



APPLICATIONS DE L'IDÉE DE RENORMALISATION EN PHYSIQUE DU SOLIDE

P. Nozières

► To cite this version:

P. Nozières. APPLICATIONS DE L'IDÉE DE RENORMALISATION EN PHYSIQUE DU SOLIDE. Journal de Physique Colloques, 1976, 37 (C1), pp.C1-271-C1-282. 10.1051/jphyscol:1976143 . jpa-00216471

HAL Id: jpa-00216471

<https://hal.science/jpa-00216471>

Submitted on 4 Feb 2008

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

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

APPLICATIONS DE L'IDÉE DE RENORMALISATION EN PHYSIQUE DU SOLIDE

P. NOZIÈRES

Institut Max von Laue-Paul Langevin, BP 156, 38042 Grenoble Cedex, France

Résumé. — L'application des méthodes de renormalisation à divers problèmes de physique des solides, comme l'effet Kondo, est analysée d'un point de vue résolument qualitatif. Le but poursuivi est de démontrer le mécanisme de la procédure de renormalisation, et de dégager un certain nombre de conclusions simples (universalité, approches phénoménologiques, etc...).

Abstract. — Renormalization methods in various solid state problems (e. g., the Kondo effect) are analyzed from a qualitative vantage point. Our goal is to show how the renormalization procedure works, and to uncover a few simple general ideas (universality, phenomenological descriptions, etc...).

1. Introduction. — Le groupe de renormalisation est à la mode. Ses succès sont spectaculaires, en particulier dans le domaine des transitions de phase — et pourtant, pour la majorité des observateurs (voire des utilisateurs), la situation théorique reste assez confuse. Les formulations sont tellement générales qu'on a parfois la désagréable impression de fabriquer des conclusions sans émettre d'hypothèse. Bien sûr, il n'en est rien — mais il est souvent difficile de préciser où se situent les hypothèses, si l'on a fait ou non des approximations.

La pluralité des langages — querelle des anciens et des modernes — n'aide pas à éclaircir la situation pour les non-spécialistes.

Cet exposé constitue une tentative de mise au point, très grossière, visant essentiellement à démontrer le mécanisme d'une procédure de renormalisation. Partant du *poor man's scaling* d'Anderson, on montre comment on peut le généraliser progressivement pour aboutir à une formulation du *scaling* qui est essentiellement celle de Wilson. L'exposé est strictement qualitatif, et le point de vue celui du piéton : savoir exactement où l'on met le pied à chaque étape, d'où on part et où on arrive. De cette analyse émergent quelques idées fondamentales simples, qui constituent la clef de toute la procédure de renormalisation. Il est important de les avoir présentes à l'esprit.

En principe, la discussion s'applique à tout problème possible d'une procédure de renormalisation. A part quelques commentaires sur la supraconductivité ou les métaux à une dimension, nous avons choisi d'illustrer l'idée de *scaling* sur un exemple relativement simple, la diffusion des électrons métalliques par une impureté, non magnétique (catastrophe infrarouge) ou magnétique (effet Kondo). C'est la méthode qui nous occupe plus que le problème : la description physique détaillée est réduite au minimum, d'autant qu'elle

sera développée dans une revue spéciale sur l'effet Kondo rédigée à l'occasion de LT 14 (ces deux mises au point seront complémentaires).

Pour le spécialiste, la manière utilisée ici pour introduire la procédure de renormalisation est très certainement maladroite, et inutilement compliquée. Il est certain que les formulations du style Gell Mann-Low, Bogoliubov-Shirkov ou Callan-Symanzik [1] sont infiniment plus compactes et élégantes. Elles permettent en particulier de construire le noyau de l'éq. (17) de façon beaucoup plus simple. En fait, il n'est pas facile de décider dans quelle mesure elles sont rigoureuses, ni surtout de discerner clairement quelle physique elles recèlent. Au contraire, l'approche utilisée ici est lourde peut-être, mais parfaitement concrète, chaque étape appelant la suivante. Il est ainsi plus facile de sentir *avec les mains* ce que signifie une opération de renormalisation.

Pour conclure cette analyse, et convaincre les incroyants, il faudrait établir un dictionnaire entre les deux approches, transcrire les équations de Callan Symanzik (qui tiennent un peu de la magie) dans le langage très prosaïque utilisé ici. (En particulier, il faudrait comprendre comment le formalisme de Callan Symanzik élimine toute référence aux variables *non pertinentes* qui pour nous jouent un rôle important.) Ce dictionnaire est souhaitable : nous ne le donnerons pas, faute de savoir le dresser.

2. L'idée qualitative de renormalisation. — Considérons un système physique, décrit par un Hamiltonien $\mathcal{H}$. L'idée de renormalisation consiste à éliminer un certain nombre de degrés de liberté (ou à tronquer l'espace des états possibles), $\mathcal{H}$ étant remplacé par un Hamiltonien effectif $\mathcal{H}^*$, censé décrire correctement les degrés de liberté qui restent. Si l'opération s'effectue de proche en proche, on engendre une famille d'Hamiltoniens

niens $\mathcal{H}^*$, physiquement équivalents, qui peuvent éventuellement tendre vers une limite simple : c'est l'idée de *scaling*.

Un tel processus est familier en physique des solides. En fait, tout le monde, comme M. Jourdain, fait de la renormalisation. Prenons par exemple les électrons de conduction d'un semiconducteur. Dénotons par l'indice c la bande de conduction, par n les autres bandes. L'Hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{cc} + \mathcal{H}_{cn} + \mathcal{H}_{nn}$$

(les trois termes de $\mathcal{H}$ incorporent tous les couplages possibles : phonons, champs extérieurs, etc...). L'évolution temporelle de la fonction d'onde est régie par l'opérateur résolvant

$$R(z) = \frac{1}{z - \mathcal{H}}.$$

Si l'on s'intéresse uniquement à la bande de conduction, il suffit de connaître R_{cc} , qui peut se mettre sous la forme

$$R_{cc} = \left[z - \mathcal{H}_{cc} - \mathcal{H}_{cn} \frac{1}{z - \mathcal{H}_{nn}} \mathcal{H}_{nc} \right]^{-1} = \frac{1}{z - \mathcal{H}^*} \quad (1)$$

(les excursions dans les bandes n interviennent comme une *self energie* pour les électrons de conduction). $\mathcal{H}^*$ est l'*Hamiltonien effectif* qui décrit l'espace de Hilbert réduit de la bande de conduction. (C'est ainsi qu'on définit la masse effective, le facteur de Landé effectif, etc...).

Cet exemple élémentaire a le mérite de dégager deux idées clef qui se retrouvent dans tous les problèmes de *scaling*.

(i) $\mathcal{H}^*$ dépend de z — c'est-à-dire est *retardé* dans le temps. Il fallait s'y attendre : les excursions dans les états éliminés *durent* un certain temps, et il faut bien que ce délai se retrouve quelque part.

(ii) Pendant une excursion dans les bandes n , l'électron peut avoir une histoire compliquée — par exemple émettre plusieurs phonons (Fig. 1). Dans le

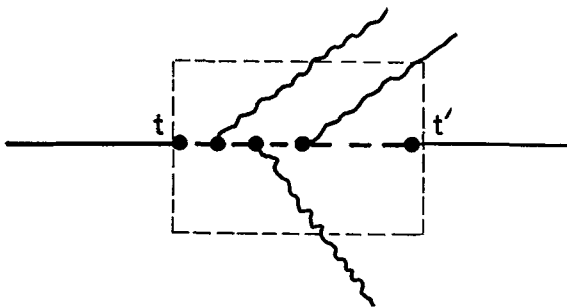


FIG. 1. — Un exemple d'Hamiltonien effectif pour les électrons d'un semi-conducteur. Le cadre pointillé constitue la *boîte noire* caractérisant $\mathcal{H}^*$, qui décrit ici une excursion dans les bandes n , caractérisées par une ligne pointillée. On note (i) la portée temporelle finie ($t' - t$) ; (ii) la formation de couplages d'ordre élevé (ici à trois phonons).

cadre d'un Hamiltonien renormalisé, cette excursion se traduit par une *boîte noire*, dont on ne veut connaître que ce qui sort : $\mathcal{H}^*$ comportera donc des termes décrivant l'émission simultanée de plusieurs phonons, même si au départ $\mathcal{H}$ ne contenait que des couplages à un seul phonon.

En résumé, un Hamiltonien renormalisé est nécessairement (i) *retardé* (ii) compliqué par l'apparition de couplages d'ordre quelconque.

