

UNIVERSITÉ PARIS SUD

CAMPUS UNIVERSITAIRE D'ORSAY

FACULTÉ DES SCIENCES

91405 ORSAY

Mémoire d'Habilitation à diriger les recherches

spécialité : sciences physiques

NOUVEAUX RÉSULTATS DANS LES SYSTÈMES ÉLECTRONIQUES
DE TRÈS BASSE DIMENSION

G. Abramovici

soutenu le 19 mars 2014
devant le jury composé de

- S. Capponi
- B. Douçot
- T. Giamarchi
- E. Orignac
- C. Pasquier

Rapporteurs :

- C. Bourbonnais
- S. Capponi
- E. Orignac

Table des matières

Déontologie scientifique	7
A De la lisibilité de la littérature scientifique	11
1 Les pratiques des chercheurs	11
2 La culture du secret	14
B De la validation des travaux scientifiques	17
1 La non-traçabilité des calculs	17
2 Les limites des procédures de validation des travaux scientifiques . .	19
3 Absence d'appareil critique	19
C De la communication en sciences	25
1 La communication scientifique	25
2 La culture scientifique	32
I Supraconductivité dans les sels de Bechgaard	35
A Rappels historiques et théoriques	37
1 Les matériaux supraconducteurs non conventionnels	37
2 Approches théoriques	39
3 Échelle fermionique	43
B Renormalisation fonctionnelle pour une échelle fermionique	47
1 Groupe de renormalisation	47
2 Renormalisation de la surface de Fermi	77
C Magnétisme et supraconductivité	83
1 Contexte expérimental	83
2 Méthode de Bogoliubov	87
3 Méthode de Gor'kov à deux paramètres d'ordre	91
D Perspectives	103
1 Étude théorique des Ondes de Densité dans le chrome	103
2 Phase de coexistence supraconductrice	108

II	Barrière de Coulomb à une dimension	111
A	Généralités	113
1	Introduction	113
2	Notions préalables	113
B	Historique	117
1	Article de Loudon	117
2	Article de Haines et Roberts	119
3	Article de Andrews	119
4	Article de Gesztesy	120
5	Article de Gordeyev	121
6	Article de Mineev	123
7	Article de Oliveira et Verri	123
C	Solution du problème de Coulomb 1d	125
1	Équation aux valeurs propres	125
2	Inpénétrabilité	128
3	Imperméabilité	132
4	Généralisation de la relation de fermeture	134
5	Analyse locale versus analyse globale	141
D	Conséquences et perspectives	143
1	Expériences	143
2	Généralisation à trois dimensions	143
3	Problème de Coulomb sur un cylindre	144
4	Autres perspectives	146
	Bibliographie ordonnée par citation	146
	Bibliographie alphabétique	158
	Annexe : articles principaux	170
	Liste des articles	173

À l'origine de ma carrière

Bien que j'ai changé à de nombreuses reprises de domaine de recherche, un regard rapide sur l'ensemble de ma carrière percevra une certaine continuité : je me suis presque toujours intéressé à des systèmes de très basse dimension, quasi-unidimensionnels souvent, voire, très récemment, strictement unidimensionnel.

C'est, en partie, fortuit ; ma première passion, en physique, a toujours été vers ses aspects statistiques : l'émergence de lois macroscopiques dans les systèmes à grand nombre de corps ; c'est donc assez naturellement que je suis arrivé à la physique des solides, mère de nombreux systèmes à N -corps plus passionnants les uns que les autres, et régulièrement source de physique nouvelle hors des connaissances établies.

Ensuite, serait-ce une compétence un peu plus affirmée en mathématiques, qui m'aura guidé vers ces systèmes quasi-unidimensionnels, où une partie des résultats sont démontrables analytiquement ? je crois aussi au hasard : ma rencontre avec Serge Aubry.

