La somme s'étend à tous les vecteurs $\mathbf{G}$ du réseau réciproque. Les composantes de Fourier $\mathbf{B}_{\mathbf{q}}$ de l'induction magnétique sont obtenues en combinant l'équation de Maxwell-Ampère $\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = (c/4\pi)i \mathbf{q} \times \mathbf{B}_{\mathbf{q}}$ et l'équation (7.8) soit :

$$\mathbf{B}_{\mathbf{q}} - \mathbf{q} \times (\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{q}) (\mathbf{q} \times \mathbf{B}_{\mathbf{q}})) = 0. \quad (7.11)$$

Dans la partie droite de cette équation, il faut rajouter les termes provenant des sources de courants au niveau des coeurs de vortex, qui pour $H \ll H_{c2}$ sont usuellement pris sous la forme $\hat{\mathbf{z}} \bar{B} e^{-q^2 \xi^2/2}$. Nous considérons désormais la situation où un champ magnétique $\mathbf{H}$ est appliqué parallèlement à l'axe $\mathbf{c}$ du cristal supraconducteur présentant une anisotropie uniaxiale. La densité d'énergie libre de London à une induction magnétique $\mathbf{B}$ donnée s'écrit alors

$$F = \frac{B^2}{8\pi} \sum_{\mathbf{q}=\mathbf{G}} f(\mathbf{q}), \quad (7.12)$$

où la somme est étendue sur tous les vecteurs $\mathbf{G}$ du réseau réciproque inconnu et

$$f(\mathbf{q}) = \frac{g(\mathbf{q})}{1 + q_x^2(Q^{-1})_{yy} + q_y^2(Q^{-1})_{xx} - q_x q_y [(Q^{-1})_{xy} + (Q^{-1})_{yx}]}. \quad (7.13)$$

Le facteur de coupure $g(\mathbf{q})$ corrige le défaut de l'approximation de London dans les coeurs de vortex.

Nous avons besoin désormais de calculer le tenseur de réponse électromagnétique $Q_{ij}(\mathbf{q})$. Ce dernier est développé en puissances de la quantité $\gamma_{\mathbf{q}}^2$, soit $Q = Q^{(0)} + Q^{(2)} + \dots$ où $Q^{(0)} \ll Q^{(2)}$. À l'ordre dominant, qui correspond à l'approximation locale de London, nous avons

$$f(\mathbf{q}) = \frac{g(\mathbf{q})}{1 + \lambda^2[q^2 + c_1(q_x^2 - q_y^2) + 2c_2 q_x q_y]}, \quad (7.14)$$

où $\lambda^2 = (Q_{xx}^{(0)} + Q_{yy}^{(0)})/2 \det Q^{(0)}$, $c_1 = (Q_{xx}^{(0)} - Q_{yy}^{(0)})/(Q_{xx}^{(0)} + Q_{yy}^{(0)})$ et $c_2 = 2Q_{xy}^{(0)}/(Q_{xx}^{(0)} + Q_{yy}^{(0)})$.

Les coefficients sans dimension c_μ proviennent des anisotropies de la surface de Fermi et du gap supraconducteur. Ils sont non-nuls seulement pour les états supraconducteurs à deux composantes. Comme dans la phase A nous nous trouvons dans la région de Ginzburg-Landau, la fonction de gap dans le dénominateur de (7.9) peut être négligée et les coefficients donnant les termes anisotropes s'expriment comme

$$c_1 \sim \frac{\langle |\Delta_{\mathbf{k}}|^2 (\hat{v}_{Fx}^2 - \hat{v}_{Fy}^2) \rangle}{\langle |\Delta_{\mathbf{k}}|^2 \rangle}, \quad c_2 \sim \frac{\langle |\Delta_{\mathbf{k}}|^2 2\hat{v}_{Fx}\hat{v}_{Fy} \rangle}{\langle |\Delta_{\mathbf{k}}|^2 \rangle}. \quad (7.15)$$

Dans le but d'évaluer les moyennes sur la surface de Fermi, nous considérons par simplicité un spectre en énergie cylindrique avec une faible anisotropie basale hexagonale [95]:

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = (\hbar^2/2m_{\perp})(k_x^2 + k_y^2) + 2a\epsilon_F \cos 6\varphi \quad (7.16)$$

Ici ϵ_F est l'énergie de Fermi et $a \ll 1$. Par conséquent la moyenne s'écrit comme $\langle \dots \rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi (1 - a \cos 6\varphi) (\dots) / 2\pi$ et la vitesse au niveau de Fermi au premier ordre en a devient

$$\hat{v}_{Fx} = \cos \varphi + 3a(\cos 5\varphi - \cos 7\varphi) \quad (7.17)$$

$$\hat{v}_{Fy} = \sin \varphi - 3a(\sin 5\varphi + \sin 7\varphi). \quad (7.18)$$

Nous trouvons pour E_{1g} :

$$c_1 = \frac{1}{2} \frac{|\eta_1|^2 - |\eta_2|^2}{|\eta_1|^2 + |\eta_2|^2}, \quad c_2 = \frac{\Re(\eta_1 \eta_2^*)}{|\eta_1|^2 + |\eta_2|^2}, \quad (7.19)$$

et pour E_{2u} :

$$c_1 = \frac{11}{4} a \frac{|\eta_1|^2 - |\eta_2|^2}{|\eta_1|^2 + |\eta_2|^2}, \quad c_2 = -\frac{11}{2} a \frac{\Re(\eta_1 \eta_2^*)}{|\eta_1|^2 + |\eta_2|^2}. \quad (7.20)$$

Comme d'après la section précédente $|\eta_1| \gg |\eta_2|$ dans la phase A, seul le terme anisotrope avec le coefficient c_1 est prépondérant dans la phase A. L'effet d'une telle anisotropie a été étudié par Kogan [108].

Suivant les références [107, 108], nous considérerons les configurations de réseau de vortex symétriques par rapport aux réflexions de plan (xz) et (yz) pour l'état E_{1g} . Il y a deux réseaux de vortex possibles distordus [108]. Dans la première configuration l'angle de distortion α entre les deux vecteurs de base de la cellule élémentaire du réseau de vortex est donné pour $H \gg H_{c1}$ par

$$\tan \alpha = \sqrt{3} \left(\frac{Q_{yy}^{(0)}}{Q_{xx}^{(0)}} \right)^{1/2} = \sqrt{3} \left(\frac{1 - c_1}{1 + c_1} \right)^{1/2}. \quad (7.21)$$

Pour $|\eta_2| \ll |\eta_1|$, l'état E_{1g} prédit donc une forte distortion avec $\alpha \approx 45^\circ$ (un réseau de vortex carré, voir la Fig. 7.8 ; notons que la valeur de α dépend en fait de la forme exacte de la surface de Fermi). Pour la seconde configuration possible, l'angle de distortion β est donné par

$$\tan \beta = \sqrt{3} \left(\frac{Q_{xx}^{(0)}}{Q_{yy}^{(0)}} \right)^{1/2} = \sqrt{3} \left(\frac{1 + c_1}{1 - c_1} \right)^{1/2}. \quad (7.22)$$

Nous trouvons également que le réseau de vortex est fortement distordu (voir la Fig. 7.8).

Pour l'état E_{2u} , les configurations du réseau de vortex tournées des angles $\pm 45^\circ$ peuvent être obtenues par la même procédure que pour E_{1g} seulement à $a = 0$, quand les plans bisecteurs sont des plans de symétrie pour le réseau de vortex. Dans ce cas $c_1 = c_2 \approx 0$ et le réseau de vortex a une structure hexagonale parfaite. En présence d'une petite anisotropie hexagonale la configuration du réseau de vortex est à la fois légèrement distordue ($\sim a$) et orientée à $\psi \approx \pm 45^\circ$ (Fig. 7.9).

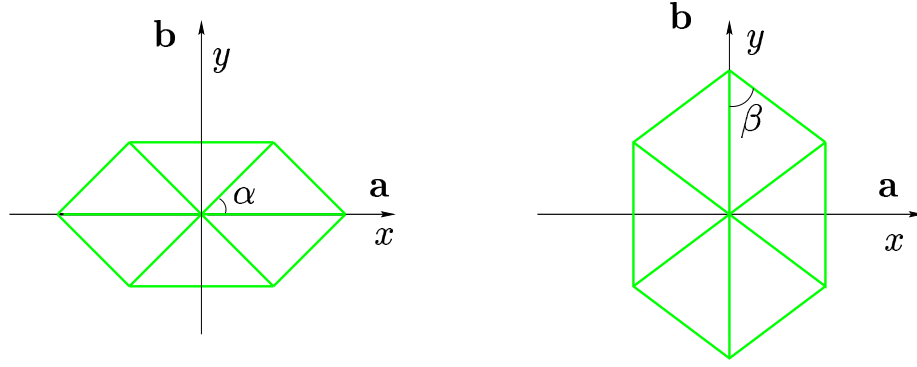


FIG. 7.8 – Les deux configurations possibles de réseau de vortex pour l'état E_{1g} sont alignées le long des directions cristallographiques et fortement distordues (avec les angles $\alpha \approx 45^\circ$ et $\beta \approx 71,6^\circ$ pour le modèle de surface de Fermi choisi).

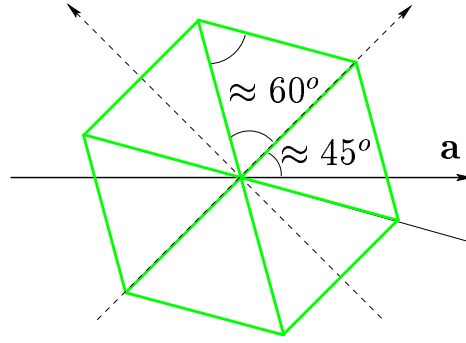


FIG. 7.9 – Pour l'état E_{2u} , le réseau de vortex est presque parfaitement hexagonal et orienté le long des directions à $\psi \approx \pm 45^\circ$ par rapport à l'axe cristallographique **a**.

L'application d'un formalisme du type d'Abrikosov développé dans la référence [109] pour les supraconducteurs ordinaires avec une anisotropie de masse effective conduit à la même conclusion. Pour voir cela, nous avons besoin de prendre en compte la propriété $|\eta_1| \gg |\eta_2|$ pour considérer l'équation de Ginzburg-Landau (7.1) seulement pour η_1 (prenant $\eta_2 = 0$). Alors en se rappelant que $(K_2 + K_3) \sim K_1$ pour l'état supraconducteur E_{1g} et $(K_2 + K_3) \sim aK_1$ pour l'état supraconducteur E_{2u} (voir [95]) nous arrivons à la déclaration

donnée ci-dessus.

7.4 Premières corrections non locales

Le principe du calcul précédent permet d'avoir accès également aux premières correction non-locales apparaissant dans la densité d'énergie libre de London. Nous donnons ici leur expression générale pour un état supraconducteur non-conventionnel. Les premières corrections non locales proviennent du terme $Q^{(2)}(\mathbf{k})$ d'ordre deux dans le développement du tenseur de réponse électromagnétique. Après inversion du tenseur $Q = Q^{(0)} + Q^{(2)}$, nous avons :

$$Q^{-1} = (Q^{(0)})^{-1} - (Q^{(0)})^{-2}Q^{(2)}, \quad (7.23)$$

soit $(Q^{-1})^{(2)} = -(Q^{(0)})^{-2}Q^{(2)}$. En toute généralité, les premières corrections non locales s'écrivent donc :

$$(Q^{-1})_{xx}^{(2)} = -\lambda^4 \left[((1 - c_1)^2 + c_2^2) Q_{xx}^{(2)} - 2c_2 Q_{xy}^{(2)} \right] \quad (7.24)$$

$$(Q^{-1})_{yy}^{(2)} = -\lambda^4 \left[((1 + c_1)^2 + c_2^2) Q_{yy}^{(2)} - 2c_2 Q_{xy}^{(2)} \right] \quad (7.25)$$

$$(Q^{-1})_{xy}^{(2)} + (Q^{-1})_{yx}^{(2)} = -2\lambda^4 \left[(1 + c_1^2 + c_2^2) Q_{xy}^{(2)} - c_2(Q_{xx}^{(2)} + Q_{yy}^{(2)}) \right]. \quad (7.26)$$

Ces expressions se simplifient considérablement dans le cas où $c_1 \ll 1$ et $c_2 \ll 1$ (c'est-à-dire les termes locaux d'anisotropie sont très faibles) :

$$(Q^{-1})_{xx}^{(2)} \approx -\lambda^4 Q_{xx}^{(2)}, \quad (Q^{-1})_{yy}^{(2)} \approx -\lambda^4 Q_{yy}^{(2)}$$

et

$$(Q^{-1})_{xy}^{(2)} + (Q^{-1})_{yx}^{(2)} \approx -2\lambda^4 Q_{xy}^{(2)}.$$

Dans ce cas, nous déduisons des Éqs. (7.13) et (7.23)-(7.26), que dans l'expression (7.14) il faut rajouter au dénominateur les termes non locaux

$$\lambda^2 \xi^2 \left(c_1^{(2)} q^4 + c_2^{(2)} q_x^2 q_y^2 + c_3^{(2)} (q_x^2 - q_y^2) q_x q_y \right)$$

où ξ est la longueur de cohérence supraconductrice, et les coefficients sans dimensions $c_\mu^{(2)}$ s'écrivent :

$$c_\mu^{(2)} = \frac{\lambda^2 v_F^2}{\lambda_0^2 \xi^2} \pi T \sum_{n>0} \left\langle \frac{|\Delta_{\hat{\mathbf{k}}}|^2 w_\mu^{(2)}}{(\omega_n^2 + |\Delta_{\hat{\mathbf{k}}}|^2)^{5/2}} \right\rangle \quad (7.27)$$

avec

$$\begin{aligned} w_1^{(2)} &= \hat{v}_{Fx}^2 \hat{v}_{Fy}^2 \\ w_2^{(2)} &= (\hat{v}_{Fx}^2 - \hat{v}_{Fy}^2)^2 - 4\hat{v}_{Fx}^2 \hat{v}_{Fy}^2 \\ w_3^{(2)} &= \hat{v}_{Fx} \hat{v}_{Fy} (\hat{v}_{Fx}^2 - \hat{v}_{Fy}^2). \end{aligned}$$

Les termes non-locaux sont généralement importants uniquement à basse température. Dans les supraconducteurs conventionnels uniaxiaux, ce sont les premières contributions anisotropes dans la densité d'énergie libre de London. Cette anisotropie dicte l'orientation du réseau de vortex, et également à basse température la distortion du réseau de vortex.

En ce qui concerne le supraconducteur non-conventionnel UPt₃, la question des premières corrections non locales n'est pas très pertinente pour l'état supraconducteur E_{1g} , car la forme du réseau de vortex est principalement dictée à toute température par l'anisotropie importante des termes locaux. Pour l'état supraconducteur E_{2u} , la situation dépend de la comparaison du terme anisotrope local (faible, de l'ordre de l'anisotropie de la surface de Fermi) par rapport aux premières corrections non-locales (également faibles) qui apparaissent en raison de l'anisotropie du gap supraconducteur dans la phase A (comme résultat du calcul des coefficients (7.27) avec notre modèle de surface de Fermi, le terme non-local dominant - et indépendant de l'anisotropie de la surface de Fermi - est celui de la forme $q_x^2 q_y^2$; dans la phase B ce terme non-local disparaît, le premier terme anisotrope dans le développement du tenseur électromagnétique apparaît alors à l'ordre supérieur). En absence de données quantitatives précises concernant l'ordre de grandeur de l'anisotropie de la surface de Fermi (notre paramètre a), il est difficile de conclure s'il est légitime de négliger les corrections non-locales pour E_{2u} dans la densité d'énergie libre de London.

Conclusion

Nous avons montré que seul l'état supraconducteur à deux composantes E_{2u} parmi les nombreux autres états de symétrie différente est compatible avec l'observation des orientations du réseau de vortex. L'inégalité des longueurs de pénétration de London dans les directions x et y dans le plan basal résultant de la superposition de l'anisotropie hexagonale du cristal et de l'anisotropie tétragonale de l'état supraconducteur conduit pour E_{2u} à une faible distortion d'un réseau de vortex presque parfaitement triangulaire, ce qui est en accord avec les observations. Au contraire, les calculs correspondants pour l'état supraconducteur E_{1g} conduisent à un réseau de vortex fortement distordu et aligné le long des directions cristallographiques du cristal, ce qui est en désaccord avec l'expérience existante.

Ces déclarations et la description théorique des propriétés thermodynamiques et de transport à basses températures [99] établissent avec précision l'état supraconducteur à deux composantes E_{2u} dans UPt_3 .

Chapitre 8

Effet des termes de mélange

Dans ce chapitre, nous discutons de l'effet des termes de mélange présents dans la théorie de Ginzburg-Landau des états supraconducteurs à deux composantes pour $H \parallel c$. Nous mettons en évidence que dans le cadre des modèles avec champ briseur de symétrie, les lignes de transition dans l'état mixte sont plutôt des crossovers que des lignes de transition de phase du second ordre. Nous discutons les conséquences d'un tel résultat pour la théorie du réseau de vortex au voisinage de la transition A-B. Les grandes lignes de ce chapitre ont été publiées dans la Réf. [110].

8.1 Au voisinage de la transition A-B

La théorie du réseau de vortex à l'équilibre dans UPt₃ développée précédemment est valable pour la phase supraconductrice A près de la transition vers l'état normal, où la symétrie de l'état supraconducteur est principalement dictée par l'une des deux composantes du paramètre d'ordre $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2)$. Une tentative pour étendre cette analyse [101] vers la transition de phase entre les phases supraconductrices A et B a été entreprise dans la lettre récente [111] pour le modèle E_{2u} . À notre avis, l'approche et les conclusions de la Réf. [111] sont fausses et nous présentons dans ce chapitre pourquoi il en est ainsi.

Pour un champ $H \parallel c$, la densité d'énergie libre pour les modèles à deux composantes E_{1g} et E_{2u} avec champ briseur de symétrie est

$$\begin{aligned}
f = & \alpha_0 \tau_1 |\eta_1|^2 + \alpha_0 \tau_2 |\eta_2|^2 + \beta_1 (\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\eta}^*)^2 + \beta_2 |\boldsymbol{\eta} \cdot \boldsymbol{\eta}|^2 + \\
& + K_1 |D_i \eta_j|^2 + K_2 (D_i \eta_i) (D_j \eta_j)^* + K_3 (D_i \eta_j) (D_j \eta_i)^* . \quad (8.1)
\end{aligned}$$

Les équations de Ginzburg-Landau pour $H \parallel z$ après avoir pris par brièveté $\beta_2 = 0$ sont [95]

$$\begin{aligned}
[\alpha_0 \tau_1 + 2\beta_1 (|\eta_1|^2 + |\eta_2|^2) + (K_{123} D_x^2 + K_1 D_y^2)] \eta_1 = \\
- (K_2 D_x D_y + K_3 D_y D_x) \eta_2, \quad (8.2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[\alpha_0 \tau_2 + 2\beta_1 (|\eta_1|^2 + |\eta_2|^2) + (K_{123} D_y^2 + K_1 D_x^2)] \eta_2 = \\
- (K_3 D_x D_y + K_2 D_y D_x) \eta_1, \quad (8.3)
\end{aligned}$$

où $\tau_1 = (T - T_1)$, $\tau_2 = (T - T_2)$ avec les températures $T_1 > T_2$. Il s'agit d'équations différentielles non-linéaires couplées. Les termes de mélange présents (K_2 et $K_3 \neq 0$) sont responsables du couplage des Éqs. (8.2) et (8.3).