Un cas plus intéressant est celui d'une interaction caractérisée par un certain *cut-off* D . La renormalisation consistera alors à réduire progressivement le *cut-off* — c'est-à-dire à éliminer une partie des états électroniques — construisant ainsi une famille d'Hamiltoniens $\mathcal{H}^*(D)$. La première application de ce type en physique des solides semble être celle d'Anderson et Morel [2] au problème de la supraconductivité. Rappelons brièvement le problème : deux électrons de moments et de spins opposés ont une matrice de diffu-

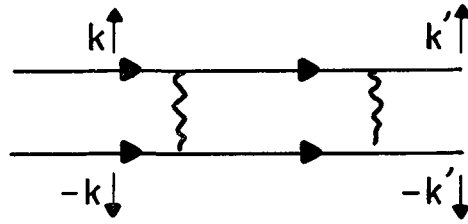


FIG. 2. — Diffusion multiple de deux particules.

sion décrite par les diagrammes de la figure 2. Nous prenons une interaction nue de la forme

$$V_{kk'} = \begin{cases} V & \text{si } |\varepsilon_k - \mu| < D, |\varepsilon_{k'} - \mu| < D \\ 0 & \text{autrement.} \end{cases} \quad (2)$$

A température T , la matrice t à fréquence $z = 2\mu$ est alors

$$t = \frac{V}{1 - V\Pi}$$

$$\Pi = \sum_k \frac{1 - 2n_k}{2\varepsilon_k} \sim \rho \log \frac{D}{T}$$

(n_k est la distribution de Fermi, ρ la densité d'états supposée constante). La température critique marquant l'apparition de la supraconductivité est celle pour laquelle t devient infini. On voit que t peut se mettre sous la forme

$$t = \frac{1}{V^{-1} - \rho \log D + \rho \log T}. \quad (3)$$

On peut donc remplacer D par un *cut-off* $D' < D$, à condition de remplacer aussi V par une interaction effective V' telle que

$$\frac{1}{V} - \rho \log D = \frac{1}{V'} - \rho \log D'. \quad (4)$$

En éliminant tous les états compris entre D' et D

(et $-D$, $-D'$), on a *renormalisé* l'interaction. On peut en particulier ramener au même endroit les *cut-off* de l'interaction par échange de phonons et de l'interaction de Coulomb. Cette dernière est ainsi remplacée par une interaction effective plus faible, favorisant la supraconductivité.

On note sur cet exemple le comportement *logarithmique* de t . Cette dépendance en D est caractéristique d'un comportement *marginal* au sens de Wilson, à la limite entre stabilité et instabilité. En pratique, c'est seulement dans ce cas que le programme de *scaling* a été appliqué en physique des solides. Jusqu'à présent, il s'est avéré rentable pour les problèmes *logarithmiques*, ceux où le *cut-off* intervient sous la forme $\log D$. Les applications sont nombreuses : diffusion des électrons métalliques par une impureté potentielle ou magnétique [3], gaz de fermions à une dimension [4], où l'instabilité supraconductrice se couple à une instabilité de densité de vecteur d'onde $2k_F$. Notre objet n'est pas d'être encyclopédique, mais plutôt de dégager les ingrédients essentiels des méthodes de *scaling* : nous limiterons donc notre discussion, très qualitative, au problème de la diffusion par une impureté.

Quelques remarques, cependant, avant d'abandonner le problème de la supraconductivité :

(i) Le processus de *scaling* s'arrête automatiquement si D devient de l'ordre de la température T (auquel cas, Π cesse d'être logarithmique). En pratique on réduira D jusqu'à T pour obtenir une théorie exempte de singularité.

(ii) La matrice t dépend de z . Si $\bar{z} = z - 2\mu \gg T$, Π devient égal à

$$\Pi = \sum_k \frac{1 - 2n_k}{2\varepsilon_k - z} \sim \frac{\rho}{2} \text{Log} \frac{D^2 - \bar{z}^2}{\bar{z}^2}.$$

La renormalisation de V et D décrite plus haut reste valable à condition de pouvoir négliger $\log \left[1 - \frac{\bar{z}^2}{D^2} \right]$: le *scaling* est donc une opération valable asymptotiquement lorsque $\bar{z} \rightarrow 0$ (sinon il faut tenir compte du caractère retardé de l'interaction effective).

(iii) D'après (4), il suffit de renormaliser l'interaction de deux électrons V pour tenir compte de la réduction du *cut-off*. Ceci n'est qu'une *approximation*, due au fait qu'on tient compte seulement des diagrammes en échelle. Si on incluait, par exemple, les diagrammes de la figure 3, il apparaîtrait des couplages à 3, 4, ... élec-

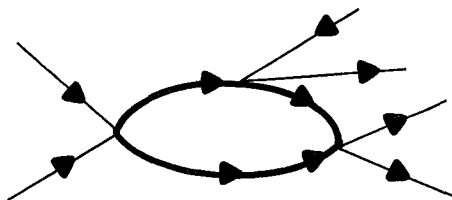


FIG. 3. — Un couplage effectif à 3 électrons. La ligne épaisse correspond à des états situés entre D' et D , qu'on élimine. Les lignes extérieures, minces, se trouvent entre $-D'$ et $+D'$.

trons, conformément aux remarques générales faites plus haut. Le *scaling* effectué par Anderson et Morel représente donc une version *tronquée* de l'Hamiltonien effectif $\mathcal{H}^*$.

Une fois encore, ces remarques sont très générales, et s'appliquent à tous les problèmes passibles d'une renormalisation.

3. La mécanique du scaling. — Dans cette section, nous nous proposons de démontrer sur un problème simple (la diffusion par une impureté) le mécanisme d'un processus de renormalisation. Nous ne ferons qu'ébaucher les calculs, notre objet étant surtout de dégager les grandes lignes qualitatives de la méthode (malheureusement souvent masquées par une algèbre complexe).

Considérons d'abord une impureté *non magnétique*, exerçant sur un gaz d'électrons libres un potentiel scalaire V d'élément de matrice donné par (2). Nous nous proposons d'étudier la matrice de diffusion électron-impureté au niveau de Fermi, $t(\mu)$ (dorénavant, nous prenons μ comme origine, et nous omettons de l'écrire). t est donné par l'ensemble des diagrammes contenant un nombre quelconque d'états intermédiaires de moments compris entre $-D$ et $+D$ (région S). Nous voulons construire un Hamiltonien effectif décrivant le domaine réduit S' compris entre $-D'$ et $+D'$. Pour ce faire, il nous faut isoler tous les *blocs*, si compliqués soient-ils, ne contenant que des lignes intérieures situées dans le domaine (S-S') qu'on élimine. Dans l'optique de la renormalisation, ces blocs seront consi-

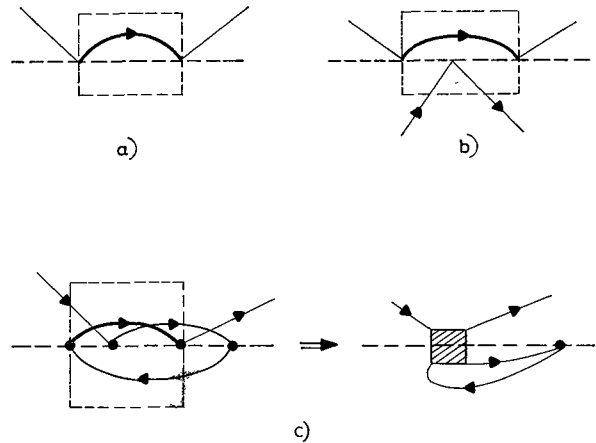


FIG. 4. — Construction de l'Hamiltonien effectif $\mathcal{H}(D')$. La ligne en tiret décrit l'impureté, les lignes grasses les états électroniques à éliminer (dans S-S'), les lignes fines les états à garder (dans S'). On peut construire des *blocs* ne faisant intervenir que des états (S-S'), correspondant à une interaction effective à un électron (cas a) ou à plusieurs électrons (cas b). Tout diagramme de t peut s'exprimer comme une combinaison de ces blocs, reliés par des propagateurs définis dans le domaine réduit S' (Fig. 4c).

dérés comme de nouvelles interactions de base, servant d'ingrédients au calcul de perturbation construit sur le domaine S' . La situation est illustrée sur la figure 4. Deux étapes donc :

(i) Construire une *série* d'interactions effectives en sommant tous les diagrammes ne contenant que des lignes de (S-S').

(ii) Construire t à l'aide des blocs ainsi définis, et de propagateurs définis dans S'.

Le programme de renormalisation est ainsi clairement défini. Nous y retrouvons les éléments essentiels mentionnés plus haut : (i) apparition de couplages d'ordre élevé, (ii) caractère retardé de $\mathcal{H}^*$ (les blocs qui le définissent ont une portée temporelle finie).