Pendant mes études, j'ai appris les principes de la démarche scientifique, selon Popper [1] et Kuhn [2]. La déontologie scientifique est basée essentiellement sur la vérification expérimentale (en comparant ou en reproduisant des expériences) et sur l'interprétation théorique de ces expériences.

Ceci requiert une nécessaire transparence dans la publication des résultats (aussi bien expérimentaux que théoriques) et explique l'atmosphère de liberté que j'ai immédiatement ressentie, venant d'un milieu plus littéraire, lors de mon stage de D.E.A. chez Martine Hennion, au Laboratoire Léon Brillouin (C.E.A., C.E.N. Saclay).

Pourtant, dès ma première année de thèse, j'ai découvert de nombreux usages en contradiction avec cet objectif de transparence. J'ai déposé, pour les lecteurs, certaines de mes réflexions à ce sujet sur ma page personnelle :

<https://www.equipes.lps.u-psud.fr/theorie/abramovici/page-personnelle>

Remerciements

Je tiens à remercier les personnes sans lesquelles, par leur conseil, leur aide, leurs contributions, je n'aurais pu mener mes recherches et les présenter dans ce mémoire : M. Héritier, C. Nickel, S. Haddad, B. Douçot, N. Dupuis, T. Masson, P. Kalugin, Y. Avishai, D. Le Bolloc'h, S. Guéron, S. Capponi, E. Orignac, C. Bourbonnais et D. Chandèsris.

Déontologie scientifique

Un idéal de transparence

Pendant mes études, j'ai appris les principes de la démarche scientifique, selon Popper [1] et Kuhn [2]. La déontologie scientifique est basée essentiellement sur la vérification expérimentale (en comparant ou en reproduisant des expériences) et sur l'interprétation théorique de ces expériences.

Ceci requiert une nécessaire transparence dans la publication des résultats (aussi bien expérimentaux que théoriques) et explique l'atmosphère de liberté que j'ai immédiatement ressentie, venant d'un milieu plus littéraire, lors de mon stage de D.E.A. chez Martine Hennion, au Laboratoire Léon Brillouin (C.E.A., C.E.N. Saclay).

Pourtant, dès ma première année de thèse, j'ai découvert de nombreux usages en contradiction avec cet objectif de transparence. Je voudrais raconter quelques unes de ces pratiques auxquelles j'ai été ainsi confronté au long de ces années.

Je vais rassembler ces histoires autour de trois thèmes, qui se recouvrent partiellement : opacité et transparence dans la littérature scientifique ; les mécanismes de vérification des publications ; enfin les rapports entre science et communication.

A De la lisibilité de la littérature scientifique

1 Les pratiques des chercheurs

Une des choses qui m’a séduite dans le travail de Serge Aubry, c’est que les calculs étaient intégralement¹ publiés [3].

C’est rare dans la littérature de physique théorique. La plupart des travaux théoriques publiés récemment ne dévoilent qu’une partie des calculs y afférents.

a Des textes incomplets

Certains auteurs désirent éviter les redites ou les détails fastidieux. Le lecteur est implicitement renvoyé à des travaux de référence. Cela peut rendre la lecture de leurs articles très pénible ; par exemple, pour bien comprendre l’utilisation du temps imaginaire de Matsubara, il n’est guère d’autres ressources que de lire les publications de Matsubara [4] ou de cette époque (les années cinquante) ou de se le faire expliquer.²

J’ai été personnellement confronté à cet usage, pour le premier article [7] que j’ai publié après avoir quitté l’équipe de Serge Aubry, fraîchement embauché dans celle de Maurice Kléman. Cet article a connu de nombreuses aventures, mais je n’en citerai qu’une ici : lors de sa soumission, j’ai été contacté directement par M. Duneau, qui était rapporteur de l’article.³

« *C’est beaucoup trop difficile, et ton texte est trop long.* » m’a-t-il dit en substance. J’ai été amené à supprimer finalement la démonstration (parce qu’elle utilisait des théories de groupe fini) et à étoffer les explications géométriques, plus intuitives mais moins rigoureuses.