Près de la transition de phase vers l'état normal, soit quand

$$H \rightarrow H_{c2} = -\Phi_0 \alpha_0 \tau_1 / 2\pi \sqrt{K_1 K_{123}},$$

la composante η_2 s'exprime à partir de la première composante η_1 selon[101]:

$$\eta_2 = - \frac{(K_3 D_x D_y + K_2 D_y D_x) \eta_1}{\alpha_0 (T - T_{c2})}, \quad (8.4)$$

et η_1 est solution de l'Éq. (8.2) non linéaire prise à $\eta_2 = 0$ (ici $T_{c2} = T_2 - 2\beta_1 \langle |\eta_1|^2 \rangle / \alpha_0$).

Il est clair que dans la région du voisinage de la transition A-B ($T \rightarrow T_{c2}$), la relation simple (8.4), linéaire mais non locale, entre les deux composantes du paramètre d'ordre est divergente et inapplicable. La croissance de l'amplitude de η_2 vers la transition entre les états A et B est limitée en fait principalement par les termes nonlinéaires (et locaux) dans l'énergie libre. Les termes de mélange de gradient (côté droit des Éqs. (8.2)-(8.3)) transforment les lignes de transition de phase A-B et A-C en régions de crossover entre des états supraconducteurs ayant la même symétrie. Les crossovers ne sont certainement pas caractérisés par une divergence de la longueur de cohérence correspondante comme cela doit être le cas dans une transition de phase du

second ordre réelle. Nous justifions de façon plus détaillée ces déclarations dans la section suivante.

Notons que les termes de mélange sont présents dans les équations de Ginzburg-Landau en fait pour toutes les orientations de $\mathbf{H}$ sauf pour les deux orientations particulières $\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}$ ou $\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}^*$. Par conséquent, dans le cadre des modèles à deux composantes avec champ briseur de symétrie, il n'y a pas de transition de phase du second ordre dans l'état mixte supraconducteur de façon très générale.

8.2 Effet des termes de mélange : un modèle effectif

La fonctionnelle de Ginzburg-Landau (8.1) est compliquée à deux titres : (i) du fait de la présence de deux composantes, et (ii) du fait de l'inhomogénéité des solutions d'équilibre. Pour justifier nos déclarations dans la section précédente et appréhender plus physiquement l'effet des termes de mélange, nous pouvons considérer un modèle effectif (avec lequel nous ne prétendons pas résoudre les Éqs. (8.2)-(8.3) mais seulement les comprendre en partie). Notre but est principalement d'étudier qualitativement l'effet des termes de mélange, et pour cela nous pouvons ultra-simplifier le problème en considérant par exemple que l'amplitude et la forme du paramètre d'ordre peuvent être ajustés séparément (par une méthode variationnelle). Écrivons les deux composantes du paramètre d'ordre sous la forme $\eta_i = \eta_{i,\infty} \tilde{\eta}_i(x, y)$, avec $\langle |\tilde{\eta}_i|^2 \rangle = 1$ (la moyenne est prise sur le réseau de vortex). Supposons que les parties inhomogènes $\tilde{\eta}_i$ soient connues. Les parties uniformes $\eta_{i,\infty}$ des composantes du paramètre d'ordre minimisent quant à elles la densité d'énergie libre effective moyennée sur le réseau $f^{\text{eff}}(\eta_{1,\infty}, \eta_{2,\infty}) = \langle f \rangle$ qui peut s'écrire comme

$$f^{\text{eff}}(\eta_{1,\infty}, \eta_{2,\infty}) = \alpha_0 \tau_1^* \eta_{1,\infty}^2 + \alpha_0 \tau_2^* \eta_{2,\infty}^2 + \beta_* \eta_{1,\infty}^2 \eta_{2,\infty}^2 + 2q_* \eta_{1,\infty} \eta_{2,\infty} + (\beta_1 + \beta_2) (\langle |\tilde{\eta}_1|^4 \rangle \eta_{1,\infty}^4 + \langle |\tilde{\eta}_2|^4 \rangle \eta_{2,\infty}^4), \quad (8.5)$$

où nous avons défini

$$\begin{aligned} \alpha_0 \tau_1^* &= \alpha_0 \tau_1 + \Re \langle \tilde{\eta}_1^* (K_{123} D_x^2 + K_1 D_y^2) \tilde{\eta}_1 \rangle, \\ \alpha_0 \tau_2^* &= \alpha_0 \tau_2 + \Re \langle \tilde{\eta}_2^* (K_{123} D_y^2 + K_1 D_x^2) \tilde{\eta}_2 \rangle, \end{aligned}$$

$$\beta_* = 2\beta_1 \langle |\tilde{\eta}_1|^2 |\tilde{\eta}_2|^2 \rangle + 2\beta_2 \Re \langle \tilde{\eta}_1^2 \tilde{\eta}_2^{*2} \rangle,$$

et

$$q_* = \Re \langle \tilde{\eta}_2^* (K_3 D_x D_y + K_2 D_y D_x) \tilde{\eta}_1 \rangle.$$

Ici, $\Re$ signifie la partie réelle.

La composante d'équilibre $\eta_{1,\infty}$ est déterminée à $\eta_{2,\infty}$ fixée par une équation algébrique cubique de la forme :

$$\frac{\partial f^{\text{eff}}}{\partial \eta_{1,\infty}} = \eta_{1,\infty}^3 + p_1 \eta_{1,\infty} + q_1 = 0, \quad (8.6)$$

avec

$$p_1 = \frac{\alpha_0 \tau_1^* + \beta_* \eta_{2,\infty}^2}{2(\beta_1 + \beta_2) \langle |\tilde{\eta}_1|^4 \rangle}, \quad q_1 = \eta_{2,\infty} \frac{q_*}{2(\beta_1 + \beta_2) \langle |\tilde{\eta}_1|^4 \rangle}. \quad (8.7)$$

De même, la deuxième composante $\eta_{2,\infty}$ à l'équilibre est donnée par

$$\eta_{2,\infty}^3 + p_2 \eta_{2,\infty} + q_2 = 0, \quad (8.8)$$

où

$$p_2 = \frac{\alpha_0 \tau_2^* + \beta_* \eta_{1,\infty}^2}{2(\beta_1 + \beta_2) \langle |\tilde{\eta}_2|^4 \rangle}, \quad q_2 = \eta_{1,\infty} \frac{q_*}{2(\beta_1 + \beta_2) \langle |\tilde{\eta}_2|^4 \rangle}. \quad (8.9)$$

Il est possible de résoudre analytiquement les deux conditions simultanées (8.6) et (8.8). Toutefois, cela n'est pas notre but ici.

Dans notre modèle effectif, les termes de mélange sont responsables de la présence du terme $2q_* \eta_{1,\infty} \eta_{2,\infty}$ dans l'expression (8.5) de f^{eff} . Il est utile de noter qu'en absence de champ magnétique, nous avons précisément $q_* = 0$, et nous retrouvons (en prenant $\tilde{\eta}_i = 1$) directement les solutions du cas homogène [73] à partir des Éqs. (8.6) et (8.8). L'état mixte supraconducteur est caractérisé par un terme $q_* \neq 0$, qui conduit à $\eta_{2,\infty} \neq 0$ indépendamment du coefficient p_2 (c'est-à-dire de la température et du champ magnétique).

Le point essentiel est que les termes de mélange dans notre modèle effectif introduisent une contribution **linéaire** (et non quadratique) avec l'une ou l'autre des composantes du paramètre d'ordre dans l'expression de la densité d'énergie libre. Si nous supposons, pour simplifier encore, l'une des deux composantes du paramètre d'ordre fixée, notre densité d'énergie libre effective est formellement similaire à celle qui décrit une transition ferromagnétique sous l'effet d'un champ magnétique extérieur. En effet, dans ce dernier exemple [112], la densité d'énergie libre est de la forme

$$f = \alpha_0 \tau \eta^2 + \beta \eta^4 - h \eta \quad (8.10)$$

où le terme $-h\eta$ (linéaire avec le paramètre d'ordre η) est introduit par l'application d'un champ magnétique externe. Ici α_0 et β sont des constantes positives et $\tau = T - T_c$. En absence de champ ($h = 0$), la transition ferromagnétique à T_c est une transition de phase du second ordre, délimitant deux phases de symétrie différente (la phase la plus symétrique à haute température est caractérisée par $\eta = 0$, la phase basse température par $\eta_0 = \sqrt{-\alpha_0 \tau / 2\beta} \neq 0$). Sous champ, le paramètre d'ordre à l'équilibre est régi par une équation cubique du même type qu'en (8.6) et (8.8) :

$$4\beta\eta^3 + 2\alpha_0\tau\eta = h. \quad (8.11)$$

Près de T_c , soit $\tau \sim 0$, le terme non-linéaire $4\beta\eta^3$ est important puisqu'il contrôle l'amplitude non nulle du paramètre d'ordre

$$4\beta\eta^3 \sim h. \quad (8.12)$$

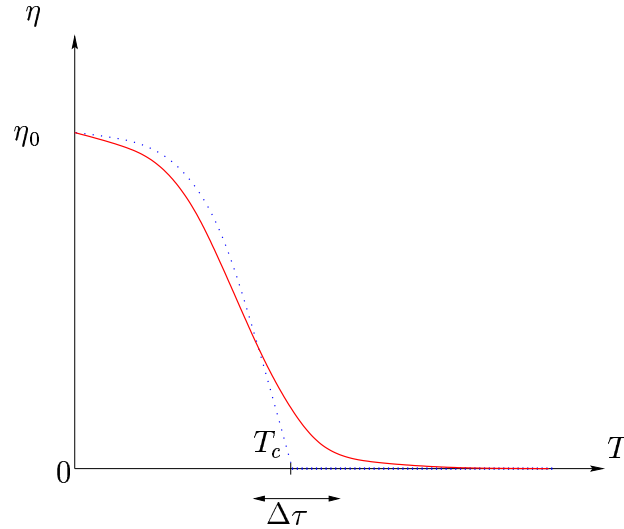


FIG. 8.1 – Variation de l'amplitude du paramètre d'ordre d'équilibre sous champ (en trait plein) et en absence de champ (trait en pointillés) avec la température.

Comme discuté dans le Landau-Lishitz (Réf. [112]), l'effet du terme perturbatif induit par le champ est de réduire la symétrie de la phase la plus

symétrique quelle que soit l'amplitude de h : le point de transition discret à T_c qui prévalait pour $h = 0$ disparaît. Ainsi, les discontinuités apparaissant dans la chaleur spécifique et existant à champ magnétique nul sont lissées en présence de champ. Le paramètre d'ordre (non nul quelle que soit la température, Fig. 8.1) varie plus ou moins rapidement au voisinage de l'ancien point de transition sur une fenêtre en température de l'ordre de [112]

$$\Delta\tau \sim h^{2/3} \beta^{1/3} / \alpha_0. \quad (8.13)$$

La largeur $\Delta\tau$ du crossover augmente avec l'amplitude du champ h (voir la Fig. 8.2).

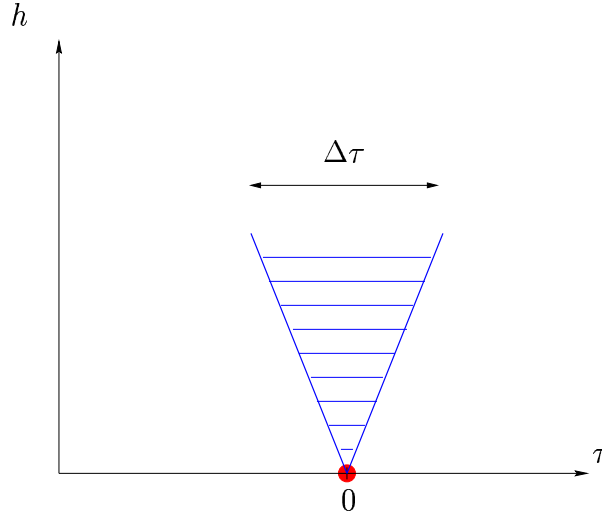


FIG. 8.2 – Le point de transition discret à T_c pour $h = 0$ disparaît dès que $h \neq 0$. Les régions haute température et basse température sont délimitées par une zone de crossover dont la largeur croît avec l'amplitude du champ.

En appliquant ce résultat pour UPt_3 avec la correspondance

$$h\eta \leftrightarrow q_*\eta_{1,\infty}\eta_{2,\infty},$$

nous nous attendons qualitativement à ce que la largeur caractéristique $\Delta\tau$ du crossover A-B dans l'état mixte soit relativement faible pour le modèle E_{2u} (pour lequel les termes de mélange sont faibles) et, au contraire, est relativement importante pour l'état supraconducteur E_{1g} (terme de mélanges importants). À ce stade, nous sommes incapables d'obtenir des informations plus

quantitatives permettant de discriminer plus concrètement les deux modèles E_{1g} et E_{2u} .

8.3 Réseau de vortex au voisinage de la transition A-B

Revenons désormais au traitement des équations de Ginzburg-Landau par Agterberg et Dodgson [111] pour déterminer le réseau de vortex près de la transition A-B dans UPt₃.

Au voisinage de la transition A-B ($T \rightarrow T_{c2}$), les auteurs de la lettre [111] n'attachent pas d'importance à la contribution du terme nonlinéaire

$$2\beta_1 |\eta_2|^2 \eta_2$$

dans l'Éq. (8.3) en considérant pour $H \sim H_{c1}$ (avec $K_2 = K_3 \ll K_1$) la relation

$$(\alpha_0 (T - T_{c2}) + K_1 \mathbf{D}^2) \eta_2 = -K_2 (D_x D_y + D_y D_x) \eta_1. \quad (8.14)$$

La divergence à $T \rightarrow T_{c2}$ est évitée ici par la présence de l'opérateur différentiel agissant sur η_2 . Substituant en retour l'Éq. (8.14) dans la partie en gradient de l'énergie libre, Agterberg et Dodgson ont trouvé une fonctionnelle effective non-locale pour l'énergie de London (d'ordre 4 en gradients) pour les champs et courants provenant de η_1 . Ces termes non-locaux additionnels dans l'énergie de London deviennent importants quand $T \rightarrow T_{c2}$. Comme résultats, les auteurs de la Réf. [111] en ont tiré de nombreuses conclusions concernant les structures du réseau d'Abrikosov au voisinage de la transition AB.

Il est possible d'estimer sous quelles conditions il est légitime de négliger le terme non-linéaire à $T \sim T_{c2}$. En utilisant l'Éq. (8.14), nous avons

$$\frac{\beta_1 \langle |\eta_2|^4 \rangle}{K_1 \langle |\mathbf{D}\eta_2|^2 \rangle} \sim \left(\frac{K_2}{K_1} \right)^2 \kappa^2 \left(\frac{\lambda}{d} \right)^4, \quad (8.15)$$

où $\kappa \approx 60$ est le paramètre de Ginzburg-Landau pour UPt₃, d est la distance entre les vortex et λ est la longueur de pénétration de London. Quand $H \rightarrow H_{c1}$, la distance d'équilibre intervortex sature à la valeur $d \sim \lambda (\ln \kappa)^{-1/2}$ de telle sorte que le terme non-linéaire est effectivement négligeable quand

$$\frac{K_2}{K_1} < (\kappa \ln \kappa)^{-1}. \quad (8.16)$$

D'un autre côté, et de façon insidieuse, l'approche de la Réf. [111] ne considère pas les termes non-locaux habituels provenant des termes d'ordre 4 en gradient agissant sur η_1 dans l'énergie libre, ce qui est valable si

$$\frac{K_2}{K_1} > \kappa^{-1}. \quad (8.17)$$

Comme les deux conditions (8.16) et (8.17) sont incompatibles, nous concluons par conséquent que les termes non-linéaires sont bien importants au voisinage du crossover AB.

Notons que dans leur réponse à notre critique, Agterberg et Dodgson [113] argumentent qu'au contraire la distance intervortex ne sature pas lorsque $H \rightarrow H_{c1}$, mais tend vers l'infini. Par conséquent, ils sont en désaccord avec la condition (8.16), et affirment qu'il est toujours possible, étant suffisamment près de H_{c1} , de négliger les termes non-linéaires ...

Conclusion

En conclusion, nous avons montré qu'en raison des termes de mélange, les deux composantes du paramètre d'ordre sont non nulles à toute température dans l'état mixte : dès que la formation d'une seule composante inhomogène devient favorable, la deuxième composante est inévitablement induite par les variations spatiales de la première.

La contribution des termes de mélange a d'importantes répercussions physiques sur notre interprétation qualitative du diagramme $H-T$ de UPt_3 dans le cadre du scénario d'un état supraconducteur à deux composantes couplé avec un champ briseur de symétrie. Notamment, elle implique qu'en réalité, dès que le champ magnétique n'est plus parallèle aux directions cristallographiques $\mathbf{a}$ et $\mathbf{a}^$ du plan basal, les différentes phases A , B et C de l'état mixte ne sont pas délimitées par des lignes de transition de phase du second ordre, mais plutôt par des crossovers. Par conséquent, la croyance répandue que les phases mixtes A , B et C sont caractérisées par des états supraconducteurs de symétries différentes (comme cela devrait être le cas en présence de véritables transitions de phases du second ordre au sens de Landau) n'est pas fondée dans le cadre du scénario avec champ briseur de symétrie. Au contraire, la symétrie de l'état fondamental supraconducteur est, à strictement parler, la même dans tout l'état mixte. Nous pouvons identifier la phase A (terminologie en fait impropre?) comme étant la région du diagramme $H-T$ où l'une des deux composantes du paramètre d'ordre supraconducteur est beaucoup plus petite que l'autre composante, et la phase B comme étant la région où les deux composantes ont le même poids. L'identification de la région C reste à être déterminée.*

Probablement, l'état supraconducteur E_{1g} est caractérisé par un crossover avec une largeur caractéristique en température qui devient de plus en plus large très rapidement avec le champ magnétique, ce qui serait incompatible avec le diagramme de phase expérimental. Au contraire, nous nous attendons à ce que le crossover soit très étroit en température pour l'état supraconducteur E_{2u} , ce qui pourrait expliquer pourquoi expérimentalement les lignes de transition entre les différentes phases de l'état mixte ressemblent à des lignes de transition de phase.

Chapitre 9

Étude de l'effet des défauts sur la pente du second champ critique

Dans ce chapitre, nous calculons la dépendance de la pente initiale du second champ critique en fonction de la concentration en impuretés pour un champ magnétique parallèle à l'axe hexagonal du cristal pour les deux modèles à deux composantes E_{1g} et E_{2u} de l'état supraconducteur dans UPt_3 .

9.1 Problématique

L'étude présentée dans ce chapitre a été initialement motivée par l'étude expérimentale présentée dans la thèse de P. Rodière [67] concernant l'influence des impuretés sur les propriétés supraconductrices de UPt_3 . Rodière *et al.* avaient réussi à synthétiser des échantillons de bonne qualité, qu'ils avaient par la suite irradiés par des électrons de haute énergie dans le but de contrôler la concentration en impuretés non-magnétiques. Puis, ils ont comparé la pente initiale du second champ critique H_{c2} à T_c pour des échantillons de différente qualité [67] et pour différentes orientations du champ magnétique. Nous étudions dans ce chapitre si, à partir de cette dépendance, il n'est pas possible de mettre en évidence avec les modèles théoriques la symétrie de l'état supraconducteur.

Dans les supraconducteurs non-conventionnels, il est bien connu (voir Annexe E) que les impuretés non magnétiques conduisent à une perte de

cohérence de phase de la fonction d'onde décrivant les paires d'électrons [114]. Ainsi, la température critique décroît en fonction de la concentration en impuretés n_i présentes dans l'échantillon. La loi de suppression de la supraconductivité est régie par la loi d'Abrikosov-Gorkov [115] dérivée pour les supraconducteurs non-conventionnels par Larkin [114]

$$\ln \frac{T_c}{T_{c0}} = \Psi \left(\frac{1}{2} \right) - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau T_c} \right). \quad (9.1)$$

Ici Ψ est la fonction digamma. Le temps τ de relaxation est relié à la concentration en impuretés n_i et l'amplitude de diffusion u dans l'approximation de Born via la relation

$$n_i u^2 = \frac{1}{2\pi N_0 \tau} \quad (9.2)$$

où $N_0 = m^2 v_F / 2\pi^2$ est la densité d'états 3D par projection de spin du métal normal (surface de Fermi sphérique).