La situation est particulièrement simple si l'on varie D d'une quantité infinitésimale. En ce cas, les blocs définissant $\mathcal{H}^*$ ne peuvent contenir qu'une seule ligne interne, de manière à avoir une variation linéaire en $(D - D')$. L'Hamiltonien effectif obéit donc à une équation différentielle simple

$$\frac{\partial \mathcal{H}_n^*}{\partial D} = f_1[\mathcal{H}_n^*, D] \quad (5)$$

où f_1 est fait de tous les blocs ayant n lignes extérieures, une seule ligne interne, et des vertex de tous les types possibles $\mathcal{H}_n(D)$. Sous sa forme générale, (5) est exacte — inutile aussi parce que trop compacte.

Une possibilité est de supposer que l'Hamiltonien $\mathcal{H}^*$ ne contient qu'un potentiel à un corps V — autrement dit, on tronque l'espace des Hamiltoniens possibles. Ceci est une simplification arbitraire, à justifier (éventuellement) *a posteriori*. En ce cas, f_1 se réduit à un seul diagramme, schématisé sur la figure 5. Pour $T \ll D$, le propagateur électronique est de la forme

$$G(t' - t) = i e^{-iD(t' - t)} \text{sgn}(t' - t).$$

L'équation différentielle (5) prend la forme très simple

$$\frac{\partial V}{\partial D} = V^2 \rho \left[\frac{1}{D} - \frac{1}{D'} \right]. \quad (6)$$

Les deux termes du crochet de (6) viennent respectivement des deux diagrammes des figures 5a et 5b, qui ici se compensent exactement : nous concluons que la réduction de D ne renormalise pas une interaction scalaire V .

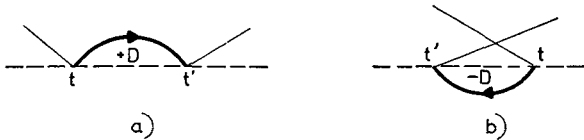


FIG. 5. — L'interaction effective pour une variation infinitésimale du cut off D . Nous supposons $D \gg T$, et nous décrivons les deux ordres temporels possibles : $t' > t$ (cut off de l'électron à $+D$) et $t' < t$ (cut off du trou à $-D$).

Supposons maintenant qu'on ait une impureté magnétique de spin S . A l'interaction scalaire V il faut ajouter une interaction d'échange

$$JS \cdot s_{\sigma\sigma'} C_{k\sigma}^* C_{k'\sigma'}$$

(s est la matrice de Pauli du spin électronique). Les deux diagrammes des figures 5a et 5b correspondent à des ordres différents des opérateurs S — et comme ceux-ci ne commutent pas, on n'obtient pas le même facteur de spin dans les deux cas. Un calcul élémentaire montre qu'il subsiste un résidu du type $J^2 S \cdot s$. La réduction de D se traduit donc par une renormalisation de J :

$$\frac{dJ}{dD} = -\rho \frac{J^2}{D} \quad (7)$$

(la diffusion potentielle V restant, elle, inchangée). Cette renormalisation provient de la *structure interne* de l'impureté (ici, son spin) : cette structure interne introduit un effet de mémoire entre deux collisions successives, responsable de la correction de J .

A l'ordre le plus bas, (7) s'intègre aisément

$$J = J_0 \left[1 - \rho J_0 \text{Log} \frac{D}{D_0} + \dots \right] \quad (8a)$$

(J_0 et D_0 sont les valeurs initiales, D le nouveau cut-off que l'on prend égal à la température T). (8) constitue la forme élémentaire de l'effet Kondo [5] : au-delà de l'approximation de Born, la diffusion d'échange présente des corrections *logarithmiques*. En particulier, pour $J_0 > 0$ (correspondant à un couplage antiferromagnétique des électrons avec l'impureté), le J effectif *augmente* lorsque la température décroît, conduisant (entre autre) à une augmentation de la section efficace de collision, c'est-à-dire de la résistivité lorsque $T \rightarrow 0$. Dans la pratique, les collisions avec les phonons augmentent avec T : la combinaison des deux effets conduit à un minimum de résistivité en fonction de T , manifestation expérimentale classique de l'effet Kondo.

Revenons à l'éq. (7). Nous voyons que pour une diffusion d'échange, le processus de *scaling*, même artificiellement tronqué, conduit à des résultats non triviaux. De fait, on peut intégrer (7) exactement sans faire de développement en J_0 : il vient ainsi

$$J = \frac{J_0}{1 - \rho J_0 \text{Log} (D_0/D)} \quad (8b)$$

(ici encore, D est réduit progressivement jusqu'à atteindre la température T). Le résultat (8) a été établi initialement par Abrikosov [6], à l'aide d'une sommation de diagrammes *parquets* pour le moins complexe. La démonstration que nous venons d'esquisser, beaucoup plus simple, constitue la *poor man's derivation* du *scaling*, due à Anderson [6]. Nous verrons plus loin que cette dérivation ne constitue en fait qu'une première approximation [7], valable seulement à température suffisamment élevée. D'après (8), deux cas sont à considérer :

(i) $J_0 < 0$ (couplage ferromagnétique) : le *scaling* réduit J qui tend vers 0 lorsque $T \rightarrow 0$.

(ii) $J_0 > 0$ (couplage antiferromagnétique) : le *sca-*

ling augmente J , qui diverge lorsque D atteint la *température* de Kondo :

$$T_K = D_0 \exp \left[-\frac{1}{\rho J_0} \right].$$

En pratique, il ne saurait exister de température de transition franche pour un système localisé comme une impureté : le résultat (8) ne peut être qu'approché. Lorsque J augmente, d'autres termes doivent entrer en jeu, qui saturent la divergence, et arrondissent la singularité à T_K .

Dans le langage qui est maintenant de mise, nous pouvons dire que le point $J = 0$ (pas d'interaction d'échange) est un *point fixe* de la procédure de renormalisation de D — c'est-à-dire que

$$\frac{dJ}{dD} = 0 \quad \text{si} \quad J = 0.$$

Ce point fixe est *stable* du côté $J < 0$ (le *scaling* conduit vers $J = 0$) ; il est *instable* du côté $J > 0$ (le *scaling* éloigne de $J = 0$).

Avant d'aborder les limitations et la généralisation de ce *poor man's scaling*, une digression sur un point important : la procédure de renormalisation n'est pas limitée à la constante de couplage elle-même. On peut l'appliquer à toute quantité physique intéressante, par exemple telle ou telle fonction de corrélation [8]. Un exemple parmi d'autres : la catastrophe infrarouge au seuil d'absorption X dans un métal. Le rayon X absorbé crée un trou profond au cœur d'un atome, qui agit comme un diffuseur *transitoire* pour les électrons de conduction. Les électrons proches du niveau de Fermi mettent longtemps à s'adapter à ce nouvel environnement — d'où une singularité de l'absorption au voisinage du seuil. Le coefficient d'absorption est proportionnel à la partie imaginaire de la fonction de corrélation $S(\omega)$ décrite sur la figure 6. Cette fonction

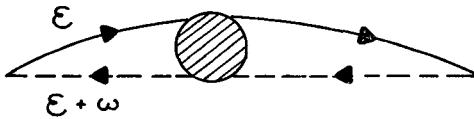


FIG. 6. — Les diagrammes déterminant la fonction de corrélation $S(\omega)$ dont la partie imaginaire est l'absorption X . La ligne en tiret correspond à l'impureté — ici le trou dans la couche profonde, la ligne pleine à un électron de conduction. Le noyau hachuré rend compte des interactions des électrons de conduction avec l'impureté transitoire.

de réponse dépend de D par l'intermédiaire de toutes les lignes internes du diagramme. Pour calculer $\partial S / \partial D$, il suffit de fixer l'une quelconque de ces lignes au bord de l'intervalle d'intégration, $\pm D$. Pour simplifier, ignorons l'existence de boucles fermées, et limitons-nous à la diffusion multiple de l'électron créé par le photon X sur l'impureté transitoire : le diagramme de la figure 6 ne comprend qu'une seule ligne connexe

allant de l'entrée à gauche à la sortie à droite. Quand on dérive par rapport à D , on fixe l'un des tronçons de cette ligne à $\pm D$, les diverses possibilités étant décrites sur la figure 7. En pratique, les deux diagrammes 7c se

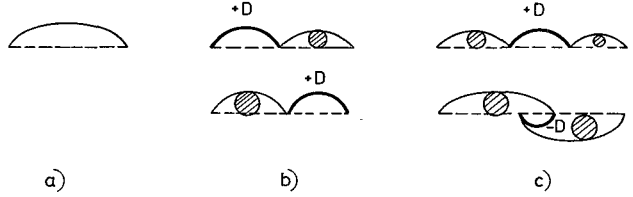


FIG. 7. — Les différentes contributions à $\partial S / \partial D$: l'une des lignes intérieures, dessinée en trait gras, est fixée au bord $\pm D$ de l'intervalle d'intégration.