Cet exemple n’est pas très significatif, dans la mesure où mes résultats ne constituaient pas un apport majeur à la science ; je reste pourtant amer à l’idée de cette démonstration désormais enfouie dans mes archives et donc perdue.

Il dénote bien, cependant, que, pour un théoricien aussi rigoureux et précis que M. Duneau, il va de soi qu’on peut (voire qu’on doit) publier un résultat incomplet. C’est, il me semble, une chose admise de façon quasi universelle par la communauté.

1. C’est à dire qu’ils sont écrits *ex nihilo* à part un bagage mathématique minimal.
2. On peut également consulter les références [5, 6] qui sont très complètes à ce sujet.
3. Quoique le rapporteur soit habituellement anonyme, j’ai beaucoup apprécié cette opportunité malheureusement unique de retravailler un article ensemble, d’autant plus que la réputation et la valeur de M. Duneau étaient excellentes.

J'en ai rencontré un autre exemple, récemment : dans l'épais article [8] sur la barrière coulombienne à une dimension, lors de l'étude de la transmission, on calcule la matrice $S = \begin{pmatrix} r & t \\ t & r \end{pmatrix}$. Or, il faut, pour les calculs intermédiaires, distinguer les coefficients de réflexion r_R et r_L (définis pour une onde venant, respectivement, de $+\infty$ et $-\infty$), et de même les coefficients de transmission t_R et t_L . En particulier, la matrice S s'écrit alors $S = \begin{pmatrix} r_R & t_R \\ t_L & r_L \end{pmatrix}$. Cette expression ne se trouve pas dans les livres de base, je l'ai redémontrée en suivant la référence [9]. Mais mon co-auteur a préféré omettre cette précision, bien que je la trouvais utile à la compréhension des calculs.

Plus préoccupantes à mes yeux sont les pratiques suivantes, qui rendent certains sujets opaques.

b Les omissions volontaires

J'ai fait à partir de 2001 des calculs de groupe de renormalisation. Il s'agit d'une méthode maintenant relativement ancienne, élaborée et vulgarisée en matière condensée, en particulier par Wilson [10, 11] dans les années cinquante.

Dans ses développements les plus modernes, elle est l'apanage d'un très petit nombre de théoriciens, tant elle nécessite de calculs complexes et intriqués, souvent fastidieux et lourds à mener dans leur réalisation concrète.

C'est J. C. Nickel, qui préparait alors sa thèse sous la direction de M. Héritier, qui m'y a initié. Or, j'ai constaté que la difficulté du sujet et l'appréhension qu'il peut susciter sont amplifiées par une certaine opacité, qui existe à plusieurs niveaux, en particulier dans les publications spécialisées.

Je vais en donner trois exemples.

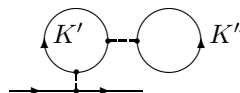
α Les diagrammes tripodes

Parmi les difficultés de ces méthodes, il y a une subtilité qui n'est pas souvent citée (à titre de contre-exemple, voir [12]) : pour calculer le développement diagrammatique des susceptibilités, il faut préalablement calculer celui de diagrammes tripodes $\overset{p}{\swarrow} \overset{q}{\leftarrow} \overset{q-p}{\searrow}$ (parfois notés z) ou analogues. Le calcul de leur développement ne présente pas de difficulté particulière, mais l'absence même d'une référence claire à ces objets, que l'on peut caractériser par l'absence d'une notation conventionnelle, que ce soit en français ou en anglais, participe de ce mystère.