Le résultat (9.1) découlant directement de l'anisotropie du paramètre d'ordre supraconducteur, est valable pour tout état supraconducteur non conventionnel. De la loi (9.1), il est possible d'extraire la concentration en impuretés critique n_{ic} au-delà de laquelle il n'y plus de supraconductivité. Si l'on exprime la température réduite $t = T_c/T_{c0}$ en fonction de la concentration en impuretés réduite $x = n_i/n_{ic}$, il est facile de voir que la loi (9.1) est universelle en la réécrivant comme

$$\ln t = \Psi \left(\frac{1}{2} \right) - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{x}{4\gamma t} \right), \quad (9.3)$$

où $\ln \gamma = 0.577\dots$ est la constante de Euler. La dépendance est représentée en Fig. 9.1.

En revanche, la loi de suppression de la supraconductivité par les impuretés en présence de champ magnétique dépend généralement de la symétrie de l'état supraconducteur, ainsi que de l'orientation de ce champ. Cette question pour UPt_3 a en partie déjà été traitée dans les travaux de Choi et Sauls [88] pour un modèle spécifique d'état supraconducteur (le modèle spin-triplet E_{1u}).

Le calcul de Choi et Sauls considère, en plus des impuretés, l'influence du couplage paramagnétique présent pour $H \parallel c$ lorsque que le spin triplet de la paire reste bloqué dans le plan basal (voir Chap. 6).

Pour $H \perp c$, Choi et Sauls ont trouvé que la self-énergie due au impuretés est nulle. Ce résultat est en fait très général puisqu'il valable pour tous les

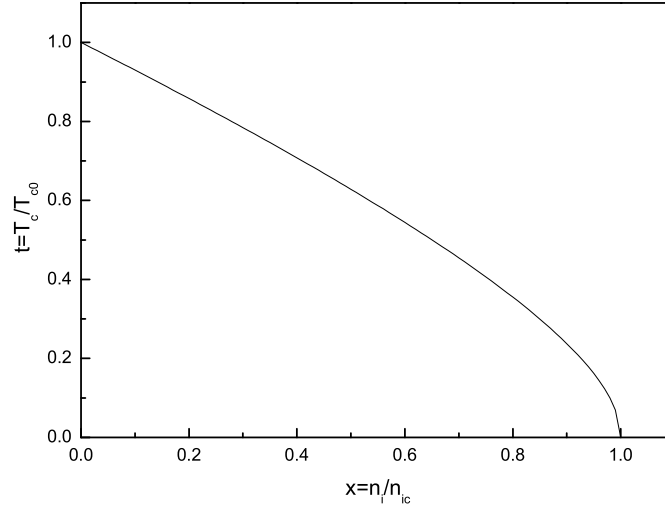


FIG. 9.1 – *Loi universelle de suppression de la température critique par les impuretés non magnétiques dans les supraconducteurs non conventionnels.*

modèles spin-triplet de l'état supraconducteur. Comme conséquence, la loi de dépendance de la pente du second champ critique avec la concentration en impuretés est la même pour tous les états supraconducteurs avec appariement triplet. Pour $H \parallel c$, la self-énergie n'est a priori pas nulle (c'est le cas pour E_{1u}), et la loi dépend de la symétrie de l'état supraconducteur. Or, dans l'article original, Choi et Sauls ne prennent pas en compte le modèle désormais le plus probable, E_{2u} , pour le paramètre d'ordre.

Le calcul correspondant du second champ critique pour $H \parallel c$ considérant le modèle E_{2u} a été publié par Yang et Maki [116]. Toutefois, ces derniers auteurs ont axé leur étude uniquement sur l'influence du terme paramagnétique (leur but était principalement de comparer quantitativement leur résultat avec celui de Choi et Sauls). Yang et Maki ont trouvé un bon accord avec la forme expérimentale des courbes $H_{c2}(T)$ pour les directions dans le plan basal et perpendiculaire au plan basal.

Dans ce chapitre, nous prenons en compte l'effet des impuretés sur le champ critique pour les modèles à deux composantes E_{1g} et E_{2u} pour $H \parallel c$

en négligeant le terme paramagnétique présent pour E_{2u} , car son effet est négligeable près de T_c . Pour simplifier également, nous ne prendrons pas en compte l'effet du champ briseur de symétrie.

9.2 Équations générales pour le second champ critique

Sous champ magnétique, les différentes composantes du paramètre d'ordre supraconducteur $\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{k})$ dépendent à la fois des directions du moment $\hat{\mathbf{k}}$ de la paire sur la surface du Fermi, et de la position spatiale $\mathbf{R}$ de la paire.

Sans impuretés

Près de la transition supraconductrice, l'équation générale matricielle régissant le paramètre d'ordre pour les supraconducteurs dans la limite propre s'écrit [117]

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{r}') = -T \sum_{\omega_n} \int d\mathbf{r} V_{\beta\alpha, \lambda\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') G_{\omega_n}^{\lambda\gamma}(\mathbf{r}) G_{-\omega_n}^{\mu\delta}(\mathbf{r}) \times \exp[i\mathbf{r}\mathbf{D}(\mathbf{R})] \Delta_{\gamma\delta}(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (9.4)$$

où l'opérateur

$$\mathbf{D}(\mathbf{R}) = -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{2e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{R}).$$

Ici $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ sont les fréquences de Matsubara, $\mathbf{A}$ est le potentiel vecteur, $V_{\beta\alpha, \lambda\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est le potentiel d'interaction de paire. Les fonctions de Green électroniques du métal normal sont des matrices 2×2 diagonales

$$G_{\omega_n}^{\lambda\gamma}(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} ([i\omega_n - \xi_{\mathbf{p}}] \sigma_0 - \mu_e \sigma_z H)_{\lambda\gamma}^{-1} \quad (9.5)$$

avec $\xi_{\mathbf{p}} = p^2/2m - \varepsilon_F$ et σ_0 la matrice unité.

L'équation différentielle d'ordre infini (9.4) donne la valeur du second champ critique. Les équations de Ginzburg-Landau linéarisées peuvent être retrouvées à partir de cette expression pour un modèle particulier d'état supraconducteur en développant la fonction exponentielle dans la dernière ligne de (9.4).

En absence de terme paramagnétique, les termes diagonaux de $G^{\lambda\gamma}$ sont identiques et égaux à

$$\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{p}}} = -\frac{m}{2\pi r} \exp \left[ip_F r \sqrt{1 + \frac{i\omega_n}{\varepsilon_F} \text{sign}\omega_n} \right] \quad (9.6)$$

$$\approx -\frac{m}{2\pi r} \exp \left[ip_F r \text{sign}\omega_n - \frac{r|\omega_n|}{v_F} \right] \quad (9.7)$$

pour $|\omega_n|/\varepsilon_F \ll 1$.

Le terme paramagnétique (levant la dégénérescence de spin) peut être facilement pris en compte dans cette expression via la prescription pour le spin $\uparrow$ par exemple consistant à remplacer ω_n par $\omega_n + i\mu_e H$. Pour les spin $\uparrow$ (+) et spin $\downarrow$ (-), on a donc

$$G_{\omega_n}^{\pm\pm}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi r} \exp \left[ip_F^{\pm} r \text{sign}\omega_n - \frac{r|\omega_n|}{v_F^{\pm}} \right] \quad (9.8)$$

avec $N_0 = mp_F/2\pi^2$ la densité par projection de spin prise au niveau de Fermi ε_F , $p_F = mv_F$, $p_F^{\pm} = [2m(\varepsilon_F \pm \mu_e H)]^{1/2}$.

Avec impuretés

En présence d'impuretés, il est nécessaire de résoudre deux équations matricielles couplées faisant intervenir le paramètre d'ordre matriciel et la self-énergie anormale $\Sigma_{\gamma\delta}(\tilde{\omega}_n, \mathbf{R})$

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{r}') = -T \sum_n \int d\mathbf{r} V_{\beta\alpha, \lambda\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') G_{\tilde{\omega}_n}^{\lambda\gamma}(\mathbf{r}) G_{-\tilde{\omega}_n}^{\mu\delta}(\mathbf{r}) \exp[i\mathbf{r}\mathbf{D}(\mathbf{R})] \\ \{\Delta_{\gamma\delta}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + \Sigma_{\gamma\delta}(\tilde{\omega}_n, \mathbf{R})\} \quad (9.9)$$

et

$$\Sigma_{\gamma\delta}(\tilde{\omega}_n, \mathbf{R}) = n_i u^2 \int d\mathbf{r} G_{\tilde{\omega}_n}^{\gamma\alpha}(\mathbf{r}) G_{-\tilde{\omega}_n}^{\beta\delta}(\mathbf{r}) \exp[i\mathbf{r}\mathbf{D}(\mathbf{R})] \\ \{\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) + \Sigma_{\alpha\beta}(\tilde{\omega}_n, \mathbf{R})\}. \quad (9.10)$$

En présence d'impuretés nous devons remplacer dans l'Éq. (9.5) ω_n par $\tilde{\omega}_n = \omega_n + \Gamma_{\pm} \text{sgn}\omega_n$ (en considérant que $\Gamma_{\pm} \ll \varepsilon_F$) où $\Gamma_{\pm} = 1/2\tau_{\pm}$ est

l'élargissement en énergie dû aux impuretés pour les électrons de spin up (+) ou down (-). Pour tenir compte des impuretés, il faut par conséquent ajouter à (9.8) le facteur

$$\exp\left(-\frac{r\Gamma_{\pm}}{v_F^{\pm}}\right).$$

Ainsi, les différents produits possibles des fonctions de Green donnent

$$G_{\tilde{\omega}_n}^{\pm}(\mathbf{r})G_{-\tilde{\omega}_n}^{\pm}(\mathbf{r}) = \left(\frac{m}{2\pi r}\right)^2 e^{-2r\frac{(|\omega_n|+\Gamma_{\pm})}{v_F^{\pm}}} \quad (9.11)$$

et

$$G_{\tilde{\omega}_n}^{\pm}(\mathbf{r})G_{-\tilde{\omega}_n}^{\mp}(\mathbf{r}) = \left(\frac{m}{2\pi r}\right)^2 e^{-r\frac{(|\omega_n|+\Gamma_+)}{v_F^+}} e^{-r\frac{(|\omega_n|+\Gamma_-)}{v_F^-}} e^{ir(p_F^+ - p_F^-)\text{sgn}\omega_n} \quad (9.12)$$

$$\approx \left(\frac{m}{2\pi r}\right)^2 e^{-2r\frac{(|\omega_n|+\Gamma)}{v_F}} e^{\mp 2ir\frac{\mu_e H}{v_F}\text{sgn}\omega_n} \quad (9.13)$$

en supposant que $\mu_e H \ll \varepsilon_F$ et $\Gamma_+ = \Gamma_- = \Gamma$.

Principe de résolution

L'intégration sur $\mathbf{r}$ s'effectue en utilisant la paramétrisation en variables sphériques

$$\int d\mathbf{r} \rightarrow \int \int d\Omega r^2 dr$$

avec l'élément d'angle solide $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ (φ est l'angle dans plan (x, y) et θ est l'angle à partir de l'axe z).

Si la surface de Fermi est isotrope (sphérique) comme ce sera l'hypothèse dans tout ce chapitre, les fonctions de Green $G_{\tilde{\omega}_n}^{\gamma\alpha}(\mathbf{r})$ ne dépendent pas des angles θ et φ . La dépendance angulaire est alors uniquement contenue dans le potentiel d'interaction de paire, le paramètre d'ordre et le facteur exponentiel $\exp[i\mathbf{r}\mathbf{D}(\mathbf{R})]$.

À champ magnétique nul :

Pour tout appariement anisotrope, on a

$$\int d\Omega V_{\beta\alpha, \lambda\mu}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{r}}') = 0$$

et

$$\int d\Omega \Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{R}, \hat{\mathbf{r}}) = 0.$$

Alors, la self-énergie $\Sigma_{\alpha\beta}(\tilde{\omega}_n, \mathbf{R})$ due aux impuretés est nulle. C'est ainsi que l'on met en évidence avec l'Éq. (9.9) la loi universelle de réduction de la température critique par les impuretés dans les supraconducteurs non conventionnels.

À champ magnétique non nul :

La situation dépend du facteur exponentiel (qui est un opérateur) désormais présent. La forme de celui-ci après intégration sur les variables angulaires est directement reliée à la symétrie particulière de l'état supraconducteur et à la direction du champ magnétique.

Lorsque le champ $H \parallel z$, on cherche $\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{R})$ sous la forme

$$\Delta_{\alpha\beta}(\mathbf{R}) = e^{ip_z Z} f(\rho)$$

où $\rho = (X, Y)$. En absence des termes paramagnétiques, le champ magnétique critique supérieur maximum est obtenu pour $p_z = 0$.

Le facteur exponentiel est usuellement traité en notant que

$$\mathbf{rD}(\mathbf{R}) = r \sin \theta \cos \varphi D_x + r \sin \theta \sin \varphi D_y + r \cos \theta D_z \quad (9.14)$$

$$= \frac{r}{\sqrt{2}} \sin \theta (e^{-i\varphi} D_+ + e^{i\varphi} D_-) + r \cos \theta D_z \quad (9.15)$$

avec $D_{\pm} = \frac{D_x \pm i D_y}{\sqrt{2}}$ les opérateurs création et annihilation de l'oscillateur harmonique. Ici les opérateurs D_+ et D_- ne commutent pas, et par conséquent il faut procéder avec prudence. Ne considérant pas la composante D_z (car nous ne prenons pas en compte la variation du paramètre d'ordre le long du champ, ce qui est valable en absence de terme paramagnétique comme ce sera le cas par la suite), le facteur exponentiel se décompose donc comme [84]

$$e^{i\mathbf{rD}(\mathbf{R})} = e^{-\frac{\pi H}{2\Phi_0} r^2 \sin^2 \theta} e^{i \frac{r}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} D_+} e^{i \frac{r}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} D_-} \quad (9.16)$$

$$= e^{-\frac{\pi H}{2\Phi_0} r^2 \sin^2 \theta} \sum_{j,k} \left(\frac{ir \sin \theta}{\sqrt{2}} \right)^{j+k} \frac{e^{i\varphi(k-j)}}{j!k!} D_+^j D_-^k. \quad (9.17)$$

Les opérateurs D_+ et D_- agissent sur les état propres $|N\rangle$ de l'oscillateur harmonique comme

$$D_+|N\rangle = \sqrt{N+1} \left(\frac{2\pi H}{\Phi_0} \right)^{1/2} |N+1\rangle, \quad (9.18)$$

$$D_-|N\rangle = \sqrt{N} \left(\frac{2\pi H}{\Phi_0} \right)^{1/2} |N-1\rangle, \quad (9.19)$$

soit

$$D_+D_-|N\rangle = N \frac{2\pi H}{\Phi_0} |N\rangle, \quad (9.20)$$

$$D_+^n D_-^n |N\rangle = \frac{N!}{(N-n)!} \left(\frac{2\pi H}{\Phi_0} \right)^n |N\rangle. \quad (9.21)$$

L'intégration sur l'angle φ ne présente alors aucune difficulté. L'intégration sur l'angle θ est triviale près de T_c , lorsque l'on peut faire l'approximation

$$e^{-\frac{\pi H}{2\Phi_0} r^2 \sin^2 \theta} \approx 1 - \frac{\pi H}{2\Phi_0} r^2 \sin^2 \theta.$$

Equations pour les modèles à deux composantes de UPt_3

Dans le modèle E_{2u} , l'appariement de spin est triplet. En revanche, seule une des composantes du paramètre d'ordre vectoriel $\mathbf{d}$ est non nulle

$$\Delta_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & d_z \\ d_z & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.22)$$

Dans le modèle E_{1g} d'appariement de spin singulet, le paramètre d'ordre matriciel s'écrit

$$\Delta_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & g \\ -g & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.23)$$

Dans les deux modèles, l'état supraconducteur est décrit par une seule composante de spin qui s'écrit à partir de deux composantes orbitales (η_+, η_-) comme

$$d_z = g = (\Phi^*(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r})) \begin{pmatrix} \eta_+(\mathbf{R}) \\ \eta_-(\mathbf{R}) \end{pmatrix}, \quad (9.24)$$

où les $\Phi(\mathbf{k})$ sont les fonctions de base associées à une représentation irréductible de dimension 2 donnée (E_1 ou E_2).

Utilisant les formes (9.22), (9.23) et (9.24) pour le paramètre d'ordre, les équations matricielles générales (9.9) et (9.10) se transforment alors en 3 équations scalaires (en négligeant les termes paramagnétiques) portant sur $\eta_{\pm}$ et une composante Σ

$$\begin{pmatrix} \eta_+ \\ \eta_- \end{pmatrix} = \frac{\pi N_0 V}{v_F} T \sum_n \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \sin \theta \begin{pmatrix} \Phi \\ \Phi^* \end{pmatrix} e^{-2r \frac{(|\omega_n| + \Gamma)}{v_F}} \times e^{i\mathbf{r}\mathbf{D}(\mathbf{R})} \left((\Phi^* \Phi) \begin{pmatrix} \eta_+ \\ \eta_- \end{pmatrix} + \Sigma \right) \quad (9.25)$$

et

$$\Sigma = \frac{\Gamma}{v_F} \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \sin \theta e^{-2r \frac{(|\omega_n| + \Gamma)}{v_F}} e^{i\mathbf{r}\mathbf{D}(\mathbf{R})} \left((\Phi^* \Phi) \begin{pmatrix} \eta_+ \\ \eta_- \end{pmatrix} + \Sigma \right) \quad (9.26)$$

9.3 Dépendance pour le modèle E_{1g}

Pour E_{1g} , la fonction de base s'écrit $\Phi(\theta, \varphi) = f_1(\theta)e^{i\varphi}$ avec $f_1(\theta) = \cos \theta \sin \theta$. La solution générale des Éqs. (9.25)-(9.26) est de la forme

$$\begin{pmatrix} \eta_+ \\ \eta_- \\ \Sigma \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} |N+2\rangle \\ |N\rangle \\ |N+1\rangle \end{pmatrix}. \quad (9.27)$$

Le champ critique maximum est obtenu pour $N = 0$. Posons

$$\eta_+ = b_+ |2\rangle, \quad \eta_- = b_- |0\rangle,$$

et

$$\Sigma = w |1\rangle.$$

La self-énergie s'exprime simplement à partir des deux composantes $b_{\pm}$ du paramètre d'ordre

$$\begin{aligned} w = i \frac{\Gamma}{v_F} \iint dr d\theta dx \sin \theta f_1(\theta) e^{-2r \frac{(|\omega_n| + \Gamma)}{v_F}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left(\sqrt{2} b_+ \left[1 - \frac{x^2}{2} \right] + b_- \right) \\ \times \left(1 - \frac{\Gamma}{v_F} \iint dr d\theta \sin \theta e^{-2r \frac{(|\omega_n| + \Gamma)}{v_F}} e^{-\frac{x^2}{2}} L_1(x^2) \right)^{-1} \quad (9.28) \end{aligned}$$

où les $L_N(x)$ sont les polynômes de Laguerre de degré N et nous avons introduit la notation

$$x = \frac{r}{\sqrt{2}l_H} \sin \theta = \sqrt{\frac{\pi H}{\Phi_0}} r \sin \theta.$$