compensent exactement, comme dans l'éq. 6. L'équation pour $S(\omega, D)$ se réduit donc à

$$\frac{\partial S}{\partial D} = \frac{1}{D} + 2 \rho V \frac{S}{D}. \quad (9)$$

Nous avons démontré précédemment que l'interaction V était indépendante de D pour une impureté non magnétique ; l'intégration de (9) est alors élémentaire :

$$S - \frac{1}{2 \rho V} \sim D^{2 \rho V}.$$

Comme par ailleurs S ne peut dépendre que de D/ω pour des raisons d'homogénéité, nous concluons que

$$S - \frac{1}{2 \rho V} \sim \left(\frac{D}{\omega} \right)^{2 \rho V}. \quad (10)$$

En prenant la partie imaginaire de S , nous trouvons la singularité infrarouge au seuil d'absorption $\omega = 0$, caractérisée par une loi en puissance dont l'exposant est égal ici à $2 \rho V$. En pratique, le problème est exactement soluble par une méthode directe [9] : on sait que l'exposant en question est $2 \delta / \pi$ où δ est le déphasage au niveau de Fermi, et non pas

$$2 \rho V = \frac{2 \operatorname{tg} \delta}{\pi}.$$

L'erreur ainsi commise est négligeable pour V faible. Elle devient importante en couplage fort : elle résulte alors des différentes approximations implicites dans (9) : version tronquée du processus de renormalisation, et surtout négligence totale du caractère *retardé* des différentes interactions effectives. Il est certain qu'un *scaling* exact exempt de ces simplifications abusives donnerait le bon exposant : à ce jour, un tel calcul n'existe pas, la *mise en œuvre* du *scaling* reste soumise à de telles simplifications.

Nous remarquons que l'exposant S dans (10) dépend du couplage initial V_0 : il *n'est pas universel*. Bien sûr, il faut tracer cette conclusion au fait que V n'est pas renormalisé. Si au contraire la réduction de D s'accompagnait d'une évolution de V , l'Hamiltonien $\mathcal{H}^*$ ten-

draient vers un *point fixe* lorsque $D \rightarrow 0$, indépendant de la valeur initiale du couplage. Les différentes quantités physiques dans cette limite seraient contrôlées par $\mathcal{H}^*$: le comportement serait universel, indépendant de V_0 . C'est ce qui se produit pour l'effet Kondo. La même situation se retrouve dans les métaux à une dimension : dans le modèle de Tomonaga [10] où l'on ignore les collisions faisant passer un électron d'un côté à l'autre de la surface de Fermi, la renormalisation laisse le couplage invariant : les diverses fonctions de corrélation ont des lois en puissances avec des exposants dépendant de l'interaction. Si l'on tient compte aussi des collisions à travers la surface de Fermi [4], [8], le couplage n'est plus invariant, et le comportement à basse température est universel (quoique toujours incertain pour l'instant).

Revenons maintenant à notre effet Kondo, et examinons en quoi l'éq. (7) d'Anderson et Yuval est insuffisante. A ce stade d'approximation, on n'a pas d'ennuis avec le caractère retardé de l'interaction : dans la figure 5, l'énergie z est conservée d'un vertex à l'autre, et on peut la prendre égale à μ partout : on a donc une équation fermée pour l'interaction J au niveau de Fermi. Il n'en serait plus de même pour des diagrammes plus compliqués, où la dépendance en z doit nécessairement intervenir au niveau des vertex *internes*. Ce caractère retardé de $\mathcal{H}^*$ va très certainement modifier les équations de *scaling*, d'une manière qui n'est pas facile à formuler [11]. Il est certain qu'asymptotiquement la procédure de renormalisation n'est correcte que pour $z \rightarrow 0$ — il n'en reste pas moins qu'on ne saurait ignorer les énergies internes en établissant les équations pour $\partial\mathcal{H}^*/\partial D$: cet aspect du problème reste peu clair.

Nous l'ignorons, faute de mieux, et nous tournons notre attention vers l'autre point faible, lié à l'apparition de couplages d'ordre supérieur. Un exemple typique est celui de la figure 4b : lors d'une variation infinitésimale de D , il apparaît au premier ordre en δD une interaction (impureté-deux électrons) d'amplitude $K \sim J^3$. La structure de spin (*spinologie*) de K est compliquée — et c'est encore pire aux ordres supérieurs. Notre objet étant seulement de dégager la nature qualitative du mécanisme qui régit $\mathcal{H}^*(D)$, nous nous contenterons d'une esquisse de calcul, essentiellement *dimensionnelle* : tous les termes de $\partial\mathcal{H}^*/\partial D$ sont à affecter de coefficients numériques que nous ne précisons pas, fonctions du problème étudié (ici le spin de l'impureté, etc...). Il convient donc, dans la discussion qui suit, de ne retenir que les conclusions *qualitatives*, surtout pas d'accorder aux diverses équations une validité précise que seul un calcul soigné pourrait leur conférer.

Limitons-nous pour l'instant aux interactions de l'impureté avec un ou deux électrons, J et K . La dérivée dK/dD est donnée par le diagramme de la figure 4b, ainsi que par ceux de la figure 8 (ce sont les seuls ayant *une seule* ligne interne). Notons qu'en représentation temps, le diagramme 4b contient un facteur $e^{-iD|t|}$ (le facteur $|t|$ supplémentaire vient de l'intégration

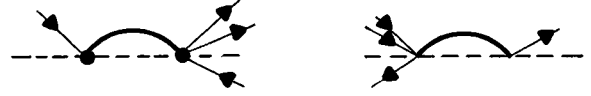


FIG. 8. — Deux diagrammes contribuant à la variation de l'interaction (impureté-deux électrons) lorsque $D \rightarrow D - dD$.

sur le vertex intermédiaire). En transformée de Fourier, on obtient ainsi $1/D^2$ au lieu de $1/D$. D'où l'équation schématique

$$\frac{\partial K}{\partial D} \sim -\frac{\rho J^3}{D^2} + 2\rho \frac{JK}{D}. \quad (11)$$

A (11) il faut associer l'équation pour $\partial J/\partial D$. Celle-ci contient un nouveau terme, correspondant au diagramme de la figure (9), terme qui apparaît dès que l'on fabrique un $K \neq 0$:

$$\frac{\partial J}{\partial D} \sim -\frac{\rho J^2}{D} + \rho K \quad (12)$$

(rappelons que pour une boucle Hartree-Fock fermée sur elle-même, $e^{iD(t'-t)}$ se réduit à 1). (11) et (12) fournissent deux équations couplées. Ces équations sont à résoudre avec les conditions aux limites $K = 0$, $J = J_0$ pour $D = D_0$. On en déduit les paramètres $J(D)$ et $K(D)$ de l'Hamiltonien effectif $\mathcal{H}^*$. Notons que cet Hamiltonien est toujours artificiellement *tronqué* — un peu moins cependant puisqu'on inclut aussi les vertex à deux électrons.

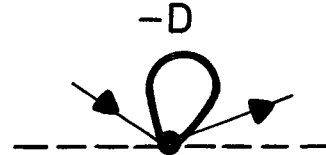


FIG. 9. — Un terme correctif contribuant à $\partial J/\partial D$.

En fait, on peut éliminer K et réduire (11) et (12) à une seule équation fermée pour $J(D)$. A cet effet, posons :

$$K = \bar{K}/D, \quad x = \text{Log}(D_0/D) > 0$$

(11) et (12) deviennent deux équations différentielles simples

$$-\frac{\partial \bar{K}}{\partial x} = -\rho J^3 + 2\rho J\bar{K} + \bar{K} = \psi(J, \bar{K}) \quad (13)$$

$$-\frac{\partial J}{\partial x} = -\rho J^2 + \rho \bar{K} = \varphi(J, \bar{K}). \quad (14)$$

Les conditions aux limites sont $\bar{K} = 0$, $J = J_0$ pour $x = 0$. Il est facile d'éliminer x et de construire une équation différentielle pour $\bar{K}(J)$

$$d\bar{K}/dJ = \psi/\varphi. \quad (15)$$

La solution explicite de (15) conduira à une expression $\bar{K}(J, J_0)$ paramétrée par la valeur initiale J_0 . Le point essentiel est maintenant le suivant : dès que $x \gg 1$, la dépendance en J_0 de $\bar{K}$ est négligeable. $\bar{K}$ devient ainsi une fonction d'une seule variable, $\bar{K}(J)$. Ceci se voit directement sur l'éq. (13) : x n'apparaissant pas explicitement, sa solution peut se mettre sous la forme

$$\bar{K}(x) = \int_0^x \lambda[t, J(x-t)] dt$$

où λ est un noyau non linéaire bien défini. La portée en t de ce noyau est déterminée par le terme $\bar{K}$ au deuxième membre de (13) : elle est d'ordre 1. Pour les grandes valeurs de x , $\bar{K}$ perd donc toute mémoire de la valeur initiale J_0 : celle-ci ne saurait intervenir dans la solution de (15). Dans la pratique, pour que ρJ reste ~ 1 lorsque $x \gg 1$, il faut que $\rho J_0 \ll 1$: dans la solution $\bar{K}(J, J_0)$, nous pouvons faire tendre J_0 vers 0, obtenant ainsi une solution $\bar{K}(J)$ indépendante des conditions initiales. Lorsque J est faible, on peut développer cette solution en puissances de J . Un coup d'œil à (13) montre que le développement démarre comme

$$\bar{K} = \rho J^3 + O(J^4). \quad (16)$$

La construction des termes suivants est beaucoup plus délicate. (De toute manière, ils n'ont pas grand intérêt, car $\bar{K}$ n'est important que si $\rho J \sim 1$, auquel cas le développement en J est sûrement mauvais.)