β Calcul à température finie ou nulle

Coexistent dans les diverses publications des calculs dits à température nulle, qui utilisent explicitement le temps de Matsubara, et des calculs dits à température non nulle T . On examinera plus tard de façon approfondie l'anomalie connue que l'on observe quand on compare ces deux méthodes : dans un cas précis, la limite quand $T \rightarrow 0$ obtenue par la seconde méthode ne coïncide pas avec la valeur obtenue par la première.⁴ Or, je n'ai trouvé dans la littérature aucune déontologie précise, aucun

4. Il s'agit du calcul du terme, généralement trivial,



appareil critique, aucune analyse concernant le choix entre ces deux méthodes, alors même que c'est une questions préoccupante.

γ Le manuscrit de thèse de C. Honerkamp

C. Honerkamp a travaillé dans l'équipe de M. Salmhofer. Ce groupe allemand a énormément progressé sur les techniques du groupe de renormalisation : deux schémas ont été développés, celui dit de l'ordre de Wick et celui dit à une particule irréductible.⁵

La thèse de Honerkamp [16] est une contribution majeure à ces travaux. La base et les prémices du schéma de renormalisation à une particule irréductible y sont présentés de façon détaillée, mais l'essentiel de la thèse porte sur les propriétés et les difficultés ; les calculs fondamentaux n'y sont qu'ébauchés, souvent de façon éclatée ; il est impossible de les reprendre et de les analyser *in extenso* ; cette thèse garde tous ses secrets.⁶

c L'écriture ésotérique

La spécialisation est inévitable et nécessaire dans tous les domaines de la physique ; non seulement, un séminaire doit être adapté à un public donné, mais il est rare qu'un article publié dans une revue scientifique spécialisée soit lisible par tout public ; il est nécessaire que le lecteur ait acquis une certaine maîtrise du langage scientifique utilisé dans l'article.

Tout est donc affaire de mesure. Les usages sont par eux-mêmes déplorables. Par exemple, la lettre z désigne souvent le facteur d'échelle des fonctions d'onde, dans les calculs de renormalisation ; mais, pas seulement, puisqu'elle désigne parfois les diagrammes tripodes que j'ai déjà mentionnés.

Ceci étant admis, il n'en reste pas moins que certains auteurs abusent de notations mal définies ; par exemple, ils ne rappellent pas les définitions d'articles anciens ; ils ne précisent plus certaines hypothèses, pourtant restrictives ; certains utilisent des sigles non explicités (quoique cet abus soit plus rare, on peut citer le nom des phases supraconductrices, comme $C1S0$, qui n'est pas universel), chaque auteur s'inscrit dans une École, un système de notation, sans expliciter sa référence ; bref, cet ésotérisme parfaitement maîtrisé concourt à rendre certaines publications encore moins abordables qu'elles ne le seraient naturellement.

Autre exemple : on ne peut reprocher aux publications de Gallavotti & Benfatto [19] d'être incomplètes ; pourtant, elles sont d'un abord particulièrement difficile, et, à dire vrai, ne sont comprises que par un petit groupe de physiciens-mathématiciens, tant elles sont écrites dans un langage mathématique très peu abordable.

d La non-originalité des publications

Un autre travers, partagé par l'ensemble des auteurs scientifiques, est l'abus d'auto-citations ; cela consiste à publier plusieurs fois le même résultat. S'il s'agit des prémices théoriques, la question se pose souvent de les répéter ou non pour

5. Cette méthode a été notamment développée par Schulz & Zanchi [13,14] et Salmhofer [15] ; j'y reviendrai plus loin.

6. On peut consulter plutôt [17] ou la thèse de Halboth [18], autre étudiant dirigé par Salmhofer, qui traite du schéma de l'ordre de Wick et est un vrai bijou.

améliorer la lisibilité de l'article.⁷

Certains auteurs se livrent à de véritables plagiats, à la façon du compositeur Rossini qui n'hésitait pas à étoffer ses œuvres de mélodies tirées des précédentes. Par exemple, l'article de Fabrizio [20], sur lequel nous nous sommes appuyé pour nos calculs (et notamment les notations) dans le domaine de la supraconductivité [21, 22], reprenait intégralement une première lettre [23].

e Les bibliographies incomplètes

Quand on analyse les références de nombreuses publications, on constate que leurs auteurs citent volontiers les travaux des autres collaborateurs, présents ou passés, mais avec parcimonie ceux des équipes concurrentes, souvent étrangères, se contentant de quelques articles pionniers incontournables.