Il est facile de voir que l'intégration sur θ dans l'expression de la self-énergie implique que

$$w = 0.$$

Ce résultat provient du terme $\cos \theta$ dans $f_1(\theta)$ qui est une fonction impaire dans l'intervalle $[0, \pi]$. Nous sommes donc ramenés à résoudre le système 2×2 suivant

$$\begin{aligned} b_+ &= \frac{N_0 V}{v_F} \pi T \sum_n \iint dr d\theta \sin \theta f_1^2(\theta) e^{-2r \frac{(|\omega_n| + \Gamma)}{v_F}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left[b_+ L_2(x^2) - b_- \frac{x^2}{\sqrt{2}} \right] \\ b_- &= \frac{N_0 V}{v_F} \pi T \sum_n \iint dr d\theta \sin \theta f_1^2(\theta) e^{-2r \frac{(|\omega_n| + \Gamma)}{v_F}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left[b_- - b_+ \frac{x^2}{\sqrt{2}} \right]. \end{aligned} \quad (9.29)$$

Près de T_c , la quantité $x \ll 1$, et les équations se simplifient alors pour donner le système d'équations

$$\begin{aligned} b_+ \left[\ln \frac{T_{c0}}{T} - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau T} \right) + \Psi \left(\frac{1}{2} \right) \right] &= h_1 \left(\frac{5}{2} b_+ + \frac{b_-}{\sqrt{2}} \right) \\ b_- \left[\ln \frac{T_{c0}}{T} - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau T} \right) + \Psi \left(\frac{1}{2} \right) \right] &= h_1 \left(\frac{b_-}{2} + \frac{b_+}{\sqrt{2}} \right), \end{aligned} \quad (9.30)$$

où la température critique T_{c0} en absence d'impuretés ($\tau = \infty$) est donnée par

$$T_{c0} = \frac{2\gamma}{\pi} \varepsilon \exp(-1/N_0 g), \quad g = \frac{V}{2} \int d\theta \sin \theta f_1^2(\theta) = \frac{2}{15} V, \quad (9.31)$$

et

$$h_1 = \frac{2\pi H v_F^2}{7\Phi_0} \pi T \sum_n \frac{1}{(|\omega_n| + 1/2\tau)^3}. \quad (9.32)$$

Le paramètre ε a été introduit pour couper la divergence logarithmique de la somme sur la fréquence de Matsubara à champ nul. Dans la limite propre $2\pi\tau T_{c0} \gg 1$, nous obtenons pour la quantité h_1 au premier ordre en $1/\tau T$

$$h_1 = \frac{\zeta(3)}{2\pi} \frac{H v_F^2}{\Phi_0 T^2} \left(1 - \frac{\pi^3}{56\zeta(3)} \frac{1}{\tau T} \right). \quad (9.33)$$

Le second champ critique est déterminé à partir de la condition de déterminant nul pour le système 2×2 (9.30) soit

$$h_1 = 2 \left(1 + \sqrt{\frac{2}{3}} \right) \left[\ln \frac{T_{c0}}{T} - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau T} \right) + \Psi \left(\frac{1}{2} \right) \right]. \quad (9.34)$$

Par définition, la température critique T_c en présence d'impuretés est solution de l'équation

$$\ln \frac{T_{c0}}{T_c} - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau T_c} \right) + \Psi \left(\frac{1}{2} \right) = 0. \quad (9.35)$$

Dans la limite propre, H_{c2} est donc donné par la dépendance linéaire avec la température

$$H_{c2}(T) = \frac{4\pi}{\zeta(3)} \left(1 + \sqrt{\frac{2}{3}} \right) \frac{\Phi_0}{v_F^2} \left[T_{c0} - \frac{\pi}{8\tau} \left(2 - \frac{\pi^2}{7\zeta(3)} \right) \right] (T_c - T). \quad (9.36)$$

Ici, nous avons utilisé le fait que $\Psi'(\frac{1}{2}) = \pi^2/2$. La pente initiale du second champ critique en fonction de la concentration en impuretés s'obtient directement de l'expression (9.36) (pour information, notons que $\pi^2/7\zeta(3) \approx 1.17$).

Comparaison avec l'approche phénoménologique

En absence d'impuretés, il est possible de comparer le résultat du calcul microscopique avec le résultat de l'approche phénoménologique de Ginzburg-Landau (qui doivent en principe concorder). Le second champ critique est déterminé par les équations de Ginzburg-Landau qui s'écrivent pour $H \parallel c$ [84]:

$$\begin{aligned} \left(\alpha_0\tau + K_0 (D_x^2 + D_y^2) - K_- \frac{2\pi H}{\Phi_0} \right) \eta_+ + K_+ D_+^2 \eta_- &= 0 \\ K_+ D_-^2 \eta_+ + \left(\alpha_0\tau + K_0 (D_x^2 + D_y^2) + K_- \frac{2\pi H}{\Phi_0} \right) \eta_- &= 0 \end{aligned} \quad (9.37)$$

avec $K_0 = (K_{123} + K_1)/2$, $K_{\pm} = (K_2 \pm K_3)/2$ et $\tau = (T - T_{c0})/T_{c0}$. Ce système a été résolu analytiquement par M.E. Zhitomirskii [118]. Utilisant la jauge de Landau, les composantes du paramètre d'ordre sont cherchées sous la forme

$$\eta_{\pm} \exp(-ipy) f_{\pm}(x) \quad (9.38)$$

avec p réel. Les équations de Ginzburg-Landau conduisent à des solutions de deux types

$$\begin{pmatrix} f_+(x) \\ f_-(x) \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} |0\rangle, |1\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (9.39)$$

ou

$$\begin{pmatrix} f_+(x) \\ f_-(x) \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} q|N+2\rangle \\ |N\rangle \end{pmatrix} \quad (9.40)$$

où q est une constante. Le champ critique maximum correspond à la solution

$$\begin{pmatrix} f_+(x) \\ f_-(x) \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} |0\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (9.41)$$

qui conduit à

$$H_{c2}^{(1)}(T) = \frac{\Phi_0 \alpha_0}{2\pi(K_0 - K_-)} \frac{T_{c0} - T}{T_{c0}}, \quad (9.42)$$

ou à la solution

$$\begin{pmatrix} f_+(x) \\ f_-(x) \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} q|2\rangle \\ |0\rangle \end{pmatrix}, \quad (9.43)$$

qui donne

$$H_{c2}^{(2)}(T) = \frac{\Phi_0 \alpha_0}{2\pi \left(3K_0 - \sqrt{(2K_0 - K_-)^2 + 8K_+^2} \right)} \frac{T_{c0} - T}{T_{c0}}. \quad (9.44)$$

Dans notre calcul microscopique précédent, nous n'avons en fait considéré que la solution de la forme (9.43). La forme (9.41) est également possible et conduit à un champ critique différent de (9.36) (mais comme la dépendance avec les impuretés est la même, nous n'avons pas jugé utile d'écrire son expression ici). En conclusion, la forme pour le paramètre d'ordre obtenue à partir du calcul microscopique coïncide bien avec celle obtenue par l'approche phénoménologique.

9.4 Dépendance pour le modèle E_{2u}

Pour le modèle E_{2u} , la dépendance angulaire s'écrit $\Phi(\theta, \varphi) = f_2(\theta)e^{2i\varphi}$ avec $f_2(\theta) = \cos \theta \sin^2 \theta$. La solution générale des Éqs. (9.25)-(9.26) est alors de la forme

$$\begin{pmatrix} \eta_+ \\ \eta_- \\ \Sigma \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} |N+4\rangle \\ |N\rangle \\ |N+2\rangle \end{pmatrix}. \quad (9.45)$$

Le champ critique maximal est obtenu pour $N = 0$. Nous utilisons les mêmes notations que pour E_{1g} pour les amplitudes du paramètre d'ordre et de la self-énergie.

L'équation pour la self-énergie peut s'écrire comme

$$w = -\frac{\Gamma}{v_F} \iint dr d\theta x^2 \sin \theta f_2(\theta) e^{-2r \frac{|\omega_n| + \Gamma}{v_F}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left(\sqrt{3} b_+ \left[1 - \frac{x^2}{3} + \frac{x^4}{24} \right] + \frac{b_-}{\sqrt{2}} \right) \times \left(1 - \frac{\Gamma}{v_F} \iint dr d\theta \sin \theta e^{-2r \frac{(|\omega_n| + \Gamma)}{v_F}} e^{-\frac{x^2}{2}} L_2(x) \right)^{-1} \quad (9.46)$$

Pour la même raison que pour le modèle E_{1g} , la self-énergie est nulle du fait de la parité de la fonction $f_2(\theta)$:

$$w = 0.$$

Le système à résoudre pour E_{2u} s'écrit donc

$$\begin{aligned} b_+ &= \frac{N_0 V}{v_F} \pi T \sum_n \iint dr d\theta \sin \theta f_2^2(\theta) e^{-2r \frac{(|\omega_n| + \Gamma)}{v_F}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left[b_+ L_4(x^2) + b_- \frac{x^4}{2\sqrt{6}} \right] \\ b_- &= \frac{N_0 V}{v_F} \pi T \sum_n \iint dr d\theta \sin \theta f_2^2(\theta) e^{-2r \frac{(|\omega_n| + \Gamma)}{v_F}} e^{-\frac{x^2}{2}} \left[b_+ \frac{x^4}{2\sqrt{6}} + b_- \right]. \end{aligned} \quad (9.47)$$

Près de T_c , nous développons le facteur exponentiel $\exp(-x^2/2)$. À l'ordre en x^2 ($\sim H$), les deux équations du système (9.47) ne peuvent être résolues simultanément que si $|b_+| \ll |b_-|$ ou $|b_-| \ll |b_+|$.

Si nous choisissons par exemple $|b_+| \ll |b_-|$, le second champ critique est déterminé par la deuxième équation du système (9.47) qui devient

$$b_- \left[\ln \frac{T_{c0}}{T} - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau T} \right) + \Psi \left(\frac{1}{2} \right) \right] = h_2 \frac{b_-}{2}, \quad (9.48)$$

avec

$$h_2 = \frac{2}{3} \frac{\pi H v_F^2}{\Phi_0} \pi T \sum_n \frac{1}{(|\omega_n| + 1/2\tau)^3}. \quad (9.49)$$

Ici T_{c0} est défini comme en (9.31) avec désormais

$$g = \frac{V}{2} \int d\theta \sin \theta f_2^2(\theta) = \frac{4}{105} V.$$

Le terme en b_+ a été négligé dans (9.48). Nous pouvons voir que

$$b_+ \sim h_2,$$

alors que $b_- \sim 1$. La première équation de (9.47) détermine quant à elle le rapport b_+/b_- donné par

$$\frac{b_+}{b_-} \left[\ln \frac{T_{c0}}{T} - \Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau T} \right) + \Psi \left(\frac{1}{2} \right) - \frac{9}{2} h_2 \right] = -\frac{h'_2}{2\sqrt{6}}, \quad (9.50)$$

avec

$$h'_2 = \frac{16}{11} \left(\frac{\pi H v_F^2}{\Phi_0} \right)^2 \pi T \sum_n \frac{1}{(|\omega_n| + 1/2\tau)^5}. \quad (9.51)$$

Dans la limite propre, nous trouvons pour le second champ critique

$$H_{c2}^{(1)}(T) = \frac{3\pi}{7\zeta(3)} \frac{\Phi_0}{v_F^2} \left[T_{c0} - \frac{\pi}{8\tau} \left(2 - \frac{\pi^2}{7\zeta(3)} \right) \right] (T_c - T). \quad (9.52)$$

La dépendance de la pente du second champ critique à T_c avec la concentration en impuretés est donc la même pour E_{1g} et E_{2u} . La raison pour cela s'explique simplement par le fait que la self-énergie est nulle pour les deux modèles.

Quant au rapport b_+/b_- , nous trouvons en absence d'impuretés près de T_{c0}

$$\frac{b_+}{b_-} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{3 \times 31\zeta(5)}{22[7\zeta(3)]^2} \left(1 - \frac{T}{T_{c0}} \right), \quad (9.53)$$

ce qui est en accord avec le résultat du calcul de Yang et Maki [116].

Pour la deuxième possibilité $|b_+| \gg |b_-|$, le second champ critique est déterminé par la première équation de (9.47). Comme résultat, le second champ critique est

$$H_{c2}^{(2)}(T) = \frac{H_{c2}^{(1)}(T)}{9} \quad (9.54)$$

avec $b_-/b_+ \sim (1 - T/T_{c0})$. Pour cette solution, la pente du second champ critique est donc beaucoup plus faible que pour la solution $|b_+| \ll |b_-|$.

Comparaison avec l'approche phénoménologique

Comme déclaré dans le Chapitre 6, la forme de l'énergie libre de Ginzburg-Landau est la même pour les deux modèles supraconducteurs à deux composantes E_{1g} et E_{2u} . Par conséquent, les équations de Ginzburg-Landau et

leur solution sont déjà données dans la section précédente 9.3. Pourtant, il est intéressant de remarquer que la forme donnée en (9.45) et dans la section précédente ne coïncident pas. La raison est que dans notre modèle microscopique, nous avons considéré une surface de Fermi parfaitement isotrope. Sous cette hypothèse, les coefficients phénoménologiques K_2 et K_3 sont exactement nuls (et par conséquent aussi $K_{\pm}$). La dégénérescence entre les deux composantes du paramètre d'ordre est alors levée par les termes en gradients d'ordre supérieur (ordre 4 dans l'énergie libre) qui déterminent les formes d'équilibre.

Le calcul microscopique indique donc que lorsque $K_2 = K_3 = 0$, il est nécessaire de considérer les termes en gradients d'ordre 4 dans la théorie phénoménologique. En présence d'une faible anisotropie de la surface de Fermi (ce qui est probablement le cas dans la situation réelle), les coefficients K_2 et K_3 sont de l'ordre de cette anisotropie. La prise en considération des termes de gradients d'ordre 4 dans l'énergie libre de Ginzburg-Landau devient pertinente pour l'état E_{2u} si les termes de mélange d'ordre 2 en gradients sont négligeables devant les termes d'ordre 4 (qui ne dépendent pratiquement pas de l'anisotropie de la surface de Fermi; ils proviennent de l'anisotropie de l'état supraconducteur). À ce stade, en absence d'informations quantitatives sur l'anisotropie, il s'avère difficile de confirmer si c'est le bien le cas. Toutefois, une théorie incluant les termes de gradients d'ordre 4 mériterait d'être développée dans le futur (notamment en rapport avec l'interprétation du diagramme de phase).

Conclusion

En conclusion, nous avons montré que les modèles à deux composantes de l'état supraconducteur pour UPt_3 , E_{1g} et E_{2u} , se caractérisent en présence d'impuretés pour un champ magnétique appliqué parallèlement à l'axe hexagonal par une self-énergie nulle. Il en résulte que la loi de dépendance de la pente du second champ critique à T_c avec la concentration en impuretés est la même pour ces deux modèles.

Conclusion générale

Oscillations quantiques magnétiques dans les systèmes de basse dimensionnalité

Dans la première partie de cette thèse, nous avons étudié théoriquement les oscillations quantiques magnétiques de l'aimantation et de la magnéto-résistance, c'est-à-dire les effets de Haas-van Alphen et Shubnikov-de Haas, dans les métaux présentant une structure en couches. Nous avons montré que les oscillations quantiques de l'aimantation dans ces systèmes quasi-bidimensionnels présentent sous champ des caractéristiques des métaux tridimensionnels, des métaux bidimensionnels ou des caractéristiques intermédiaires, selon le rapport entre les deux échelles d'énergie gouvernant le transport dans les couches (l'énergie cyclotron ω_c) et entre les couches (l'intégrale de saut électronique intercouches t). Lorsque le rapport $t/\omega_c \gg 1$, les oscillations d'aimantation ont typiquement la même forme que les oscillations dans les métaux tridimensionnels décrites par la formule de Lifshitz-Kosevich.

Dans la limite opposée, $t/\omega_c \ll 1$, les oscillations d'aimantation ont le comportement attendu pour les métaux bidimensionnels à une bande d'états : elles peuvent devenir fortement asymétriques avec des extrema très piqués à basse température. Si le potentiel chimique est fixé par les conditions de l'expérience, la forme typique est en dents de scie. Si au contraire, le nombre total d'électrons dans les conditions de l'expérience reste constant, les oscillations ont une forme en dents de scie inversée. Ces dernières oscillations d'aimantation sont accompagnées de fortes oscillations de potentiel chimique attestant de la présence de très peu d'états électroniques disponibles entre les niveaux de Landau. À défaut d'avoir pu donner une formule analytique explicitant la dépendance des oscillations avec la température et les impuretés en présence d'oscillations de potentiel chimique fortes, nous avons souligné qu'à la différence des métaux tridimensionnels, la possibilité de décrire les

oscillations d'aimantation sous forme de développement en série de Fourier (c'est-à-dire en termes d'harmoniques) n'était pas assurée *a priori*.

Nous avons montré analytiquement qu'en présence de plusieurs bandes d'états au niveau de Fermi dans les systèmes bidimensionnels, i.e. quand les oscillations de potentiel chimique sont pratiquement négligeables, les oscillations d'aimantation pouvaient bien être décrites quantitativement en termes de série de Fourier. Les harmoniques avec combinaisons de fréquence observées expérimentalement dans le spectre de Fourier des oscillations d'aimantation de nombreux conducteurs organiques en couches sont la signature directe de ces oscillations de potentiel chimique faibles typiquement présentes quand $t \ll \omega_c$. Nous avons argumenté notre désaccord avec le mécanisme d'apparition de ces combinaisons de fréquence proposé par Alexandrov et Bratkovsky.

Puis, nous avons développé la théorie de l'effet de Haas-van Alphen dans l'état mixte des supraconducteurs bidimensionnels et quasi-bidimensionnels pour un champ magnétique perpendiculaire aux couches. Nous avons déterminé le facteur d'atténuation des oscillations dû à la distribution inhomogène du paramètre d'ordre dans l'état mixte. Nous avons trouvé que le critère d'observation des oscillations quantiques de l'aimantation près du second champ critique est plus restrictif que dans les supraconducteurs tridimensionnels.

Enfin, nous avons étudié les oscillations quantiques de la magnétorésistance longitudinale pour un champ perpendiculaire aux couches dans le cadre de la théorie du transport quantique. Nous avons trouvé des oscillations Shubnikov-de Haas géantes avec des dépendances en champ et température inhabituelles dans la limite bidimensionnelle $\omega_c \gg t$. Notre modèle théorique considérant uniquement la diffusion sur des impuretés ponctuelles rend compte de l'activation thermique des maxima de magnétorésistance en présence d'oscillations de potentiel chimique négligeables comme observée dans le conducteur organique en couches β'' -(BEDT-TTF)₂SF₅CH₂CF₂SO₃. L'origine d'un tel comportement en température n'est pas dû à l'apparition de gaps de Landau dans la densité d'états, mais plutôt à la formation de pseudogaps dans la magnétoconductivité spectrale : ainsi, nous avons établi l'existence d'une différence nette entre les oscillations quantiques de l'aimantation et de la magnétorésistance dans les systèmes quasi-bidimensionnels.

Toutefois, notre modèle théorique n'explique pas qualitativement certaines observations expérimentales dans β'' -(BEDT-TTF)₂SF₅CH₂CF₂SO₃, comme l'augmentation des minima de magnétorésistance à forts champs magnétiques et basses températures. Il est intéressant de remarquer que

sous ces mêmes conditions, la considération de l'élargissement des niveaux de Landau dû à la diffusion sur les impuretés ponctuelles seule devient insuffisante. La diffusion des électrons dans un potentiel d'impuretés aléatoire avec un rayon de corrélation fini doit être envisagée comme pouvant être physiquement pertinente pour saisir le comportement complet des oscillations de magnéto-résistance.