En reportant $\bar{K}$ dans (14), on construit une équation pour J

$$\frac{dJ}{dx} = F(J) = -\rho J^2 + \rho^2 J^3 + \dots \quad (17)$$

dont la version Anderson-Yuval (7) constitue la première approximation (développement de F à l'ordre le plus bas en J , $F \sim \rho J^2$). Nous verrons dans la section suivante comment exploiter une équation de *scaling* généralisée de ce type.

Il est clair que toute la discussion précédente peut s'étendre au cas général de l'interaction (impureté- n électrons), c'est-à-dire de l'Hamiltonien effectif $\mathcal{H}^*$ complet, *non tronqué*. La structure des calculs est la même (bien sûr, ils deviennent vite insortables dans la pratique). Dénotons par K_n le noyau à n électrons, et posons

$$K_n = \bar{K}_n / D^{n-1}.$$

Les équations différentielles (13) et (14) se généralisent en

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial x} &= \varphi(J, \bar{K}_m) \\ \frac{\partial \bar{K}_n}{\partial x} &= \psi_n(J, \bar{K}_m). \end{aligned} \quad (18)$$

En éliminant x , on obtient un jeu d'équations différentielles dont la solution est de la forme $\bar{K}_n(J, J_0)$. Comme précédemment, J_0 doit disparaître dès que $x \gg 1$, les équations pour $\bar{K}_n$ ayant toutes une mémoire

finie. $\bar{K}_m$ est donc fonction de J seulement ; en reportant dans (18), on obtient pour dJ/dx une équation fermée du style (17). Le noyau $F(J)$ est en principe déterminé *sans ambiguïté* et sans *approximation*. Sa construction est redoutable dès qu'on inclut des vertex d'ordre élevé : seuls les tout premiers termes d'un développement en puissances de J sont accessibles. Le point essentiel est (i) que le développement existe, (ii) qu'il est indépendant de J_0 dès que $x \gg 1$.

Pour conclure cette discussion un peu technique (que nous avons développée pour montrer *comment* on pouvait construire le noyau effectif $F(J)$), il est bon de faire le point, et de dégager un certain nombre d'idées simples qui forment la clef de toute la procédure de renormalisation.

(i) La réduction de D entraîne nécessairement l'apparition de couplages d'ordre élevé, K_n . Bien sûr, les équations pour $\bar{K}_n$ ont une *mémoire* finie en

$$x = \log \frac{D_0}{D};$$

c'est une manière prosaïque d'exprimer le fait que les variables $\bar{K}_n$ sont *non pertinentes* au sens de Wilson. Il n'en reste pas moins que ces couplages existent, forcés par J lui-même. Si J devient important, K_n l'est aussi. L'Hamiltonien effectif $\mathcal{H}^*(D)$ est donc par nécessité *compliqué*. En le tronquant arbitrairement comme dans la procédure d'Anderson-Yuval, on risque de fausser la physique du problème.

(ii) Dès que $x \gg 1$, la relation entre $\bar{K}_n$ et J est indépendante de x (et de J_0) : c'est la loi d'*universalité* établie par Wilson. Hormis quelques transitoires lorsque $x \sim 1$ (c.-à-d., $D \sim D_0$), l'Hamiltonien $\mathcal{H}^*$ décrit une *trajectoire* bien définie dans l'espace des J et des K_n .

(iii) La paramétrisation de cette trajectoire en fonction de x est régie par une équation *fermée* pour $J(x)$, du type

$$dJ/dx = F(J).$$

Le noyau F est indépendant de J_0 . L'évolution de J en fonction de x est donc universelle, elle aussi, à une *translation* en x près. De fait, le couplage J_0 n'intervient que pour fixer l'*origine de cette translation*, c'est-à-dire l'échelle de D (de température) sur laquelle se produit le phénomène étudié. Pour une impureté magnétique, cette échelle est la température de Kondo T_K , fonction de J_0 . T_K une fois défini, l'Hamiltonien $\mathcal{H}^*(D)$ est une fonction *universelle* de D/T_K . A noter que cette universalité ne peut se manifester que si les transitoires pour x petit sont bien morts dans la région intéressante, c'est-à-dire si $T_K \ll D_0$.

(iv) La construction pratique du noyau $F(J)$ se limite par nécessité à un développement en série, douteux dès que ρJ n'est plus faible.

(v) Ce type de comportement se retrouvera chaque fois qu'on aura affaire à une variable *marginale*, comme J dans l'effet Kondo.

4. Points fixes et stabilité (effet Kondo). — Revenons à l'éq. (17) régissant l'évolution de $J(x)$. Un *point fixe* correspond à un Hamiltonien stable lorsqu'on change le *cut-off* (c.-à-d. x) — autrement dit à un zéro de $F(J)$. (Il faut en outre que les autres couplages K_n soient eux aussi stationnaires.) Un point fixe J^* est *stable* si le *scaling* de D (x croissant) conduit vers J^* ; il est *instable* si au contraire on s'éloigne de J^* .

Nous avons vu que $F(J \sim \rho J^2)$: le système *sans interaction* ($J = 0$) correspond donc à un point fixe, une conclusion plutôt triviale. Ce qui est moins évident, c'est que ce point fixe est stable du côté $J < 0$ (couplage ferromagnétique), instable du côté $J > 0$ (couplage antiferromagnétique). Pour $J_0 < 0$, le *scaling* est sans histoire : le couplage effectif $|J|$ décroît lorsque T diminue ; il s'annule à $T = 0$. Au contraire, pour $J_0 > 0$, J augmente avec x : il s'arrêtera au premier point fixe rencontré sur la trajectoire, c'est-à-dire à la première racine positive de $F(J)$. Deux possibilités se présentent alors :

(i) F possède une racine finie J^* , près de laquelle $F = -\alpha(J - J^*)$ (la pente est négative puisque $F > 0$ entre 0 et J^*). Au voisinage du point fixe, la solution de (17) est immédiate, et conduit à

$$J - J^* \sim (D/D_0)^\alpha.$$

A basse température, J s'approche de J^* par une loi en puissance. Les diverses quantités physiques (susceptibilité, etc...) ont un comportement analogue. Cette possibilité a été explorée par Abrikosov et Migdal [3].

(ii) Il se peut aussi que F n'ait de racine que pour $J \rightarrow +\infty$: la renormalisation conduit alors à un couplage infini, une possibilité défendue par Anderson à l'aide d'arguments de plausibilité très convaincants.

De fait, c'est l'hypothèse (ii) qui s'avère être la bonne. Il est donc important d'examiner de plus près la limite du couplage fort, et d'en dégager les aspects physiques essentiels.

Pour ce faire, considérons d'abord un modèle simple, celui d'un cristal traité en liaisons fortes (une orbitale par site i). L'Hamiltonien du cristal pur est de la forme

$$\mathcal{H}_0 = T_{ij} C_i^* C_j$$

où l'intégrale de transfert est limitée aux plus proches voisins ; T_{ij} est de l'ordre de la largeur de bande, et joue ici le rôle du *cut-off* D . Dans ce cristal pur, nous introduisons une impureté substitutionnelle de spin $\frac{1}{2}$ au site 0, caractérisée par une énergie d'échange

$$NJS \cdot s_{\sigma\sigma'} C_{0\sigma}^* C_{0\sigma'}$$

(C_0^* crée un électron au site 0 ; nous admettons pour simplifier que les T_{ij} ne sont pas modifiés par l'impureté). Lorsque $J \rightarrow +\infty$, le site d'impureté piège un électron, qui forme avec le spin S un état singulet, d'énergie $-\frac{3}{4}NJ \rightarrow -\infty$. Le site 0 est alors interdit à tous les autres électrons (s'il en entrerait ou sortait un, on

casserait le singulet, ce qui coûterait une énergie infinie). Autrement dit, lorsque $J \rightarrow +\infty$, une impureté magnétique est équivalente à une impureté scalaire infiniment répulsive (un électron de conduction étant retiré du circuit).