Cette pratique s'inscrit dans une problématique plus générale : elle relève d'un communautarisme parfois très marqué, que je voudrais décrire maintenant.

2 La culture du secret

L'opacité, qu'on observe dans les publications, participe d'une pratique, plus ou moins assumée, du secret. Dans certains cas, cette pratique se justifie.

a Le communautarisme

Souvent, un groupe d'initiés se partage la connaissance complète des outils et des pratiques propres à une méthode scientifique originale. Cela vient parfois du souci d'épargner aux chercheurs, lors des communications ou dans les articles publiés, l'ensemble des détails vraiment fastidieux et techniques de ces travaux.⁸

Cette question s'inscrit dans un contexte de compétition scientifique internationale, mais peut surprendre : les scientifiques ont une large pratique de la diffusion et de la communication au delà des frontières ; les débats publics d'avant-guerre entre l'École de Copenhague et A. Einstein le prouvent.

On peut comparer deux attitudes : l'équipe allemande que j'ai déjà citée, héritière du groupe de T. M. Rice, a une production d'une qualité exceptionnelle, qui lui assure une prédominance indiscutable. L'opacité de certains travaux n'en apparaît que plus injustifiée. À l'inverse, les travaux de Aubry ont été largement copiés, notamment par certaines équipes chinoises [24]. En définitive, sa paternité lui a toujours été reconnue.

7. Se repose la question de publier l'intégralité des calculs, cf. la section a.

8. En définitive, il suffit de rencontrer ou de connaître un chercheur de cette communauté pour acquérir ces connaissances, il n'y a pas de sectarisme. J. C. Nickel m'a raconté avoir été formé au groupe de renormalisation par C. J. Halboth et B. Bintz, deux étudiants du groupe de M. Salmhofer.

b La confidentialité

α La pratique dans les groupes expérimentaux

Le secret est également très pratiqué par les groupes expérimentaux, qui veulent protéger aussi longtemps que possible la primauté et l'originalité de leurs découvertes. Cela est justifié quand un dispositif a des applications industrielles potentielles : dans ce cas, l'équipe déposera un brevet, qui officialise la confidentialité de leur travail.

β Les logiciels "boîte noire"

Plus étonnant peut-être, j'ai été également confronté à une stricte exigence de confidentialité lors d'un travail effectué au Canada ; l'équipe de L. Lewis utilisait le logiciel VASP, écrit par l'équipe des professeurs Hafner et Kresse à Vienne ; or, le code source avait été transmis au professeur Lewis avec, entre autres, une clause de stricte confidentialité.

On est dans ce cas-ci très proche du secret industriel, donc du brevet. L'équipe de Vienne a cependant choisi une voie intermédiaire, en tempérant en particulier le secret par la possibilité de confier (sous condition⁹) son code à d'autres équipes.

c Tolérance du milieu scientifique

Toutes les pratiques précédentes visent à protéger, de façon plus ou moins illusoire, les méthodes mises au point par un groupe de chercheurs déterminé. Elles semblent contradictoire avec la déontologie même de la recherche, que j'ai rappelée plus haut.

Elles sont cependant assez bien tolérées par la communauté, qui se contente des avis d'experts en qui elle a confiance : les seuls spécialistes capables de comprendre et reproduire les calculs.¹⁰

De même, résultant du conflit entre confidentialité des découvertes et transparence scientifique, existera toujours une période de latence, pendant laquelle tout nouveau résultat scientifique restera inaccessible.