Symétrie de l'état supraconducteur dans UPt_3

Dans la deuxième partie de thèse, nous avons décrit théoriquement le réseau de vortex dans la phase mixte A du supraconducteur non-conventionnel UPt_3 pour un champ parallèle à l'axe hexagonal, en considérant tous les états supraconducteurs possibles de différentes symétries. Nous avons interprété l'observation expérimentale d'un réseau de vortex triangulaire, orienté selon les directions des axes cristallographiques dans la phase B, et orienté à $\pm 45^\circ$ des axes cristallographiques dans la phase A. Nous avons mis en évidence que cet alignement inhabituel du réseau de vortex dans la phase A était la signature non ambiguë de la symétrie E_{2u} pour l'état supraconducteur et résultait de l'anisotropie supraconductrice dans le plan basal apparaissant quand seule la première des deux composantes du paramètre d'ordre supraconducteur était favorisée par le couplage avec le champ briseur de symétrie. Dans la phase B, cette anisotropie supraconductrice dans le plan basal disparaît car les deux composantes du paramètre d'ordre ont pratiquement le même poids, de telle sorte que la raison pour le mauvais alignement est éliminée.

Nous avons également montré dans le cadre de l'approximation de l'électrodynamique locale de London que l'observation d'un réseau de vortex pratiquement triangulaire dans la phase A est compatible avec l'état supraconducteur E_{2u} . En revanche, l'autre modèle envisagé E_{1g} conduit à un réseau de vortex fortement distordu dans la phase A.

Puis, nous avons exprimé notre désaccord avec l'approche et les résultats de Agterberg et Dodgson concernant la construction d'une théorie du réseau de vortex près de la transition A-B pour l'état supraconducteur E_{2u} . Par simplification, ces auteurs ont négligé au voisinage de la transition A-B les termes non-linéaires présents dans les équations de Ginzburg-Landau. Nous avons montré que près du premier champ critique les termes non-linéaires dans les équations de Ginzburg-Landau sont au contraire dominants et précisément contrôlent la croissance de la deuxième composante du paramètre d'ordre.

Par la même occasion, nous avons souligné qu'en raison des termes de gradient mélangeant les composantes du paramètre d'ordre dans la densité d'énergie libre de Ginzburg-Landau, les différentes phases de l'état mixte dans UPt_3 étaient plutôt séparées par des zones de crossover que des lignes de transition de phase du second ordre dans les modèles avec champ briseur de symétrie E_{1g} et E_{2u} . Seul le modèle E_{2u} serait caractérisé par une zone de crossover d'épaisseur en température très faible.

Enfin, nous avons étudié l'influence des défauts sur la pente du second champ critique près de la température critique pour les deux modèles d'état supraconducteur E_{1g} et E_{2u} . Cette étude a démontré que les deux modèles, bien que très différents lorsque l'on sonde les propriétés supraconductrices dans le plan basal notamment en appliquant un champ perpendiculairement à la base, ont la même loi de dépendance du second champ critique avec la concentration en impuretés.

De nombreuses questions ouvertes restent encore en suspens dans le supraconducteur UPt_3 , notamment concernant son diagramme de phase dans la région de rencontre des trois phases mixtes A, B et C, et de l'état normal. Notamment, l'identification théorique de la région C de l'état mixte pour un champ perpendiculaire au plan basal n'existe pas encore. Or, nous avons montré que l'exploitation des équations de Ginzburg-Landau linéarisées pour décrire les différentes transitions supraconductrices dans l'état mixte n'était pas justifiée dans le cadre des modèles avec champ briseur de symétrie. Afin de mieux appréhender le diagramme de phase sous champ, il est (malheureusement) nécessaire d'affronter la complexité des équations de Ginzburg-Landau complètes.

Annexe A

Formule sommatoire de Poisson

La formule sommatoire de Poisson est utilisée à plusieurs reprises tout au long de la première partie. Elle permet de réécrire de façon astucieuse la somme discrète sur les niveaux de Landau. Nous donnons ici une démonstration de cette formule (il en existe plusieurs).

La formule sommatoire de Poisson est

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{+\infty} f(n) &= \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \int_a^{+\infty} f(t) e^{-2\pi i l t} dt \\ &= \int_a^{+\infty} f(t) dt + 2\Re \sum_{l=1}^{+\infty} \int_a^{+\infty} f(t) \cos(2\pi l t) dt, \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

où a est un nombre compris entre -1 et 0.

Notons que si la somme discrète sur n portait sur tous les entiers relatifs (c'est-à-dire pour n pris de $-\infty$ à $+\infty$, au lieu de 0 à $+\infty$), cette formule s'écrirait

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-2\pi i l t} dt, \quad (\text{A.2})$$

ce qui n'est rien d'autre que le développement en série de Fourier de la fonction 1-périodique

$$g(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(n+x)$$

pris en $x = 0$. La formule (A.1) peut donc être vue comme une sorte de développement en série de Fourier.

Une démonstration possible de la formule (A.1) est donnée dans la Réf. [3]. Il suffit de remarquer que

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(t - n) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} e^{-2i\pi lt} \quad (\text{A.3})$$

puis de multiplier cette égalité par la fonction $f(t)$, et d'intégrer le tout de a à $+\infty$, où a est un nombre quelconque compris entre -1 et 0. Sur le plan mathématique, nous voyons que la fonction $f(t)$ doit être telle que l'on ait le droit de permuter les signes $\int$ et $\sum$.

Annexe B

Calcul des coefficients α et β

B.1 Calcul de α

Dans cette annexe, nous présentons le calcul du coefficient $\alpha(H, T)$ dans la limite quasi-classique. Les effets de la quantification en niveaux de Landau sur le champ critique ont déjà été étudiés par Gruenberg et Gunther [119] pour un système 3D. Ces auteurs ont donné une méthode de calcul des corrections apparaissant dans l'équation du gap linéarisée, qui peut être adaptée au cas des systèmes 2D. D'après l'équation (4.3) nous avons

$$\alpha(H, T) = \frac{1}{g} - T \sum_{\nu=0}^{+\infty} \bar{S}_{\tilde{\omega}_\nu} \quad (\text{B.1})$$

où

$$\bar{S}_{\tilde{\omega}_\nu} = 2\Re \int e^{-\frac{H\rho^2}{2}} \tilde{G}^\sigma(\mathbf{R}, \tilde{\omega}_\nu) \tilde{G}^{-\sigma}(\mathbf{R}, -\tilde{\omega}_\nu) d\mathbf{R}. \quad (\text{B.2})$$

Dans le cas 2D, la fonction de Green $\tilde{G}^\sigma(\mathbf{R}, \tilde{\omega}_\nu)$ en représentation $\mathbf{R}$, après l'intégration sur les centres des orbites [120], peut être exprimée comme :

$$\tilde{G}^\sigma(\mathbf{R}, \tilde{\omega}_\nu) = \frac{g_0}{2} \omega_c e^{-t/2} \sum_{r=0}^{+\infty} \frac{L_r(t)}{i\tilde{\omega}_\nu - \xi_r + \sigma\mu_e H}, \quad (\text{B.3})$$

où $L_r(t)$ est le polynôme de Laguerre d'ordre r , $t = H\rho^2/2$, et

$$\xi_r = \left(r + \frac{1}{2}\right)\omega_c - \mu.$$

En utilisant la relation entre polynômes de Laguerre

$$\int_0^{+\infty} e^{-2t} L_n(t) L_m(t) dt = \left(\frac{1}{2}\right)^{n+m+1} \frac{(m+n)!}{m! n!},$$

nous obtenons

$$\bar{S}_{\tilde{\omega}_\nu} = \frac{g_0}{2} \omega_c \Re \sum_{r,l=0}^{+\infty} \frac{(r+l)!}{r! l!} \frac{(1/2)^{r+l}}{(i\tilde{\omega}_\nu + \xi_r - \mu_e H)(-i\tilde{\omega}_\nu + \xi_l + \mu_e H)}. \quad (\text{B.4})$$

Toujours en suivant la démarche de Gruenberg et Gunther [119], nous faisons l'approximation gaussienne des factorielles

$$\left(\frac{1}{2}\right)^{r+l} \frac{(r+l)!}{r! l!} \approx \frac{e^{-(r-l)^2/4r}}{(\pi r)^{1/2}}$$

valable pour $\mu/\omega_c \gg 1$. Nous utilisons alors la formule sommatoire de Poisson qui nous donne trois types de termes ($n = m = 0$; $n = m \neq 0$; $n \neq m$):

$$\bar{S}_{\tilde{\omega}_\nu} = \sum_{n,m=-\infty}^{+\infty} S_{\tilde{\omega}_\nu}^{nm}, \quad (\text{B.5})$$

$$S_{\tilde{\omega}_\nu}^{nm} \approx (-1)^{n+m} \frac{g_0}{2} \omega_c \Re \int_0^\infty \int_0^\infty dy \frac{1}{\sqrt{\pi x}} \frac{e^{2\pi i(n x - m y) - (x-y)^2/4x} dx dy}{(i\tilde{\omega}_\nu + \xi_x - \mu_e H)(-i\tilde{\omega}_\nu + \xi_y + \mu_e H)} \quad (\text{B.6})$$

avec

$$\xi_x = x\omega_c - \mu.$$

En ce qui concerne le premier terme obtenu pour $n = m = 0$, nous transformons l'intégration sur x et y en une intégration sur les coordonnées des vecteurs bidimensionnels $\mathbf{q}$ et $\mathbf{q}'$, de telle façon que $\omega_c x = q^2/2m$, $\omega_c y = q'^2/2m$. Comme q et q' sont très proches (et tous deux de l'ordre de k_F), nous avons

$$(x - y)^2/4x \approx (q - q')^2/2H.$$

Après avoir utilisé la relation approximative

$$\frac{e^{-(q-q')^2/2H}}{\sqrt{qq'/2H}} \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{2\pi} e^{-(\mathbf{q}-\mathbf{q}')^2/2H} d\theta_{\mathbf{q}\mathbf{q}'}$$

puis changé la variable $\mathbf{q}'$ en $\mathbf{Q} = \mathbf{q} - \mathbf{q}'$, et négligé le terme $Q^2/2m$ dans l'expression de l'énergie $\xi_{q'}$, nous obtenons

$$S_{\tilde{\omega}_\nu}^{00} \approx \frac{g_0 \omega_c}{4\pi^2 H^2} \Re \int d\mathbf{Q} e^{-Q^2/2H} \int \frac{d\mathbf{q}}{(i\tilde{\omega}_\nu + \xi_q - \mu_e H)(-i\tilde{\omega}_\nu + \xi_q + \mu_e H - \mathbf{Q} \cdot \frac{\mathbf{q}}{m})}. \quad (\text{B.7})$$

Comme q est voisin de k_F , le terme q/m est approximé par la vitesse au niveau de Fermi v_F . L'intégration sur le vecteur $\mathbf{q}$ est transformée en une double intégration sur l'énergie et l'angle θ . La première intégration sur l'énergie donne

$$S_{\tilde{\omega}_\nu}^{00} = \frac{g_0}{2\pi H} \Re \int d\mathbf{Q} e^{-Q^2/2H} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\tilde{\omega}_\nu + 2i\mu_e H - iv_F Q \cos \theta}. \quad (\text{B.8})$$

La seconde intégration sur l'angle est effectuée en introduisant la variable complexe $z = \exp i\theta$. Le contour d'intégration correspondant est le cercle unité. Nous trouvons

$$S_{\tilde{\omega}_\nu}^{00} = \frac{g_0}{H} \Re \int \frac{e^{-Q^2/2H} d\mathbf{Q}}{\sqrt{(v_F Q)^2 + 4(\tilde{\omega}_\nu + i\mu_e H)^2}}. \quad (\text{B.9})$$

Nous pouvons réécrire cette expression sous la forme

$$S_{\tilde{\omega}_\nu}^{00} = \pi g_0 \zeta \Re \int_0^{+\infty} \frac{e^{-\zeta x} dx}{\sqrt{\kappa + x}} \quad (\text{B.10})$$

où $\zeta = 1/\varepsilon_F \omega_c$ (ε_F est le niveau de Fermi) et $\kappa = (\tilde{\omega}_\nu + i\mu_e H)^2$. Nous calculons alors

$$S^{00} = \frac{2T}{g_0} \sum_{\nu=0}^{+\infty} S_{\tilde{\omega}_\nu}^{00}.$$

En utilisant la relation

$$2\pi T \sum_{\nu} F(\omega_\nu) = \int_0^{+\infty} F(\omega) d\omega + \frac{\pi^2}{6} T^2 \left(\frac{\partial F}{\partial \omega} \right)_{\omega=0} \quad (\text{B.11})$$

valable à basse température, nous obtenons

$$\frac{2}{g g_0} - S^{00} = \frac{\zeta}{2} \int_0^{+\infty} \ln x e^{-\zeta x} dx + \frac{\pi^2}{6} T^2 \zeta \sqrt{\kappa_0} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-\zeta x} dx}{(x + \kappa_0)^{3/2}} - \ln \frac{\pi T_c}{\gamma}. \quad (\text{B.12})$$

Ici $\kappa_0 = \Gamma_0 + i\mu_e H$. Dans le premier terme de la partie droite de l'équation (B.11), nous avons négligé Γ_0 et $\mu_e H$. Pour éviter la divergence, une coupure ω_0 est introduite ; cette divergence disparaît par soustraction du terme $\frac{2}{g_0 g} = \ln(\frac{2\gamma\omega_0}{\pi T_c})$ où $C = \ln \gamma$ est la constante de Euler. En utilisant les expressions des intégrales [121] :

$$\zeta \int_0^{+\infty} \ln x e^{-\zeta x} dx = -C - \ln \zeta$$

et

$$\int_0^{+\infty} \frac{e^{-\zeta x} dx}{(x + \kappa_0)^{3/2}} = \frac{2}{\sqrt{\kappa_0}} - 2\sqrt{\pi\zeta} e^{\kappa_0 \zeta} \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\sqrt{\zeta\kappa}} e^{-t^2} dt \right) \approx \frac{2}{\sqrt{\kappa_0}}$$

nous obtenons

$$\frac{1}{g} - T \sum_{\nu=0}^{+\infty} S_{\tilde{\omega}_\nu}^{00} = \frac{g_0}{4} \left\{ \ln\left(\frac{H}{H_{c2o}}\right) + \frac{2\pi^2}{3} \frac{T^2}{\mu\omega_c} \right\} \quad (\text{B.13})$$

avec $H_{c2o} = \frac{2\pi^2 T_c^2}{\gamma v_F^2}$. Le terme dépendant de la température est négligé par la suite dans la mesure où nous travaillons à basses températures.

Pour le second terme obtenu pour $n = m \neq 0$ dans (B.5), nous suivons les étapes conduisant à l'équation (B.10). Nous approximons le nouveau terme dans l'exponentielle par $2i\pi n(x-y) \approx 2i\pi n v_F \cos \theta$. Nous trouvons alors que, pour $n > 0$ $S_{\tilde{\omega}_\nu}^{nn} = 0$, et pour $n < 0$

$$S_{\tilde{\omega}_\nu}^{nn} = \pi g_0 \zeta \Re e^{-4\pi|n| \frac{(\tilde{\omega}_\nu + i\mu_e H)}{\omega_c}} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-\zeta x} dx}{\sqrt{\kappa + x}}. \quad (\text{B.14})$$

En utilisant la valeur de l'intégrale [121]

$$\int_0^{+\infty} \frac{e^{-\zeta x} dx}{\sqrt{\kappa + x}} = \sqrt{\frac{\pi}{\zeta}} e^{\zeta\kappa} \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\sqrt{\zeta\kappa}} e^{-t^2} dt \right) \approx \sqrt{\frac{\pi}{\zeta}}$$

pour $\zeta\kappa \ll 1$, nous arrivons à

$$S_{\tilde{\omega}_\nu}^{nn} = \frac{\pi^{3/2} g_0}{\sqrt{\mu\omega_c}} \Re e^{-4\pi n \frac{(\tilde{\omega}_\nu + i\mu_e H)}{\omega_c}}. \quad (\text{B.15})$$

Le troisième et dernier terme dans l'équation (B.5) comprenant la sommation sur $n \neq m$ n'est évalué que pour les valeurs non nulles de n et m car $S_{\tilde{\omega}_\nu}^{n0}$ et $S_{\tilde{\omega}_\nu}^{0n}$ sont négligemment petits. Nous approximations $(\pi x)^{-1/2} \exp[-(x - y)^2/4x]$ par $(\omega_c/\pi\mu)^{1/2}$ pour avoir deux intégrations découplées. Ces dernières donnent un résultat non nul uniquement pour n et m négatifs et conduisent pour une paire (n, m) à

$$S_{\tilde{\omega}_\nu}^{nm} + S_{\tilde{\omega}_\nu}^{mn} = (-1)^{n+m} \frac{4\pi^{3/2} g_0}{\sqrt{\mu\omega_c}} \Re e^{-2\pi|n+m|(\frac{\tilde{\omega}_\nu + i\mu_e H}{\omega_c})} \cos\left(2\pi(n-m)\frac{\mu}{\omega_c}\right). \quad (\text{B.16})$$

En sommant toutes ces contributions, nous avons

$$\alpha(H, T) = \frac{g_0}{4} \left\{ \frac{H - H_{c2o}}{H_{c2o}} + \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 S_0 - 2\sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\omega_c}{\mu}} S_1 - 8\sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\omega_c}{\mu}} S_2 \right\} \quad (\text{B.17})$$

où

$$S_0 = \frac{2\pi^2 T_c^2}{3\mu\omega_c}, \quad (\text{B.18})$$

$$S_1 = \frac{2\pi T}{\omega_c} \Re \sum_{n=1}^{+\infty} \sum_{\nu=0}^{+\infty} e^{-4\pi n(\frac{\tilde{\omega}_\nu + i\mu_e H}{\omega_c})}, \quad (\text{B.19})$$

$$S_2 = \frac{2\pi T}{\omega_c} \Re \sum_{n=1}^{+\infty} \sum_{m>n}^{+\infty} \sum_{\nu=0}^{+\infty} (-1)^{n+m} \cos\left(2\pi(n-m)\frac{\mu}{\omega_c}\right) \times e^{-2\pi(n+m)(\frac{\tilde{\omega}_\nu + i\mu_e H}{\omega_c})}. \quad (\text{B.20})$$

Le terme S_1 est le même que dans le cas 3D [50]. Nous faisons donc la même transformation et incluons ce terme dans l'expression du champ critique supérieur à basse température moyenné sur les oscillations. Comme dans la Réf. [50], nous simplifions le terme S_2 dans l'équation (B.20) en changeant les variables de sommation en n et $m - n = l$, et en ne conservant raisonnablement que le premier terme de la somme sur n :

$$S_2 = \frac{\pi T}{\omega_c} \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l \frac{e^{-2\pi(l+2)\frac{\Gamma}{\omega_c}}}{\sinh \lambda_{l+2}} \cos\left(2\pi(l+2)\frac{\mu_e H}{\omega_c}\right) \cos\left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c}\right). \quad (\text{B.21})$$

C'est précisément ce terme qui est pris en compte dans α_{osc} .