Supposons maintenant J grand, mais fini. Le transfert du site 0 aux sites voisins peut se traiter en perturbation, un peu dans l'esprit de l'éq. (1). Les états c que l'on veut garder sont ceux où le site 0 est dans l'état singulet, les états n à éliminer sont ceux où le site 0 contient soit 0, soit 2 électrons, soit un seul électron formant avec l'impureté un état triplet. On définit ainsi un Hamiltonien effectif $\mathcal{H}^*$ sur le cristal *amputé du site 0*. Les corrections à $\mathcal{H}^*$ traduisent l'excitation *virtuelle* du singulet par les électrons voisins — en termes plus physiques, sa *polarisation* (voir discussion plus détaillée dans la section 5). $\mathcal{H}^*$ apparaît ainsi comme une série en D^{n+1}/J^n (les facteurs J provenant des dénominateurs d'énergie dus à la rupture du singulet dans les états intermédiaires). Les corrections à $\mathcal{H}^*$ sont de deux types :

(i) Un potentiel correctif sur les couches voisines de l'impureté, qui s'avère être d'ordre $1/J^2$ (le terme en $1/J$ disparaît par compensation entre les états excités à 0 et 2 électrons sur le site d'impureté).

(ii) Une *interaction* entre électrons sur les couches voisines, via la polarisation du singulet. On se convainc facilement qu'une telle interaction exige une excursion dans l'état triplet, et donne donc un terme $\sim D^4/J^3$. Lorsque $J \rightarrow \infty$, le terme d'interaction apparaît donc comme négligeable. Son existence souligne cependant les aspects essentiels du couplage fort :

— Le site d'impureté disparaît de l'Hamiltonien effectif (qui est construit sur l'espace de Hilbert *projeté* sur le plan orthogonal à C_0^*).

— Le prix payé pour cette simplification est l'apparition d'un mécanisme d'interaction entre électrons, alors qu'au départ on avait des électrons indépendants.

Revenons maintenant à notre problème initial, celui d'une interaction de *cut-off* D symétrique par rapport au niveau de Fermi

$$J_{kk'} = Ju_k u_{k'}$$

$$u_k = \theta |D - \varepsilon_k|.$$

Si $\rho J \gg 1$, on peut transposer sans grand problème le modèle de liaisons fortes que nous venons d'esquisser. Sans rentrer dans les détails, nous pouvons prévoir dès l'abord que le comportement ne sera *pas* universel, car il sera perturbé par les transitoires initiaux du *scaling*. Ce qui nous intéresse, en réalité, c'est l'approche universelle au point fixe quand on part de J petit, plus précisément le *voisinage* de ce point fixe sans référence particulière à l'endroit dont on est parti. Dans l'esprit de Wilson, une telle analyse se déroule en deux étapes : (i) identification du point fixe, (ii) recherche des variables dominantes dans son voisinage immédiat.

Dans le cas de l'effet Kondo, il est possible de répondre à ces questions. Nous ne ferons ici qu'esquisser les idées essentielles, renvoyant à la référence [17] pour une discussion plus approfondie. Le point fixe d'abord : il correspond à un Hamiltonien stationnaire dans l'opération de *scaling*, c'est-à-dire à un déphasage δ constant, égal à $\pi/2$, sur tout l'intervalle $(-D, +D)$. Il est évident que dans ces conditions δ est une fonction de ε_k/D invariante par réduction du *cut-off*. Une remarque importante : le point fixe ne correspond au couplage infini qu'au niveau de Fermi $\varepsilon_k = 0$. Ailleurs, il implique une interaction retardée, mais finie (essentielle si l'on veut éviter l'annulation de δ pour $\varepsilon_k = \pm D$). Le propagateur correspondant est

$$G_{kk'}^\infty = G_{k0} \delta_{kk'} - G_{k0} G_{k'0}/(i\pi\rho)$$

$G_{kk'}^\infty$ est l'ingrédient qui va servir à étudier le voisinage du point fixe.

Pour cette deuxième étape, nous utilisons les informations qualitatives obtenues dans le modèle des liaisons fortes : l'impureté est en fait verrouillée sous forme d'un singulet, avec un électron de fonction d'onde

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k u_k |k\rangle$$

(où $N = 2\rho D$ est le nombre d'états dans le domaine d'interaction.)

$\mathcal{H}^*$ est défini sur l'espace orthogonal à $|\psi_0\rangle$ (avec en contrepartie des termes d'interaction). Plutôt que d'opérer le *scaling* sur l'espace de Hilbert initial (ce qui ne serait pas viable avec un J très grand), il est beaucoup plus simple de le formuler directement sur l'espace réduit, exploitant la simplification de la cinématique en couplage fort.

Plus précisément, nous définissons une base complète d'états à un électron orthogonaux à $|\psi_0\rangle$,

$$|\psi_n\rangle \sim \sum_k P_n\left(\frac{k}{D}\right) |k\rangle$$

(P_n est le polynôme de Legendre d'ordre n). L'Hamiltonien $\mathcal{H}^*$ est construit sur les opérateurs C_n^* pour $n \geq 1$. Il contient des termes à 1 électron

$$\lambda_{nm} C_{n\sigma}^* C_{m\sigma}$$

et des termes d'interaction

$$U_{mnpq} C_{m\sigma}^* C_{n\sigma} C_{p\sigma'}^* C_{q\sigma'} + \dots$$

La procédure de *scaling* est construite directement sur les coefficients $\lambda_{nm}(D)$, $U_{mnpq}(D)$, de telle manière que les quantités physiques soient indépendantes du *cut-off* (en pratique, le déphasage δ , ou ce qui revient au même la matrice de diffusion $T_{kk'}(z)$ sur la couche d'énergie $z = \varepsilon_k = \varepsilon_{k'}$). La forme de l'Hamiltonien $\mathcal{H}^*$ est quelque peu simplifiée si l'on tient compte de la symétrie *électron-trou* du problème. Les termes dominants du *scaling* se trouvent alors être du type

($f_{1\sigma}^* f_{2\sigma} + \text{c. c.}$) (assurant une variation linéaire du déphasage en énergie), ou bien $(f_{1\uparrow}^* f_{1\uparrow} + f_{1\downarrow}^* f_{1\downarrow} - 1)^2$, traduisant une interaction entre électrons de spins antiparallèles. Ces corrections, qui varient toutes les deux en D , régissent l'approche vers le point fixe. Nous prévoyons que leur rapport est une constante universelle (contrairement au modèle de liaisons fortes où ce même rapport variait en $1/J$: ici encore, nous voyons comment l'universalité peut être masquée par les transitoires qui caractérisent le début du *scaling*).

De cette discussion volontairement très schématique, deux conclusions émergent :

(i) La limite $J = \infty$ est effectivement un point fixe (plus précisément, le point fixe correspond à un déphasage constant $\delta = \pi/2$).

(ii) Ce point fixe est *stable*. Les corrections à $\mathcal{H}^*$ diminuent lorsque $D \rightarrow 0$ (à la limite, elles se réduisent à une variation de δ en fonction de ε_k , et à une interaction entre électrons de spins opposés).

La leçon à retenir, c'est qu'il faut adapter la procédure de *scaling* au domaine dans lequel on travaille. La formulation utilisée pour $T \gg T_K$ (où l'on décrivait explicitement la dynamique du spin S) devient inopérante pour $T \ll T_K$; en ce cas il vaut mieux *changer de cinématique*, et travailler sur un espace des états réduit.

En conclusion, nous avons identifié deux points fixes : $J = 0$, instable lorsque $J > 0$, et $J = \infty$, stable. Admettons pour l'instant que lorsque le *scaling* est poursuivi jusqu'à $D = 0$, on atteint effectivement le point fixe $J = \infty$. L'évolution de $\mathcal{H}^*$ est alors *schématisée* sur la figure 10, où nous avons représenté

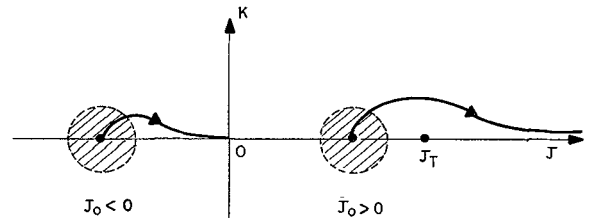


FIG. 10. — L'évolution de l'Hamiltonien effectif $\mathcal{H}^*$ lorsqu'on renormalise D de D_0 jusqu'à 0. J est l'interaction d'échange impureté-1 électron, K schématise tous les couplages d'ordre supérieur (à plusieurs électrons). Le comportement est différent selon qu'on part d'un couplage ferro ($J_0 < 0$) ou antiferro ($J_0 > 0$). Dans les deux cas, la région hachurée représente un transitoire initial dépendant explicitement de J_0 . J_T représente le cas particulier d'un Hamiltonien soluble, comme celui de Toulouse, qui malheureusement n'a aucune chance d'être situé sur la trajectoire de renormalisation.

l'ensemble des couplages supérieurs K_n (deux électrons ou plus), par une seule coordonnée K . Ce schéma met clairement en évidence les points essentiels du problème :

(i) Le comportement est différent selon que

$J_0 < 0$ ou > 0 . Dans le cas ferromagnétique, $J \rightarrow 0$. Si J_0 est lui-même faible, un développement en puissance de J (du type Anderson-Yuval) est partout valable. Dans le cas antiferromagnétique, J augmente au contraire indéfiniment.

(i) Près des points fixes, les couplages K sont négligeables (ce sont des variables non *pertinentes*). Malheureusement, on ne saurait les ignorer dans la région intermédiaire — où en fait ils contrôlent la forme du noyau $F(J)$. C'est là que pêche le *poor man's scaling* de Anderson et Yuval.

(iii) Au début de la renormalisation, on a un régime transitoire qui dépend explicitement du détail des conditions initiales (régime schématisé par la région hachurée de la figure 10). Ensuite, le comportement devient *universel*, J_0 intervenant seulement via une unité d'énergie $T_K \sim D_0 e^{-1/J\rho}$.

(iv) Dans le cas antiferromagnétique, le problème est simple si ρJ_0 est déjà $\gg 1$: J est toujours grand, et un développement de couplage fort est correct (la partie universelle est alors très réduite). Si au contraire $\rho J_0 \ll 1$, il existe toute une région intermédiaire où l'on passe du régime *couplage faible* au régime *couplage fort* : on dit qu'on a une *cross-over*. Dans la mesure où J_0 est petit, les transitoires sont morts, et ce *cross-over* est universel. Le *cross-over* correspond à la région $D \sim T_K$: on le traverse nécessairement quand on descend la température.

5. Par quel bout attaquer le problème du cross-over ?

— Supposons $0 < \rho J_0 \ll 1$. A haute température, le couplage effectif est petit. Un développement de perturbation en J est valable : c'est le calcul d'Anderson et Yuval. L'interaction effective $J(D)$ est donnée par (8) : on peut la mettre sous la forme :

$$\rho J = \frac{1}{\text{Log } D/T_K} \quad (19)$$

((19) est manifestement *universelle* : seul intervient le rapport D/T_K). (19) est correct tant que $\rho J \ll 1$ — c'est-à-dire si D est largement supérieur à T_K .

A basse température (D ou $T \ll T_K$), on entre en régime de couplage fort. Un traitement phénoménologique est possible (voir section 5). Pour en calculer les paramètres à l'aide des *données physiques* D_0 et J_0 , il faut *raccorder* les deux domaines limites, donc décrire d'une manière ou d'une autre la *région de cross-over*. Poursuivre le développement de $F(J)$ dans (17) est manifestement sans intérêt (remplacer une fonction par un polynôme n'a jamais été une bonne méthode pour trouver ses zéros). Il faut chercher ailleurs.

La première tentative pour régler ce problème est de nouveau due à Anderson, qui remarque que pour une certaine valeur $J = J_T > 0$, le problème est « soluble » : c'est la limite de Toulouse [13], où l'on établit un isomorphisme entre l'effet Kondo et un modèle d'état résonnant dans une bande d'électrons libres. Pourquoi ces guillemets ? Parce que l'isomorphisme n'est

qu'asymptotique, valable dans la limite des grands temps. (Dans la mesure où l'on somme une série de perturbation infinie, il n'est pas évident que des petites erreurs, accumulées à chaque ordre, ne puissent pas déformer beaucoup le résultat final). Ce point n'est pas clair : nous l'ignorons et nous admettons que la limite de Toulouse est effectivement un cas soluble. Une situation analogue se retrouve pour les métaux à une dimension : il existe une valeur particulière du couplage V_{2K_F} (collisions d'un côté à l'autre de la surface de Fermi), pour laquelle le problème physique est équivalent (asymptotiquement) à un problème de fermions soluble. Cette limite, découverte par Luther et Emery [14] est analogue à celle de Toulouse pour l'effet Kondo.

Si l'on poursuit la renormalisation en partant des hautes températures, J atteint J_T pour un *cut-off* D de l'ordre de quelques T_K . L'argumentation d'Anderson est alors très simple : *on s'arrête là*, et on calcule directement les propriétés physiques en partant du modèle isomorphe de Toulouse. Si J_T est suffisamment petit, on peut espérer que le développement d'Anderson-Yuval [7] est encore raisonnable lorsqu'on atteint la limite de Toulouse (sinon, on peut estimer l'erreur ainsi commise). On a ainsi une solution complète du problème, en deux étapes :

(i) Renormalisation de J_0 à J_T , dans une gamme où le développement de $F(J)$ est acceptable.

(ii) Solution explicite à partir de $J = J_T$.

A cette méthode très séduisante, on peut opposer deux objections :

— l'une relativement mineure : comme nous l'avons déjà dit, l'isomorphisme Kondo-Toulouse n'est qu'asymptotique, valable sur une échelle de temps $\gg D^{-1}$. Même si l'on croit à cet isomorphisme, il ne s'appliquera qu'à des températures $\ll T_K$;

— l'autre fondamentale : hélas, la trajectoire de $\mathcal{K}^*(D)$ lors de la renormalisation *ne passe pas par le point de Toulouse*. Celui-ci correspond à une interaction de l'impureté avec un électron seulement, donc au point J_T de la figure 10. Dans cette région intermédiaire, l'Hamiltonien $\mathcal{K}^*$ a développé des interactions d'ordre supérieur (qui ne disparaîtront que pour $J \rightarrow \infty$). La trajectoire de $\mathcal{K}^*(D)$ passe dans le plan (K, J) très au large du point J_T . D'un point de vue *strict*, celui-ci n'est donc d'aucune utilité pour décrire le *cross-over*, (sauf bien sûr si $J_0 = J_T$, auquel cas, il n'est pas besoin de renormaliser du tout !). A noter que J_T n'est pas un point fixe.

Ceci dit, l'approche d'Anderson, si elle est quantitativement inexacte, a un immense mérite, c'est d'être simple et physiquement transparente. Elle correspond à *tronquer* l'Hamiltonien effectif, en ne conservant que l'interaction J , c'est-à-dire à admettre que la trajectoire de la figure 10 passe près de J_T . Cette approximation est en fait *qualitativement* correcte, si bien qu'Anderson et Armytage [15] ont pu décrire de façon très satisfai-

sante le comportement d'un système Kondo à basse température, avec une économie de moyens très remarquable. Il convient cependant d'être conscient des approximations implicites dans cette approche : *stricto sensu*, rien n'est démontré.

Si l'on renonce à cet artifice d'un modèle soluble suffisamment proche de la trajectoire de $\mathcal{H}^*(D)$, toute approche analytique devient impossible. Seule reste la méthode de l'école de guerre : le calcul numérique. Encore faut-il avoir la stratégie et la tactique ! C'est là la performance tout à fait extraordinaire réalisée par Wilson [16]. Nous n'aborderons pas ici une description détaillée de son travail [17]. L'idée essentielle est de considérer une impureté entourée de n couches de voisins (autrement dit, un nodule métallique de rayon R avec l'impureté au centre), et d'étudier par récurrence pour n croissant les premiers états du système ainsi défini. Pour n petit, l'Hamiltonien peut être diagonalisé directement ; de là, on construit de proche en proche les états propres de $\mathcal{H}_{n+1}$, en tronquant de façon astucieuse les états de $\mathcal{H}_n$. Le *scaling* du *cut-off* D est remplacé par un *scaling* de la taille du cristal, c'est-à-dire de l'espacement des niveaux.

Lorsque n est petit, le comportement est non universel (on ne peut pas distinguer effets de surface et de volume). Dès que $n > 1$, on rentre en régime *universel* (les transitoires de surface sont morts). Si $\rho J_0 \ll 1$, on obtient ainsi un long plateau de couplage faible. Lorsque R atteint la longueur de cohérence v_F/T_K , on voit *numériquement* se développer un *cross-over* qui a toutes les caractéristiques décrites plus haut (universalité, dépendance en J_0 via T_K seulement). Pour $R \gg v_F/T_K$, les premiers états propres deviennent ceux d'un système $J = +\infty$: on a *démontré ainsi numériquement* que le *cross-over* conduit au point fixe $J = \infty$.