Dans le cas quasi-2D, nous pouvons suivre exactement la même procédure pour calculer le coefficient α . Cependant, la fonction de Green est désormais exprimée dans une représentation mixte (x, y, k_z)

$$\tilde{G}^\sigma(x, y, k_z, \tilde{\omega}_\nu) = \frac{g_0}{2} \omega_c e^{-t/2} \sum_{r=0}^{+\infty} \frac{L_r(t)}{i\tilde{\omega}_\nu - (r + \frac{1}{2})\omega_c + 2t \cos(k_z s) + \mu + \sigma \mu_e H}. \quad (\text{B.22})$$

Dans l'équation (B.2), en plus de l'intégration sur le vecteur bidimensionnel $\mathbf{R}$, il y a une intégration supplémentaire sur k_z . Finalement, nous obtenons après calcul

$$\alpha^{q2D}(H, T) = \frac{g_0^{q2D}}{4} \left\{ \frac{H - H_{c2o}}{H_{c2o}} + \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 S_0 - 2\sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\omega_c}{\mu}} S_1 - 8\sqrt{\pi} \sqrt{\frac{\omega_c}{\mu}} S_2 \right\} \quad (\text{B.23})$$

où $g_0^{q2D} = g_0/s$,

$$S_0 = \frac{S_0^{2D}}{s}, \quad (\text{B.24})$$

$$S_1 = \frac{S_1^{2D}}{s}, \quad (\text{B.25})$$

$$S_2 = \frac{\pi T}{\omega_c} \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l \frac{e^{-2\pi(l+2)\frac{\Gamma}{\omega_c}}}{\sinh \lambda_{l+2}} \cos \left(2\pi(l+2) \frac{\mu_e H}{\omega_c} \right) J_0 \left(2\pi l \frac{2t}{\omega_c} \right) \times \cos \left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c} \right). \quad (\text{B.26})$$

La partie oscillatoire de α comprend donc un facteur supplémentaire faisant intervenir la fonction de Bessel d'ordre zéro identique à celui apparaissant dans les expressions du métal normal quasi-2D.

B.2 Calcul de β

Le calcul du coefficient β est effectué dans la représentation des sous-réseaux magnétiques [47]

$$\beta(H, T) = \frac{T}{2} \sum_{\sigma \pm 1} \sum_v \sum_{n, n', m, m'} G^{-\sigma}(\xi_n, -\tilde{\omega}_\nu) G^\sigma(\xi_m, \tilde{\omega}_\nu) G^{-\sigma}(\xi_{n'}, -\tilde{\omega}_\nu) \times G^\sigma(\xi_{m'}, \tilde{\omega}_\nu) F_{mm'}^{nn'} \quad (\text{B.27})$$

où

$$F_{mm'}^{nn'} = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} f_{nm}(\mathbf{q}) f_{nm'}^*(\mathbf{q}) f_{n'm}(\mathbf{q}) f_{n'm'}^*(\mathbf{q})$$

sont les éléments de matrice de la fonction f d'Abrikosov. En ne gardant que la principale contribution à l'expression (B.27) donnée par les termes diagonaux $n = n' = m = m'$, et comme $F_{nn}^{nn} \approx H/(2\pi)^2 n$ [47], nous avons

$$\beta(H, T) = \frac{H}{2(2\pi)^2} \sum_{\sigma \pm 1} T \sum_{\nu} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{[G^{\sigma}(\xi_n, \tilde{\omega}_{\nu}) G^{-\sigma}(\xi_n, -\tilde{\omega}_{\nu})]^2}{n}. \quad (\text{B.28})$$

L'utilisation de la formule sommatoire de Poisson pour transformer la sommation sur n conduit à exprimer β sous la forme d'une partie dépendant de façon monotone du champ magnétique et d'une partie oscillant rapidement avec le champ magnétique. La partie monotone est obtenue par simple remplacement de la somme discrète par une intégration avec

$$\frac{H}{2\pi} \sum_{n=0}^{+\infty} = \frac{H}{2\pi} \int_{n=0}^{+\infty} = \frac{g_0}{2} \int d\xi$$

et $n \approx \mu/\omega_c$:

$$\bar{\beta}(H, T) = \frac{g_0 \omega_c}{8\pi \mu} \sum_{\sigma \pm 1} T \sum_{\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\xi}{[(i\tilde{\omega}_{\nu} - \xi + \sigma \mu_e H)(-i\tilde{\omega}_{\nu} - \xi - \sigma \mu_e H)]^2}. \quad (\text{B.29})$$

L'intégration sur l'énergie ξ donne

$$\bar{\beta}(H, T) = g_0 \frac{\omega_c}{8\mu} T \sum_{\nu=0}^{+\infty} \frac{\tilde{\omega}_{\nu}^3 - 3\tilde{\omega}_{\nu}(\mu_e H)^2}{(\tilde{\omega}_{\nu}^2 + (\mu_e H)^2)^2}. \quad (\text{B.30})$$

Cette expression est alors évaluée à $T = 0$ K afin de permettre le remplacement de la somme par l'intégration. Nous trouvons

$$\bar{\beta}(H, 0) = g_0 \frac{\omega_c}{32\pi \mu} \frac{\Gamma^2 - (\mu_e H)^2}{(\Gamma^2 + (\mu_e H)^2)^2}. \quad (\text{B.31})$$

Quant à elle, la partie oscillante de $\beta(H, T)$ s'exprime comme

$$\begin{aligned} \beta_{\text{osc}}(H, T) &= \frac{g_0 \omega_c}{4\pi \mu} \Re \sum_{\sigma \pm 1} T \sum_{\nu} \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l e^{2\pi i l \frac{\mu}{\omega_c}} \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-2\pi i l \frac{\xi}{\omega_c}} d\xi}{(i\tilde{\omega}_{\nu} - \xi + \sigma \mu_e H)^2 (-i\tilde{\omega}_{\nu} - \xi - \sigma \mu_e H)^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

L'intégration sur la variable ξ ne présente aucune difficulté

$$\beta_{\text{osc}}(H, T) = \frac{g_0 \omega_c}{2\mu} \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l \cos \left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c} \right) \Re T \sum_{\nu=0}^{+\infty} e^{-2\pi l \left(\frac{\tilde{\omega}_\nu + i\mu_e H}{\omega_c} \right)} \times \left\{ \frac{1}{(\tilde{\omega}_\nu + i\mu_e H)^3} + \frac{2\pi l}{\omega_c (\tilde{\omega}_\nu + i\mu_e H)^2} \right\}. \quad (\text{B.33})$$

À $T = 0$, comme précédemment la sommation sur ν est remplacée par une intégration, qui conduit finalement à

$$\beta_{\text{osc}}^{2D}(H, T = 0) = \frac{g_0 \omega_c}{4\pi \mu \Gamma^2} \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l \cos \left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c} \right) I \left(2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c} \right) e^{-2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c}} \quad (\text{B.34})$$

où

$$I(x) = \int_0^\infty \left[\frac{1}{(y+1)^3} + \frac{x}{(1+y)^2} \right] e^{-xy} dy.$$

Pour un système quasi-2D, le même type de calcul donne

$$\bar{\beta}^{q2D}(H, 0) = \frac{\bar{\beta}^{2D}(H, 0)}{s} \quad (\text{B.35})$$

et, comme pour la partie oscillante de α , un facteur supplémentaire faisant intervenir la fonction de Bessel d'ordre zéro apparaît dans la partie oscillante de β :

$$\beta_{\text{osc}}^{q2D}(H, 0) = \frac{g_0}{2s} \frac{\omega_c}{2\pi \mu \Gamma^2} \sum_{l=1}^{+\infty} (-1)^l \cos \left(2\pi l \frac{\mu}{\omega_c} \right) I \left(2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c} \right) J_0 \left(2\pi l \frac{2t}{\omega_c} \right) e^{-2\pi l \frac{\Gamma_0}{\omega_c}}. \quad (\text{B.36})$$

Annexe C

Le modèle quasi-2D

C.1 Hamiltonien

Le modèle de hamiltonien que nous considérons pour décrire les métaux quasi-2D présentant une structure en couches est le même que celui utilisé dans l'article de R.A. Klemm *et al.* [122]. Dans ce modèle, les électrons sont libres de se propager dans chaque couche, et passent d'une couche à l'autre par effet tunnel (dans la direction verticale z). Notre hamiltonien est écrit dans le langage de la seconde quantification. L'opérateur de champ $\Psi_{j,\sigma}(\vec{r})$ correspondant à un électron de spin σ à la position $\vec{r} = (x, y)$ dans la j ème couche est défini par

$$\Psi_{j,\sigma}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{Ss}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} a_{j,\sigma}(\vec{k}), \quad (\text{C.1})$$

où $a_{j,\sigma}(\vec{k})$ est l'opérateur d'annihilation et S est l'aire d'une couche (dorénavant $S = 1$). Le hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_T + \mathcal{H}_{imp} \quad (\text{C.2})$$

où $\mathcal{H}_0$ est l'hamiltonien bidimensionnel pour un électron dans un champ magnétique $\vec{H} = H\vec{z}$ associé à un potentiel vecteur $\vec{A}$

$$\mathcal{H}_0 = s \int d^2r \sum_{j,\sigma} \left[\Psi_{j,\sigma}^\dagger(\vec{r}) \left(\frac{1}{2m^*} \left(-i\vec{\nabla}_{\vec{r}} - e\vec{A} \right)^2 - \mu_e \vec{\sigma} \cdot \vec{H} \right) \Psi_{j,\sigma}(\vec{r}) \right], \quad (\text{C.3})$$

$\mathcal{H}_T$ est l'hamiltonien tunnel invariant de jauge, qui décrit le couplage électronique entre les couches :

$$\mathcal{H}_T = -ts \int d^2r \sum_{j,\sigma} \Psi_{j,\sigma}^\dagger(\vec{r}) \Psi_{j+1,\sigma}(\vec{r}) \exp \left(-ie \int_{j_s}^{(j+1)s} \mathcal{A}_z(\vec{r}, j, \tau) dz \right) + H.C. \quad (\text{C.4})$$

Dans le but de trouver la conductivité longitudinale (voir annexe suivante), un potentiel vecteur monochromatique alternatif $\mathcal{A}_z$ dépendant de la variable de Matsubara τ est introduit de façon formelle. Ici, l'expression $H.C.$ désigne le conjugué hermitien. Enfin, $\mathcal{H}_{imp}$ décrit le couplage des électrons avec les impuretés dans les couches (nous négligeons les processus de diffusion qui pourraient se produire lors du transfert par effet tunnel des quasi-particules d'une couche à l'autre)

$$\mathcal{H}_{imp} = s \int d^2r \sum_{j,\sigma} \Psi_{j,\sigma}^\dagger(\vec{r}) u_j(\vec{r}) \Psi_{j,\sigma}(\vec{r}), \quad (\text{C.5})$$

où $u_j(\vec{r})$ est le potentiel de diffusion sur les impuretés à courte portée.

C.2 Fonction de Green

Pour les différents calculs thermodynamiques et de transport, nous avons besoin de déterminer les fonctions de Green définies usuellement par [123]

$$G_{i,j}^{\sigma_1,\sigma_2}(\vec{r}_1, \tau_1, \vec{r}_2, \tau_2) = - \left\langle T_\tau \tilde{\Psi}_{i,\sigma_1}(\vec{r}_1, \tau_1) \tilde{\Psi}_{j,\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2, \tau_2) \right\rangle \quad (\text{C.6})$$

où les moyennes sont prises dans l'ensemble grand canonique, et $\tilde{\Psi}_{i,\sigma_1}(\vec{r}_1, \tau_1)$ sont les opérateurs de champ de Heisenberg dépendants de la variable de Matsubara τ_1 .

L'équation du mouvement pour la fonction de Green en présence d'impuretés, du champ magnétique, et du potentiel vecteur $\mathcal{A}_z(\vec{r}, j, \tau)$ est, pour un spin donné σ

$$\left[-\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2m^*} \left(-i\vec{\nabla}_{\vec{r}} - e\vec{A} \right)^2 + t \left(\hat{\Delta}_{j+} e^{-ies\mathcal{A}_z} + \hat{\Delta}_{j-} e^{ies\mathcal{A}_z} \right) + \mu + \mu_e \sigma H - \right. \\ \left. - u_j(\vec{r}) \right] G_{\sigma,j,l}(\vec{r}, \tau, \vec{r}', \tau') = s^{-1} \delta_{jl} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(\tau - \tau') \quad (\text{C.7})$$

où les opérateurs $\hat{\Delta}_{j\pm}$ de changement d'indice sont définis par

$$\hat{\Delta}_{j\pm} \Psi_{j,\sigma}(\vec{r}, \tau) = \Psi_{j\pm 1, \sigma}(\vec{r}, \tau). \quad (\text{C.8})$$

La moyenne de l'Éq. (A18) sur la configuration d'impuretés est effectuée en utilisant le fait que

$$\langle u_j(\vec{r}) u_l(\vec{r}') \rangle = u_0^2 s^{-1} \delta_{jl} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

(ici u_0 est l'amplitude du potentiel d'impureté). Tout en gardant pour la fonction de Green moyennée $\langle G \rangle$ la même notation G qu'auparavant, nous obtenons l'équation du mouvement pour la fonction de Green moyennée

$$\left[-\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{1}{2m^*} \left(-i\vec{\nabla}_{\vec{r}} - e\vec{A} \right)^2 + t \left(\hat{\Delta}_{j+} e^{-ies\mathcal{A}_z} + \hat{\Delta}_{j-} e^{ies\mathcal{A}_z} \right) + \mu + \mu_e \sigma H + \right. \\ \left. + \Sigma \right] G_{\sigma,j,l}(\vec{r}, \tau, \vec{r}', \tau') = s^{-1} \delta_{jl} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(\tau - \tau') \quad (\text{C.9})$$

où Σ est la self-énergie due aux impuretés.

Ensuite, nous écrivons la fonction de Green $G_{j,l}$ sous la forme

$$G_{\sigma,j,l}(\vec{r}, \tau, \vec{r}', \tau') = G_{\sigma,j-l}^0(\vec{r}, \vec{r}', \tau - \tau') + G_{\sigma,j,l}^{(1)}(\vec{r}, \tau, \vec{r}', \tau') \quad (\text{C.10})$$

où $G_{j,l}^0$ est la fonction de Green en absence de $\mathcal{A}_z$, et $G_{j,l}^{(1)}$ est la première correction qui est linéaire en $\mathcal{A}_z$.

Il est plus commode d'écrire G^0 en représentation de Landau :

$$G_{\sigma,j-l}^0(\vec{r}, \vec{r}', \tau - \tau') = T \sum_{\omega_\nu} e^{-i\omega_\nu(\tau - \tau')} \int_{-\pi/s}^{\pi/s} \frac{dp_z}{2\pi} e^{ip_z s(j-l)} \int \frac{dp_y}{2\pi} e^{ip_y(y-y')} \times \\ \times \sum_n \Psi_n(x - p_y l_H^2) \Psi_n(x' - p_y l_H^2) G_{\sigma,n,p_z}^0(\omega_\nu) \quad (\text{C.11})$$

où

$$G_{\sigma,n,p_z}^0(\omega_\nu) = \frac{1}{i\omega_\nu - \xi_{\sigma,n,p_z} + \Sigma(\omega_\nu)} \quad (\text{C.12})$$

et

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{(\pi l_H^2)^{1/4}} \frac{1}{2^{n/2} \sqrt{n!}} \exp\left(-\frac{x^2}{2l_H^2}\right) H_n\left(\frac{x}{l_H}\right). \quad (\text{C.13})$$

Ici H_n est le polynôme de Hermitte de degré n , $l_H = 1/\sqrt{eH}$ est la longueur magnétique,

$$\xi_{\sigma,n,p_z} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \omega_c - 2t \cos p_z s - \mu - \sigma \mu_e H, \quad (\text{C.14})$$

$\omega_\nu = \pi T(2\nu + 1)$ sont les fréquences de Matsubara et $\Gamma(\omega_\nu)$ est la partie imaginaire de la self-énergie due aux impuretés Σ . La partie réelle de Σ est incluse dans le potentiel chimique. Ici nous considérons que Σ est indépendant des nombres quantiques, ce qui est valable pour une diffusion sur les impuretés à courte portée.

Quant à la correction $G^{(1)}$, elle est donnée par

$$G_{\sigma,j,l}^{(1)}(\vec{r}, \tau, \vec{r}', \tau') = s \sum_k \iint d^2 r'' d\tau'' G_{\sigma,j-k}^0(\vec{r}, \vec{r}'', \tau - \tau'') V_k(\vec{r}'', \tau'') \\ \times G_{\sigma,k-l}^0(\vec{r}'', \vec{r}', \tau'' - \tau') \quad (\text{C.15})$$

où V_k est le potentiel

$$V_k(\vec{r}, \tau) = i e t s \mathcal{A}_z(\vec{r}, k, \tau) \left(\hat{\Delta}_{k+} - \hat{\Delta}_{k-} \right) \quad (\text{C.16})$$

qui est pris comme perturbation.

Annexe D

Calcul de σ_{zz}

D.1 Principe du calcul

La conductivité longitudinale σ_{zz} caractérise l'apparition d'une densité de courant dans la direction z en réponse à l'application d'un champ électrique externe E_z

$$j_z = \sigma_{zz} E_z. \quad (\text{D.1})$$

Dans la perspective de trouver la conductivité longitudinale, nous introduisons formellement un potentiel vecteur monochromatique alternatif $\mathcal{A}_z$ dépendant de la variable de Matsubara τ ayant la forme

$$\mathcal{A}_z(\vec{r}, j, \tau) = \mathcal{A}_z(\vec{k}, k_z, \omega) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r} + i k_z s j - i \omega \tau} \quad (\text{D.2})$$

et tel que

$$E_z = -\frac{\partial \mathcal{A}_z}{\partial t}. \quad (\text{D.3})$$

La relation entre E_z et $\mathcal{A}_z$ prend une forme plus simple dans l'espace de Fourier

$$E_z(\vec{k}, k_z, \omega) = i\omega \mathcal{A}_z(\vec{k}, k_z, \omega). \quad (\text{D.4})$$

Alors, la relation entre le champ formel $\mathcal{A}_z$ et la densité de courant est en représentation de Fourier

$$j_z(\vec{k}, k_z, \omega) = s \sum_j \iint j_z(\vec{r}, j, \tau) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r} - i k_z s j + i \omega \tau} d^2r d\tau = \sigma_{zz} i\omega \mathcal{A}_z(\vec{k}, k_z, \omega). \quad (\text{D.5})$$

Le calcul qui suit est donc un calcul de type réponse linéaire.

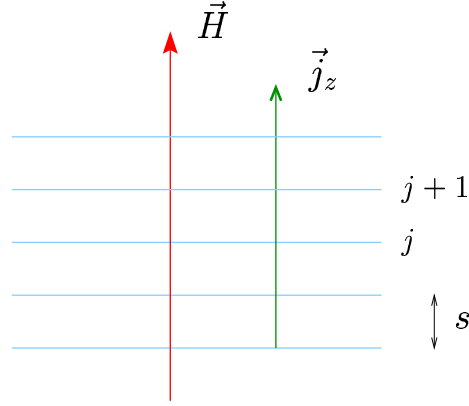


FIG. D.1 – Le champ magnétique et le courant sont tous deux perpendiculaires aux couches dans notre étude.