Bien sûr le calcul est compliqué, plein de simplifications plus ou moins justifiées. Il n'en est pas moins remarquable, car il constitue le premier exemple non perturbatif de description d'un *cross-over*. C'est un nouveau style de théorie qui est ainsi défini.

Dans la pratique, les résultats de Wilson apparaissent comme un paquet de niveaux d'énergie, difficile à utiliser pour obtenir des résultats physiques concrets. Dans la région intermédiaire, $T \sim T_K$, il n'y a rien à faire : il faut attaquer la difficulté de front. Dans la région $T \ll T_K$, par contre, on se rapproche d'un problème soluble (le couplage fort) : on doit pouvoir construire un hamiltonien *phénoménologique* $\mathcal{H}_{ph}$ dépendant d'un petit nombre de *paramètres*, ces quelques paramètres étant déterminés à partir des résultats numériques de Wilson. Connaissant $\mathcal{H}_{ph}$, on en déduit *directement* les quantités physiques intéressantes (chaleur spécifique, susceptibilité magnétique, résistivité, etc...), oubliant complètement le calcul de renormalisation. On a ainsi effectué le *raccordement* cherché entre les régions $T \ll T_K$ et $T \gg T_K$, et ce en deux étapes :

(i) construire une description phénoménologique

rendant compte correctement de la physique des régimes couplage fort ;

(ii) utiliser le calcul numérique de Wilson pour relier les paramètres de l'Hamiltonien correspondant $\mathcal{H}_{ph}$ aux données initiales à haute température, J_0 et D_0 .

Un tel programme est facile à réaliser pour l'effet Kondo [18]. Nous avons vu qu'en couplage fort ($J \gg D$), le site central était essentiellement verrouillé, formant avec un électron piégé un singulet de spin qu'on ne pouvait briser qu'au prix d'une énergie $\sim J$. A basse température, le site d'impureté est donc hors circuit, interdit aux électrons de conduction. Un prix à payer, cependant : le site d'impureté, s'il est inaccessible, reste virtuellement polarisable : d'où une correction de $\mathcal{H}^*$ sur les sites voisins, et surtout un mécanisme nouveau d'*interaction entre les électrons* : un électron polarise le singulet, et cette déformation est ressentie par un autre électron. La situation est très réminiscente de l'interaction par échange de phonons dans un cristal : un électron polarise le réseau, et cette déformation attire un autre électron (effet dit *matelas*). D'un problème d'impureté magnétique dans un gaz d'électrons indépendants, nous sommes passés à une impureté *non magnétique* dans un gaz d'électrons localement en interaction.

La formulation phénoménologique est simple, calquée sur la théorie de Landau des liquides de Fermi [18]. Le déphasage δ caractérisant la diffusion d'une quasi-particule sur le singulet est décrit comme une fonction $\delta(\varepsilon, n)$ de l'énergie ε (mesurée depuis μ) et de la distribution des autres quasi-particules (mesurée depuis l'état fondamental n_0). La dépendance en n traduit l'interaction entre les électrons. A basse température, on développe δ en série de $(\varepsilon - \mu)$ et de $(n - n_0)$, faisant ainsi apparaître un très petit nombre de paramètres numériques qu'on ajuste au calcul numérique de Wilson. Une fois δ déterminé, le calcul de la susceptibilité magnétique, de la chaleur spécifique et de la résistivité est facile.

En principe, un programme analogue pourrait être poursuivi dans le cas d'un gaz de fermions en interaction à une dimension. (De fait, les équations de renormalisation correspondantes ressemblent énormément à celles de l'effet Kondo.) Les étapes d'un tel calcul seraient les suivantes :

(i) Recherche des points fixes. En particulier, le couplage infiniment grand est-il un point fixe ? Si c'est le cas, quelles sont les propriétés du système en couplage fort (une étude préliminaire semble indiquer que le gaz d'électrons devient isolant, avec une bande interdite entre le fondamental et les premiers états excités).

(ii) Etude numérique du *cross-over* (à la Wilson), et détermination des paramètres phénoménologiques décrivant la limite basse température.

Cette étude reste à faire. Il est vraisemblable qu'elle conduira aux mêmes conclusions *qualitatives* que le

modèle *soluble* de Luther et Emery — tout comme le modèle de Toulouse reproduit correctement la physique de l'effet Kondo à $T \ll T_K$.

En ce qui concerne l'effet Kondo, nous n'avons fait qu'esquisser les grandes lignes de la méthode numérique de Wilson, et de l'exploitation phénoménologique qu'on peut en faire à basse température. Nous renvoyons le lecteur à la référence [17] pour une discussion plus détaillée de cet aspect du problème. Nous n'en retirerons pour conclure que deux idées simples :

(i) Pour décrire une région de *cross-over*, les méthodes perturbatrices sont sans intérêt. La seule approche indiscutable est l'approche numérique du style Wilson. Qualitativement, on peut tronquer la renormalisation

pour la faire déboucher sur un modèle soluble : on gagne en simplicité ce qu'on perd en rigueur.

(ii) Il serait maladroit d'utiliser une solution numérique lorsque le *cross-over* est terminé. Il vaut mieux alors construire une formulation phénoménologique indépendante, fondée sur un modèle physique différent de celui valable pour $T \gg T_K$. Les deux cas limites sont d'habitude simples. Le problème est de les *raccorder* : c'est là qu'intervient le calcul numérique. Bien sûr, dans la région intermédiaire $T \sim T_K$, tout est compliqué : on n'échappe pas à l'ordinateur.

Tout compte fait, une conclusion émerge : les théories compliquées débouchent parfois sur des idées physiques simples.

Bibliographie

- [1] Développée en particulier par BREZIN, E., ZINN JUSTIN, J. et LE GUILLOU, J. C., *Phys. Rev. D* **8** (1973) 434 et 2418.
- [2] ANDERSON, P. W. et MOREL, P., *Phys. Rev.* **123** (1961) 1911.
- [3] ZAWADOWSKI, A. et FOWLER, M., *Solid State Commun.* **9** (1971) 471.
ABRIKOSOV, A. et MIGDAL, A. A., *J. Low Temp. Phys.* **3** (1970) 519.
- [4] MENYHARD, N. et SOLYOM, J., *J. Low Temp. Phys.* **12** (1973) 529.
FUKUYAMA, H., RICE, T. M., VARMA, C. M., HALPERIN, B. I., *Phys. Rev. B* **10** (1974) 3775.
- [5] KONDO, J., *Solid State Phys.* **23** (1969) 183.
- [6] ANDERSON, P. W., *J. Phys. C* **3** (1970) 2346.
L'application du *scaling* à l'effet Kondo, est faite à l'origine par ANDERSON, P. W., YUVAL, G. et HAMANN, D. R., dans un contexte mathématique plus compliqué, *J. Phys. C* **4** (1971) 607, *Phys. Rev. B* **1** (1970) 1522 et 4664.
- [7] La même conclusion se retrouve chez SOLYOM, J. et ZAWADOWSKI, A., *J. Phys. F* **4** (1974) 80.
- [8] Voir par exemple la discussion de SOLYOM, J., pour les systèmes à une dimension, *J. Low Temp. Phys.* **12** (1973) 547.
- [9] NOZIÈRES, P. et DE DOMINICIS, C. T., *Phys. Rev.* **178** (1969) 1097.
- [10] THEUMANN, A., *J. Math. Phys.* **8** (1967) 2460.
DZYALOSHINSKI, I. et LARKIN, A., *Sov. Phys. JETP* **38** (1974) 202.
PESCHEL, I. et LUTHER, A., *Phys. Rev. B* **9** (1974) 2911.
- [11] Un effort dans cette direction est celui de ABRAHAMS, A. et TSUNETO, T., pour traiter les phénomènes critiques dynamiques.
- [12] Voir par exemple WILSON, K. G., *Rev. Mod. Phys.* (sous presse), chapitre V, où une discussion équivalente est formulée dans un langage beaucoup plus général.
- [13] TOULOUSE, G., *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci.* **268** (1969) 1200.
- [14] LUTHER, A. et EMERY, V., *Phys. Rev. Lett.* **33** (1974) 589.
- [15] ARMYTAGE, J., Thèse de Doctorat, Cambridge (non publié).
- [16] WILSON, K. G., *Collective properties of Physical Systems*, Nobel Symposium 24 (Academic Press) 1974.
- [17] Voir une discussion plus détaillée du même auteur, *Proceedings of the 14th Low Temperature Physics Conference*, à paraître.
- [18] NOZIÈRES, P., *J. Low Temp. Phys.* **17** (1974) 31.