D.2 Fonction de Green et courant

Dans le modèle quasi-2D (Annexe C), la densité de courant j_z ne peut provenir que du processus tunnel, et est alors donnée par

$$\hat{j}_z(\vec{r}, j, \tau) = -\frac{\delta \mathcal{H}_T}{\delta \mathcal{A}_z(\vec{r}, j, \tau)}. \quad (\text{D.6})$$

La dérivation du hamiltonien $\mathcal{H}_T$ conduit pour un faible potentiel vecteur $\mathcal{A}_z$ à

$$\hat{j}_z(\vec{r}, j, \tau) = -iets \sum_{\sigma} \left[\Psi_{j,\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \Psi_{j+1,\sigma}(\vec{r}) e^{-ies \mathcal{A}_z(\vec{r}, j, \tau)} - H.C. \right] \quad (\text{D.7})$$

$$\begin{aligned} \approx & -iets \sum_{\sigma} \left[\Psi_{j,\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \Psi_{j+1,\sigma}(\vec{r}) - \Psi_{j+1,\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \Psi_{j,\sigma}(\vec{r}) - \right. \\ & \left. - \left(\Psi_{j,\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \Psi_{j+1,\sigma}(\vec{r}) + \Psi_{j+1,\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \Psi_{j,\sigma}(\vec{r}) \right) ies \mathcal{A}_z(\vec{r}, j, \tau) \right] \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Ainsi, en exprimant la densité de courant moyennée (dans l'ensemble grand canonique) dans la j ème couche à l'aide de la fonction de Green du système, nous obtenons

$$j_j(\vec{r}, \tau) = \langle \hat{j}_z(\vec{r}, j, \tau) \rangle = j_j^P(\vec{r}, \tau) + j_j^D(\vec{r}, \tau) \quad (\text{D.9})$$

où

$$j_j^P(\vec{r}, \tau) = -iets \sum_{\sigma} (G_{j+1,j}^{\sigma,\sigma}(\vec{r}, \tau, \vec{r}, \tau) - G_{j,j+1}^{\sigma,\sigma}(\vec{r}, \tau, \vec{r}, \tau)) \quad (\text{D.10})$$

est la partie paramagnétique de la densité de courant et

$$j_j^D(\vec{r}, \tau) = -e^2 t s^2 \mathcal{A}_z(\vec{r}, j, \tau) \sum_{\sigma} (G_{j,j+1}^{\sigma,\sigma}(\vec{r}, \tau, \vec{r}, \tau) + G_{j+1,j}^{\sigma,\sigma}(\vec{r}, \tau, \vec{r}, \tau)) \quad (\text{D.11})$$

est la partie diamagnétique de la densité de courant.

D.3 Courant diamagnétique

Au premier ordre en potentiel vecteur $\mathcal{A}_z$, le courant diamagnétique s'écrit par conséquent

$$j_j^D(\vec{r}, \tau) = -e^2 t s^2 \mathcal{A}_z(\vec{r}, j, \tau) \sum_{\sigma} (G_{\sigma,-1}^0(\vec{r}, \vec{r}, 0) + G_{\sigma,1}^0(\vec{r}, \vec{r}, 0)) \quad (\text{D.12})$$

D'après l'Éq. (C.11), nous avons directement

$$G_{\sigma,j-l}^0(\vec{r}, \vec{r}, 0) = \frac{g_0}{2} \omega_c T \sum_{\omega_{\nu}} \int_{-\pi/s}^{\pi/s} \frac{dp_z}{2\pi} e^{ip_z s(j-l)} \sum_n G_{\sigma,n,p_z}^0(\omega_{\nu}) \quad (\text{D.13})$$

où

$$\frac{g_0}{2} \omega_c = \frac{1}{2\pi l_H^2} = \int \frac{dp_y}{2\pi} [\Psi_n(x - p_y l_H^2)]^2 \quad (\text{D.14})$$

est la dégénérescence du niveau de Landau par projection d'état de spin. Alors, le courant diamagnétique s'exprime comme

$$j_j^D(\vec{r}, \tau) = -e^2 t s^2 \mathcal{A}_z(\vec{r}, j, \tau) g_0 \omega_c \sum_{n,\sigma} \int \frac{dp_z}{2\pi} \cos(p_z s) T \sum_{\omega_{\nu}} G_{\sigma,n,p_z}^0(\omega_{\nu}). \quad (\text{D.15})$$

Ensuite, nous transformons la sommation sur les fréquences de Matsubara en intégration, et effectuons le prolongement analytique [124]

$$T \sum_{\omega_{\nu}} G_{\sigma,n,p_z}(\omega_{\nu}) = \frac{i}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon f_{\varepsilon} (G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^A - G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^R) \quad (\text{D.16})$$

où

$$f_{\varepsilon} = \tanh \frac{\varepsilon}{2T} = 1 - 2n_F(\varepsilon). \quad (\text{D.17})$$

Puis, réécrivant l'expression pour la densité de courant diamagnétique en faisant une intégration par parties sur la variable p_z , et effectuant la transformation de Fourier, nous trouvons

$$j^D(\vec{k}, k_z, \omega) = \mathcal{A}_z(\vec{k}, k_z, \omega) e^{2\frac{g_0}{2}\omega_c} \sum_{n,\sigma} \int \frac{dp_z}{2\pi} v_z^2(p_z) \int \frac{d\varepsilon}{4\pi i} f_\varepsilon \times \left\{ (G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^R)^2 - (G_{\sigma,n,p_z,\varepsilon}^A)^2 \right\}. \quad (\text{D.18})$$

D.4 Courant paramagnétique

La partie paramagnétique de la densité de courant moyennée est donnée par

$$j_j^P(\vec{r}, \tau) = -iets \sum_{\sigma} \left[G_{\sigma,j+1,j}^{(1)}(\vec{r}, \tau, \vec{r}, \tau) - G_{\sigma,j,j+1}^{(1)}(\vec{r}, \tau, \vec{r}, \tau) \right]. \quad (\text{D.19})$$

Nous cherchons la transformée de Fourier de la densité de courant

$$j_z^P(\vec{k}, k_z, \omega) = s \iint d^2r d\tau e^{i\omega\tau - i\vec{k}\cdot\vec{r}} \sum_j e^{-ik_z s j} j_j^P(\vec{r}, \tau). \quad (\text{D.20})$$

La sommation sur j donne

$$\begin{aligned} s \sum_j e^{-ik_z s j} \left(G_{j+1,j}^{(1)} - G_{j,j+1}^{(1)} \right) &= \\ &= s \sum_j e^{-ik_z s j} \iint \frac{dp_z dp'_z}{(2\pi)^2} (e^{ip_z s(j+1) - ip'_z s j} - e^{ip_z s j - ip'_z s(j+1)}) G_{p_z, p'_z}^{(1)} \\ &= \iint \frac{dp_z dp'_z}{(2\pi)^2} \delta(p_z - p'_z - k_z) (e^{ip_z s} - e^{-ip'_z s}) G_{p_z, p'_z}^{(1)} \\ &= \int \frac{dp_z}{2\pi} (e^{ip_z s} - e^{-i(p_z - k_z)s}) G_{p_z, p_z - k_z}^{(1)}. \end{aligned} \quad (\text{D.21})$$

Par définition, nous avons

$$G_{p_z, p'_z}^{(1)}(\vec{r}, \tau, \vec{r}, \tau) = \sum_{l,m} e^{-ip_z s l + ip'_z s m} G_{l,m}^{(1)}(\vec{r}, \tau, \vec{r}, \tau). \quad (\text{D.22})$$

Utilisant (C.15) et (C.16), nous arrivons à

$$G_{p_z, p'_z}^{(1)}(\vec{r}, \tau, \vec{r}, \tau) = - \iint d^2 r'' d\tau'' G_{p_z}^0(\vec{r}, \vec{r}'', \tau - \tau'') ev_z(p'_z) \\ \times \mathcal{A}_z(\vec{r}'', p_z - p'_z, \tau'') G_{p'_z}^0(\vec{r}'', \vec{r}, \tau'' - \tau). \quad (\text{D.23})$$

Effectuant la transformation de Fourier inverse par rapport à $\vec{r}$ et la transformation inverse par rapport à τ , nous avons

$$\iint d^2 r d\tau e^{i\omega\tau - i\vec{k}\cdot\vec{r}} G_{p_z, p'_z}^{(1)}(\vec{r}, \tau, \vec{r}, \tau) = -\frac{g_0}{2} \omega_c T \sum_{n, \omega_\nu} G_{n, p_z}^0(\omega_+) ev_z(p'_z) \\ \times \mathcal{A}_z(\vec{k}, p_z - p'_z, \omega) G_{n, p'_z}^0(\omega_-), \quad (\text{D.24})$$

où $\omega_\pm = \omega_\nu \pm \omega/2$. Rassemblant (D.20), (D.21) et (D.24), nous trouvons finalement

$$j^P(\vec{k}, k_z, \omega) = i\mathcal{A}_z(\vec{k}, k_z, \omega) e^2 t s \frac{g_0}{2} \omega_c \sum_{n, \sigma} \int \frac{dp_z}{2\pi} (e^{ip_z s} - e^{-i(p_z - k_z)s}) \\ \times v_z(p_z - k_z) T \sum_{\omega_\nu} G_{\sigma, n, p_z}^0(\omega_+) G_{\sigma, n, p_z - k_z}^0(\omega_-). \quad (\text{D.25})$$

Nous nous intéressons à la limite $k_z \ll p_z$, car E_z est supposé uniforme. Alors,

$$j^P(\vec{k}, k_z, \omega) = -\mathcal{A}_z(\vec{k}, k_z, \omega) e^2 \frac{g_0}{2} \omega_c \sum_{n, \sigma} \int \frac{dp_z}{2\pi} v_z^2(p_z) \\ \times T \sum_{\omega_\nu} G_{\sigma, n, p_z}^0(\omega_+) G_{\sigma, n, p_z}^0(\omega_-). \quad (\text{D.26})$$

Ensuite, après avoir transformé la sommation sur les fréquences de Matsubara en intégration sur l'énergie ε et après avoir effectué le prolongement analytique [124], nous obtenons

$$T \sum_{\omega_\nu} G_{p_z}^0(\omega_+) G_{p_z}^0(\omega_-) = T \sum_{\omega_\nu} G_{p_z}^0(\omega_\nu) G_{p_z}^0(\omega_\nu - \omega) = \int \frac{d\varepsilon}{4\pi i} \\ \times \left\{ \underbrace{G_{p_z, \varepsilon}^R (f_\varepsilon - f_{\varepsilon - \omega}) G_{p_z, \varepsilon - \omega}^A}_{RA} + \underbrace{G_{p_z, \varepsilon}^R f_{\varepsilon - \omega} G_{p_z, \varepsilon - \omega}^R - G_{p_z, \varepsilon}^A f_\varepsilon G_{p_z, \varepsilon - \omega}^A}_{RR} \right\} \quad (\text{D.27})$$

D.5 Conductivité statique

A l'ordre zéro en ω , la densité de courant paramagnétique provenant du terme RR est compensée par la densité de courant diamagnétique (voir l'Éq. (D.18))

$$j_{k,\omega}^{P,RR} + j_{k,\omega}^D = 0. \quad (\text{D.28})$$

Au premier ordre en ω , une densité de courant totale non nulle est produite par les termes $RA + RR$ du courant paramagnétique. Utilisant l'Éq. (D.5), nous trouvons la conductivité statique

$$\sigma_{zz} = e^2 \frac{g_0}{2} \omega_c \sum_{n,\sigma} \int \frac{dp_z}{2\pi} v_z^2(p_z) \int \frac{d\varepsilon}{4\pi} \left(f'_\varepsilon G_{p_z,\varepsilon}^R G_{p_z,\varepsilon}^A + 2f_\varepsilon \Re \left(G_{p_z,\varepsilon}^R G_{p_z,\varepsilon}'^R \right) \right), \quad (\text{D.29})$$

où les primes signifient la dérivée par rapport à l'énergie ε . En faisant une intégration par parties sur l'énergie dans le terme RR et utilisant (D.17), nous arrivons à l'Éq. (5.1).

Annexe E

Supraconductivité non conventionnelle

Nous donnons une rapide introduction à la supraconductivité non conventionnelle. Dans un premier temps, nous définissons la terminologie. Puis, nous introduisons la démarche générale pour chercher les formes possibles pour le paramètre d'ordre supraconducteur à partir du principe de classification. Enfin, nous indiquons brièvement quelques traits caractéristiques typiques des propriétés des supraconducteurs non conventionnels. Pour de plus amples détails sur la supraconductivité non conventionnelle, il est utile de se référer au livre de Mineev et Samokhin [84] et les nombreuses références qu'il contient.

E.1 Terminologie

Le phénomène de supraconductivité est expliqué par la formation d'états liés de paires d'électrons à basse température. Dans la théorie (conventionnelle) BCS, l'appariement des électrons en paires de Cooper se réalise grâce au potentiel attractif médié par l'interaction électron-phonon. Pour cette raison, l'état supraconducteur conventionnel suit complètement la symétrie ponctuelle du réseau cristallin.

Le passage de l'état normal à l'état supraconducteur est une transition de phase du second ordre. D'après la théorie de Landau, cette transition est accompagnée d'une brisure de symétrie. La supraconductivité introduit une cohérence de phase, ce qui signifie que c'est la symétrie de jauge qui est spon-

tanément brisée à basse température : des états avec des phases différentes pour le paramètre d'ordre deviennent discernables. Si seule la symétrie de jauge est brisée à la transition, le paramètre d'ordre doit posséder la symétrie complète du groupe ponctuel du cristal, comme c'est le cas dans la théorie BCS.

Toutefois, rien n'interdit la possibilité de briser une autre symétrie en plus lors de la transition supraconductrice, si nous imaginons que les phonons ne sont pas à l'origine de l'appariement des électrons. Dans ce cas, nous serions en présence de supraconductivité non conventionnelle. À ce jour, la possibilité d'apparier des électrons autrement que via les phonons est le sujet d'une intense activité de recherche. Les mécanismes les plus populaires font appel aux fluctuations de spin.

Les supraconducteurs dits non conventionnels présentent généralement des propriétés très différentes des supraconducteurs BCS. Dans la dernière section de cette annexe, nous donnons quelques traits caractéristiques permettant de distinguer les supraconducteurs non conventionnels.

E.2 Paramètre d'ordre

Sans connaître l'origine microscopique exacte de la supraconductivité non conventionnelle, il est toutefois possible de décrire de façon phénoménologique la forme du paramètre d'ordre. Pour cela, nous faisons encore l'hypothèse qu'il y a formation de paires d'électrons. La fonction d'onde de la paire de Cooper (ou paramètre d'ordre) comporte une partie de spin et une partie orbitale et par conséquent est une matrice 2×2 . Le principe de Pauli impose que la fonction d'onde change de signe lors de la permutation des électrons formant la paire. Le spin total de la paire peut être soit singulet ($S=0$), soit triplet ($S=1$). La partie orbitale dépend du moment de la paire $\mathbf{k}$.

Si le spin de la paire est singulet, le paramètre d'ordre est décrit par une unique composante scalaire $g(\mathbf{k})$

$$\Delta_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} \Delta_{\uparrow\uparrow} & \Delta_{\uparrow\downarrow} \\ \Delta_{\downarrow\uparrow} & \Delta_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = g(\mathbf{k}) i\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & g(\mathbf{k}) \\ -g(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{E.1})$$

où σ_x , σ_y , et σ_z sont les matrices de Pauli¹. Comme la partie de spin de la

1. Dans la base des spins ($|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$), $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, et $\sigma_z =$

paire est antisymétrique par permutation des particules, la fonction orbitale $g(\mathbf{k})$ est une fonction paire du moment $\mathbf{k}$ d'après le principe de Pauli.

Si le spin de la paire est triplet, le paramètre d'ordre est décrit par une composante vectorielle $\mathbf{d}(\mathbf{k})$

$$\Delta_{\alpha\beta} = i(\mathbf{d}(\mathbf{k})\sigma)\sigma_y = \begin{pmatrix} -d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) & d_z(\mathbf{k}) \\ d_z(\mathbf{k}) & d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (\text{E.2})$$

où $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ est une fonction impaire de $\mathbf{k}$.

Dans les systèmes isotropes (groupe SO_3), les fonctions orbitales sont développées en fonction des harmoniques sphériques $Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}})$ selon les valeurs du moment angulaire orbital l . Dans le cas d'un spin de paire singulet, seules les valeurs l paires sont permises et la composante orbitale peut s'écrire comme une combinaison

$$g^l(\mathbf{k}) = \sum_{m=-l}^{+l} a_{lm} Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}})$$

où les a_{lm} sont des coefficients complexes représentant le paramètre d'ordre. Les états de pair respectifs sont alors dénommés comme traditionnellement en atomistique, s (pour $l = 0$), d ($l = 2$), ... Dans le cas d'un spin triplet, les composantes du paramètre d'ordre vectoriel orbital peut s'exprimer comme

$$d_l^\alpha(\mathbf{k}) = \sum_{m=-l}^{+l} b_{lm}^\alpha Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}})$$

où l est impair, et les b_{lm}^α sont complexes. Les états de paire sont dits p (pour $l = 1$), f ($l = 3$), ...

Ce principe de classification des états supraconducteurs avec le moment angulaire orbital l dans les systèmes isotropes est également valable dans les cristaux avec désormais les représentations irréductibles Γ du groupe ponctuel. Pour un spin singulet, le paramètre d'ordre peut donc être développé comme

$$g(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^{d_\Gamma} \eta_i \Psi_i^\Gamma(\hat{\mathbf{k}}) \quad (\text{E.3})$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

et pour un spin triplet

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^{d_\Gamma} \vec{\eta}_i \Psi_i^\Gamma(\hat{\mathbf{k}}). \quad (\text{E.4})$$

Ici d_Γ désigne la dimensionnalité de la représentation irréductible Γ , et les coefficients η_i et $\vec{\eta}_i$ sont des coefficients complexes.

Si le couplage spin-orbite est fort, comme c'est généralement le cas dans les matériaux contenant des éléments chimiques lourds comme l'uranium, le paramètre d'ordre se développe plutôt selon les fonctions de base vectorielles $\Psi_i^\Gamma(\hat{\mathbf{k}})$, soit

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^{d_\Gamma} \eta_i \Psi_i^\Gamma(\hat{\mathbf{k}})$$

avec

$$\Psi_i^\Gamma(\hat{\mathbf{k}}) = \Psi_i^x(\hat{\mathbf{k}})\hat{x} + \Psi_i^y(\hat{\mathbf{k}})\hat{y} + \Psi_i^z(\hat{\mathbf{k}})\hat{z}$$

où la base est définie par les axes cristallins $\hat{x}$, $\hat{y}$, et $\hat{z}$. Notons qu'en présence de couplage spin-orbite (qui par définition mélange les nombres quantiques orbitaux et de spin), le spin de l'électron n'est plus un bon nombre quantique, et que les états supraconducteurs sont plutôt classifiés en termes de pseudospin.

L'état supraconducteur conventionnel, correspondant à la représentation triviale identité, est invariant sous toutes les opérations de symétrie du sous-groupe formé par le groupe ponctuel et le renversement du temps.

E.3 Traits Caractéristiques

Il existe de nombreux traits caractéristiques des propriétés thermodynamiques ou de transport permettant de mettre en évidence un appariement de la paire de Cooper non-conventionnel. Nous en donnons ici rapidement quelques uns.

Noeuds dans le spectre des excitations élémentaires

La présence d'éléments de symétrie non triviaux, conduit à l'existence de noeuds dans le paramètre d'ordre supraconducteur. Cette présence de noeuds dans le spectre des excitation des quasi-particules conduit à des directions privilégiées du moment de la paire de Cooper sur la surface de Fermi.

Cela a une conséquence au niveau de la dépendance en température des propriétés thermodynamiques comme la chaleur spécifique. Au lieu d'avoir la dépendance

$$C \sim \exp\left(-\frac{\Delta}{T}\right)$$

caractéristique d'un gap dans la densité d'états, la chaleur spécifique suit une dépendance en loi de puissance.

Notons toutefois que si les dépendances en température permettent de mettre en évidence sans ambiguïté le caractère non-conventionnel de la supraconductivité, elles ne permettent pas de déterminer facilement la symétrie précise de l'état supraconducteur. La raison est que l'anisotropie supraconductrice microscopique est brouillée par l'anisotropie du cristal, et par la présence d'impuretés. L'exposant de la loi de puissance en température est une moyenne de tous ces effets (dont il est difficile de faire la part des choses). À basse température, il est prédit un comportement asymptotique vers une loi universelle (indépendante de la concentration en impuretés).

Les impuretés

La sensibilité de la température critique avec la concentration en impuretés non magnétique est la signature d'un appariement non-conventionnel (voir Chap. 9). L'origine de cette dépendance avec les impuretés est encore reliée à la structure nodale du gap.

Structure du spin de la paire de Cooper

La mise en évidence d'un appariement de spin de type triplet par mesure de Knight shift par exemple, permet d'établir à coup sûr un état supraconducteur non-conventionnel. En effet, le spin dans un supraconducteur conventionnel BCS est singulet.

Diagramme de phase

La présence de phases supraconductrices multiples est aussi un trait caractéristique d'un état supraconducteur non-conventionnel (à priori avec un paramètre d'ordre à plusieurs composantes). Le composé UPt₃ en est l'archétype.

Liste de publications

De Haas-van Alphen effect in two- and quasi-two-dimensional metals and superconductors.

T. Champel and V.P. Mineev

Philosophical Magazine B 81, 55-74 (2001).

Theory of Equilibrium Flux Lattice in UPt3 under Magnetic Field Parallel to Hexagonal Crystal Axis.

T. Champel and V.P. Mineev

Physical Review Letters 86, 4903-06 (2001).

Chemical potential oscillations and de Haas-van Alphen effect.

T. Champel

Physical Review B 64, 054407 (2001).

Origin of combination frequencies in quantum magnetization oscillations of two-dimensional multiband metals.

T. Champel

Physical Review B 65, 153403 (2002).

Magnetic quantum oscillations of the longitudinal conductivity σ_{zz} in quasi two-dimensional metals.

T. Champel and V.P. Mineev

Physical Review B 66, 195111 (2002).

Physical Review B 67, 089901(E) (2003) (Erratum).

Comment on "London Theory for Superconducting Phase Transitions in External Magnetic Fields: Application to UPt3"

V.P. Mineev and T. Champel

Physical Review Letters 91, 079701 (2003).

Theory of superconductivity in ferromagnetic superconductors with triplet pairing.

V.P. Mineev and T. Champel

A paraître dans **Physical Review B** (2003).

Reply to "Comment on 'Origin of combination frequencies in quantum magnetic oscillations of two-dimensional multiband metals'".

T. Champel

Soumis à **Physical Review B** (2003).

Publications suite à des conférences:

Two-component superconductivity of heavy fermionic material UPt_3 .

V.P. Mineev and T. Champel

International Journal of Modern Physics B **16** (20-22), 3024 (2002).

Giant quantum oscillations of the longitudinal magnetoresistance in quasi two-dimensional metals.

T. Champel and V.P. Mineev

À paraître **Physica B** (2003).

Bibliographie

- [1] *The Quantum Hall effect*, edited by R.E. Prange and S.M. Girvin (New York, Springer, 1987).
- [2] I.M. Lifshits and A.M. Kosevich, Sov. Phys. JETP **2**, 636 (1956).
- [3] A.A. Abrikosov, *Fundamentals of the theory of metals* (Elsevier, Amsterdam, 1988).
- [4] Yu.A. Bychkov, Sov. Phys. JETP **12**, 977 (1961).
- [5] R. Peierls, Z. Phys. **81**, 186 (1933).
- [6] D. Shoenberg, J. Low Temp. Phys. **56**, 417 (1984).
- [7] P. Grigoriev, Thèse de l'université de Constance (2002).
- [8] J.H. Condon, Phys. Rev. **145**, 526 (1966).
- [9] T. Champel and V.P. Mineev, Philos. Mag. B **81**, 55 (2001).
- [10] J. Singleton, Rep. Prog. Phys. **63**, 1111 (2000).
- [11] N. Harrison, A. House, I. Deckers, J. Caulfield, J. Singleton, F. Herlach, W. Hayes, M. Kurmoo, and P. Day, Phys. Rev. B **52**, 5584 (1995).

- [12] N. Harrison, R. Bogaerts, P.H.P. Reinders, J. Singleton, S.J. Blundell, and F. Herlach, Phys. Rev. B **54**, 9977 (1996).
- [13] N. Harrison, C.H. Mielke, D.G. Rickel, J. Wosnitzer, J.S. Qualls, J.S. Brooks, E. Balthes, D. Schweitzer, I. Heinen, and W. Strunz, Phys. Rev. B **58**, 10248 (1998).
- [14] H. Weiss, M.V. Kartsoy, W. Biberacher, E. Balthes, A.G.M. Jansen, and N.D. Kushch, Phys. Rev. B **60**, R16259 (1999).
- [15] P.D. Grigoriev and I.D. Vagner, JETP Lett. **69**, 156(1999).
- [16] P.D. Grigoriev and I.D. Vagner, cond-mat/0009409v2 (2000).
- [17] T. Champel, Phys. Rev. B **64**, 054407 (2001).
- [18] T. Champel, Phys. Rev. B **65**, 153403 (2002).
- [19] M.A. Itskovsky, T. Maniv, and I.D. Vagner, Phys. Rev. B **61**, 14616 (2000).
- [20] K. Yamaji, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 1520 (1989).
- [21] A.S. Alexandrov and A.M. Bratkovsky, Phys. Rev. Lett. **76**, 1308 (1996).
- [22] M. Nakano, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 19 (1997).
- [23] M. Nakano, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 1801 (1999).
- [24] M. Nakano, Phys. Rev. B **62**, 45 (2000).
- [25] A.S. Alexandrov and A.M. Bratkovsky, Phys. Rev. B **63**, 033105 (2001).
- [26] P. Grigoriev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **119**, 1257 (2001) [Sov. Phys. JETP **92**, 1090 (2001)].

- [27] R.A. Shepherd, M. Elliott, W.G. Herrenden-Harker, M. Zervos, P.R. Morris, M. Beck, and M. Ilegems, Phys. Rev. B **60**, R11277 (1999).
- [28] J.E. Graebner and M. Robbins, Phys. Rev. Lett. **36**, 422 (1976).
- [29] C.J. Haworth, S.M. Hayden, R.J.B.M. Janssen, P. Meeson, M. Springford, and A. Wasserman, 1999, Physica B **259-261**, 1066 (1999).
- [30] N. Harrison, S.M. Hayden, P. Meeson, M. Springford, P.J. van der Wel, and A.A. Menovsky, Phys. Rev. B **50**, 4208 (1994).
- [31] R. Corcoran, N. Harrison, S.M. Hayden, P. Meeson, M. Springford, P.J. van der Wel, Phys. Rev. Lett. **72**, 701 (1994).
- [32] G. Goll, M Heinecke, A.G.M. Jansen, W. Joss, L. Nguyen, E. Steep, K. Winzer, and P. Wyder, 1996, Phys. Rev. B **53**, R8871 (1996).
- [33] T. Terashima, C. Haworth, H. Takeya, S. Uji, H. Aoki, and K. Kadowaki, Phys. Rev. B **56**, 5120 (1997).
- [34] M. Hedo, Y. Inada, K. Sakurai, E. Yamamoto, Y. Haga, Y. Onuki, S. Yakahashi, M. Higuchi, T. Maehira, and A. Hasegawa, Phil. Mag. B **77**, 975 (1998).
- [35] Y. Haga, Y. Inada, K. Sakurai, Y. Tokiwa, E. Yamamoto, T. Honma, and Y. Onuki, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 342 (1999).
- [36] H. Ohkuni, Y. Inada, Y. Tokiwa, K. Sakurai; R. Settai; T. Honma, Y. Haga, E. Yamamoto, Y. Onuki, H. Yamamagi, S. Takahashi, and T. Yanagisawa, Phil. Mag. B **79**, 1045 (1999).
- [37] T. Sasaki, W. Biberacher, K. Neumaier, W. Hehn, K. Andres, and T. Fukase Phys. Rev. B **57**, 10889 (1998).
- [38] P. Miller and B.L. Györfy, J. Phys.: Condens. Matter **7**, 5579 (1995).

- [39] S. Dukan and Z. Tesanovich, Phys. Rev. Lett. **74**, 2311 (1995).
- [40] V.M. Gvozdkov and M.V. Gvozdkova, Phys. Rev. B **58**, 8716 (1998).
- [41] L.P. Gor'kov and J.R. Schrieffer, Phys. Rev. Lett. **80**, 3360 (1998).
- [42] K. Maki, Phys. Rev. B **44**, 2861 (1991).
- [43] M.J. Stephen, Phys. Rev. B **45**, 5481 (1992).
- [44] M.R. Norman and A.H. Mac Donald, Phys. Rev. B **54**, 4239 (1996).
- [45] G.M Bruun, V. Nikos Nicopoulos, and N.F. Johnson, Phys. Rev. B **56**, 809 (1997).
- [46] M.G. Zhuravlev, T. Maniv, I.D. Vagner, and P. Wyder, Phys. Rev. B **56**, 14693 (1997).
- [47] M.G. Vavilov, and V.P. Mineev, Sov. Phys. JETP **85**, 1024 (1997).
- [48] M.G. Vavilov, and V.P. Mineev, Sov. Phys. JETP, **86**, 1191 (1998).
- [49] V.P. Mineev, Physica B **259-261**, 1072 (1999).
- [50] V.P. Mineev, Phil. Mag. B **80**, 307 (2000).
- [51] T. Champel and V.P. Mineev, Phys. Rev. B **66**, 195111 (2002); Phys. Rev. B **67**, 089901 (E) (2003).
- [52] J. Wosnitza, S. Wanka, J. Hagel, H.v. Löhneysen, J.S. Qualls, J.S. Brooks, E. Balthes, J.A. Schlueter, U. Geiser, J. Mohtasham, R.W. Winter, and G.L. Gard, Phys. Rev. Lett. **86**, 508 (2001).
- [53] M.-S. Nam, A. Ardavan, J.A. Symington, J. Singleton, N. Harrison, C.H. Mielke, J.A. Schlueter, R.W. Winter, and G.L. Gard, Phys. Rev. Lett. **87**, 117001 (2001).

- [54] J. Wosnitza, S. Wanka, J. Hagel, E. Balthes, N. Harrison, J.A. Schlueter, A.M. Kini, U. Geiser, J. Mohtasham, R.W. Winter, and G.L. Gard, Phys. Rev. B **61**, 7383 (2000).
- [55] P.D. Grigoriev, M.V. Kartsovnik, W. Biberacher, N.D. Kushch, and P. Wyder, Phys. Rev. B **65**, 060403(R) (2002).
- [56] P.D. Grigoriev, M.V. Kartsovnik, W. Biberacher, and P. Wyder, cond-mat/0108352 (non publié).
- [57] P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B **67**, 144401 (2003).
- [58] V.M. Gvozdkov, Fiz. Nizk. Temp. **27**, 956 (2001) [Low Temp. Phys. **27**, 704 (2001)].
- [59] M.V. Kartsovnik, P.D. Grigoriev, W. Biberacher, N.D. Kushch, and P. Wyder, Phys. Rev. Lett. **89**, 126802 (2002).
- [60] B.L. Altshuler, A.G. Aronov, D.E. Khmel'nitskii, and A.I. Larkin, *Coherent Effects in Disordered Conductors* (MIR Publishers, Moscow, 1982).
- [61] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **37**, 1233 (1974).
- [62] T. Ando, A.B. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).
- [63] M.E. Raikh and T.V. Shahbazyan, Phys. Rev. B **47**, 1522 (1993).
- [64] B. Laikhtman and E.L. Altshuler, Ann. Phys. (N.Y.) **232**, 332 (1994).
- [65] J. Wosnitza, J. Hagel, J.S. Qualls, J.S. Brooks, E. Balthes, D. Schweitzer, J.A. Schlueter, U. Geiser, J. Mohtasham, R.W. Winter, and G.L. Gard, Phys. Rev. B **65**, 180506(R) (2002).
- [66] J. Singleton, P.A. Goddard, A. Ardavan, N. Harrison, S.J. Blundell, J.A. Schlueter, and A.M. Kini, Phys. Rev. Lett. **88**, 037001 (2002).

- [67] P. Rodière, Thèse de l'université Joseph Fourier-Grenoble I (2001).
- [68] R. Joynt and L. Taillefer, *Rev. of Mod. Phys.* **74**, 235 (2002).
- [69] G. Aeppli, E. Bucher, C. Broholm, J.K. Kjems, J. Baumann, and J. Hufnagl, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 615 (1988).
- [70] R.A. Fisher, S. Kim, B.F. Woodfield, N.E. Phillips, L. Taillefer, K. Hasselbach, J. Flouquet, A.L. Giorgi, and J.L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1411 (1989).
- [71] G. Bruls, D. Weber, B. Wolf, P. Thalmeier, B. Lüthi, A. de Visser, and A. Menovsky, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2294 (1990).
- [72] S. Adenwalla, S.W. Lin, Q.Z. Ran, Z. Zhao, J.B. Ketterson, J.A. Sauls, L. Taillefer, D.G. Hinks, M. Levy, and Bimal K. Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2298 (1990).
- [73] D.W. Hess, T.A. Tokuyasu and J.A. Sauls, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 8135 (1989).
- [74] S.K. Sundaram and R. Joynt, *Phys. Rev. B* **40**, 8780 (1989).
- [75] K. Machida, T. Nishira, and T. Ohmi, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 3364 (1999).
- [76] S.M. Hayden, L. Taillefer, C. Vettier, and J. Flouquet, *Phys. Rev. B* **46**, 8675 (1992).
- [77] E.D. Isaacs, P. Zschack, C.L. Broholm, C. Burns, G. Aeppli, A.P. Ramirez, T.T.M. Palstra, R.W. Erwin, N. Stücheli, and E. Bucher, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1178 (1995).
- [78] R. Joynt, V.P. Mineev, G.E. Volovik, and M.E. Zhitomirsky, *Phys. Rev. B* **42**, 2014 (1990).

- [79] M.E. Zhitomirsky and I.A. Luk'yanchuk, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **58**, 127 (1993) [JETP Lett. **58**, 131 (1993)].
- [80] M.E. Zhitomirsky and K. Ueda, Phys. Rev. B **53**, 6591 (1996).
- [81] V.P. Mineev, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **57**, 659 (1993) [JETP Lett. **57**, 680 (1993)].
- [82] D.C. Chen and A. Garg, Phys. Rev. Lett. **70**, 1689 (1993).
- [83] J.B. Kycia, J.I. Hong, M.J. Graf, J.A. Sauls, D.N. Seidman, and W.P. Halperin, Phys. Rev. B **58**, R603 (1998).
- [84] V.P. Mineev and K.V. Samokhin, *Introduction to Unconventional Superconductivity* (Gordon and Breach Sc. Publ., 1999).
- [85] S. Yip and A. Garg, Phys. Rev. B **48**, 3304 (1993).
- [86] B. Shivarum, T. Rosenbaum, and D. Hinks, Phys. Rev. Lett. **57**, 1259 (1986).
- [87] C.H. Choi and J.A. Sauls, Phys. Rev. Lett. **66**, 484 (1991).
- [88] C.H. Choi and J.A. Sauls, Phys. Rev. B **48**, 13684 (1993).
- [89] K.A. Park and R. Joynt, Phys. Rev. Lett. **74**, 4734 (1995).
- [90] K.A. Park and R. Joynt, Phys. Rev. B **53**, 12346 (1996).
- [91] H. Tou, Y. Kitaoka, K. Asayama, N. Kimura, Y. Onuki, E. Yamamoto, and K. Maezawa, Phys. Rev. Lett. **77**, 1374 (1996).
- [92] H. Tou, Y. Kitaoka, K. Ishida, K. Asayama, N. Kimura, Y. Onuki, E. Yamamoto, Y. Haga, and K. Maezawa, Phys. Rev. Lett. **80**, 3129 (1998).
- [93] K. Machida and M. Ozaki, Phys. Rev. Lett. **66**, 3293 (1991).

- [94] T. Ohmi and K. Machida, Phys. Rev. Lett. **71**, 625 (1993).
- [95] J.A. Sauls, Adv. Phys. **43**, 113 (1994).
- [96] I. Luk'yanchuk, J. de Phys. **I1**, 1155 (1991).
- [97] N.H. van Dijk, A. de Visser, J.J.M. Franse, S. Holtmeier, L. Taillefer, and J. Flouquet, Phys. Rev. B **48**, 1299 (1993).
- [98] A. Garg and D.C. Chen, Phys. Rev. B **49**, 479 (1994).
- [99] M.J. Graf, S.-K. Yip, and J.A. Sauls, Phys. Rev. B **62**, 14393 (2000).
- [100] A. Huxley, P. Rodière, D.Mc.K. Paul, N. van Dijk, R. Cubitt, and J. Flouquet, Nature **406**, 160 (2000).
- [101] T. Champel and V.P. Mineev, Phys. Rev. Lett. **86**, 4903 (2001).
- [102] R.N. Kleiman, C. Broholm, G. Aeppli, E. Bucher; N. Stücheli, D.J. Bishop, K.N. Clausen, K. Mortensen, J.S. Pedersen, and B. Howard, Phys. Rev. Lett. **69**, 3120 (1992).
- [103] U. Yaron, P.L. Gammel, G.S. Boebinger, G. Aeppli, P. Schiffer, E. Bucher, D.J. Bishop, C. Broholm, and K. Mortensen, Phys. Rev. Lett. **78**, 3185 (1997).
- [104] R. Joynt, Phys. Rev. Lett. **78**, 3189 (1997).
- [105] B. Lussier, L. Taillefer, W.J.L. Buyers, T.E. Mason, and T. Petersen, Phys. Rev. B **54**, R6873 (1996).
- [106] M. Franz, I. Affleck, and M.H.S. Amin, Phys. Rev. Lett. **79**, 1555 (1997).
- [107] V.G. Kogan, M. Bullock, B. Harmon, P. Miranovic, Lj. Dobrosavljevic-Grujic, P.L. Gammel, and D.J. Bishop, Phys. Rev. B **55**, R8693 (1997).

- [108] V.G. Kogan, Phys. Lett. **85A**, 298 (1981).
- [109] Yu.N. Ovchinnikov, Zh. Éksp. Teor. Fiz. **119**, 1 (2001) [Sov. Phys. JETP **92**, 345 (2001)].
- [110] V.P. Mineev and T. Champel, Phys. Rev. Lett. **91**, 079701 (2003).
- [111] D.F. Agterberg and M.J.W. Dodgson, Phys. Rev. Lett. **89**, 017004 (2002).
- [112] paragraphe 144, *Statistical Physics*, L.D. Landau and E.M. Lifshitz (3rd Edition Part 1, Butterworth-Heinemann, Oxford, 2000).
- [113] D.F. Agterberg and M.J.W. Dodgson, Phys. Rev. Lett. **91**, 079702 (2003).
- [114] A.I. Larkin, Pis'ma Zh. Éksp. Teor. Fiz. **2**, 205 (1965) [JETP Lett. **2**, 130 (1965)].
- [115] A.A. Abrikosov and L.P. Gorkov, Zh. Éksp. Teor. Fiz. **39**, 1781 (1960) [Sov. Phys. JETP **12**, 1243 (1961)].
- [116] G. Yang and K. Maki, Europhys. Lett. **48**, 208 (1999).
- [117] K. Scharnberg and R.A. Klemm, Phys. Rev. B **22**, 5233 (1980).
- [118] M.E. Zhitomirskii, Pis'ma Zh. Éksp. Teor. Fiz. **49**, 333 (1989) [JETP Lett. **49**, 379 (1989)].
- [119] L.W. Gruenberg and L. Günther, Phys. Rev. **176**, 606 (1968).
- [120] L. Dworin, Ann. Phys. (N.Y.) **38**, 431 (1966).
- [121] I.S. Gradshtein and J.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, New York, 1980).

- [122] R.A. Klemm, A. Luther, and M.R. Beasley, Phys. Rev. B **12**, 877 (1975).
- [123] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, and I.E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Prentice Hall Inc., New Jersey, 1964).
- [124] E.M. Lifshitz and L.P. Pitaevskii, *Physical Kinetics* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1995)