Ces pratiques nous interpellent au sujet de la validation des découvertes scientifiques. Auparavant, je voudrais suggérer, de façon plus positive, une autre façon de procéder, qui, si elle était adoptée, pourrait nettement améliorer la transmission des connaissances et la communication scientifique spécialisée.

d Une proposition d'utilisation des publications en ligne

Depuis bientôt vingt ans se sont développées les publications en ligne des travaux scientifiques. Quoique de nombreux chercheurs s'obstinent heureusement à faire valider en parallèle leurs travaux par la procédure des publications avec comité de lecture, pour une partie croissante des articles publiés se pose ici le problème de leur validation.

9. La condition principale exigée par les deux professeurs de Vienne était alors d'être co-auteurs d'un article, elle a heureusement disparue.

10. Cependant, j'ai souvent été surpris, quand j'ai consulté ces fameux spécialistes, de m'entendre répondre « *Je n'ai pas refait ces calculs, personnellement j'obtiens le même résultat de telle façon...* »

Ce n'est pas ce dont je veux discuter ici. Cela fait longtemps que je réfléchis à la possibilité de publier en ligne, parallèlement à un article formaté selon les standards académiques, des mémoires plus complets, qui présenteraient l'intégralité des calculs.¹¹

On pourrait créer, à ce titre, des sections spéciales *in extenso* dans arXiv. Ce mode de publication, tel que je le présente, serait libre et, sachant la surcharge de travail de tous nos collègues, je ne suis pas certain qu'ils seraient prêts à y consacrer du temps, on peut toutefois imaginer des systèmes d'incitation efficaces.¹²

Il ne s'agirait pas de supprimer la mise en ligne des articles conventionnels, car celle-ci répond à d'autres besoins et s'avère très utile, mais bien de créer une autre liste (consultable), sur laquelle on serait redirigé par lien.

Contrairement à ce qu'on pourrait penser, cette proposition n'est pas aussi utopiste qu'il n'y paraît, je connais personnellement plusieurs collègues, qui publient ainsi, sur leur page personnel, l'ensemble de leurs travaux préparatoires. Mieux, j'ai récemment eu un article à référer, dans lequel l'auteur renvoyait à une page personnelle pour le détail des calculs.

Il faudra, pour cela, que d'autres collègues arrêtent de cultiver le secret, attaché à leurs travaux. Il faudra surtout que l'état cesse de rogner sur notre temps de recherche; en particulier, à la suite des nouveaux décrets régissant le statut des enseignants-chercheurs [25], la menace existe qu'il ne soit plus possible de mener une activité réelle et sérieuse de recherche.

Non seulement un tel système lutterait de façon efficace contre les pratiques de secret que j'ai précédemment décrites,¹³ mais il résoudrait également le problème de la validation, que je vais maintenant aborder.

11. Pour un théoricien. Pour un expérimentateur, quelque chose d'équivalent devrait également être proposé, par exemple, la mise en ligne des données brutes. Pour un numéricien, on pourrait lui proposer de publier le code complet qu'il utilise, sans renoncer à l'exigence de confidentialité que j'ai mentionnée à propos du programme VASP.¹³

12. Par exemple, la prise en compte, dans certaines modalités d'évaluation, de ces publications *in extenso*. On pourrait imaginer également un système moins libéral, qui rendrait obligatoire ce mode de publication,¹³ cela dit, chaque chercheur devrait coopérer de bonne volonté et écrire le document lui-même, si l'on veut qu'il soit utilisable.

13. On devrait simplement prévoir des temps de carence avant que le document soit réellement accessible, afin de préserver toutes les exigences de confidentialité qui peuvent émaner des chercheurs.

B De la validation des travaux scientifiques

1 La non-traçabilité des calculs

Je me place volontairement dans une optique de théoricien, mais tout ce que j'écris ici s'applique *mutas mutandis* aux travaux expérimentaux.

a Les calculs manquants dans les publications

En raison même des omissions ou simplifications pratiquées dans les publications, il est impossible de vérifier intégralement certains calculs. Cela ne concerne pas tous les cas ; par exemple, le temps de Matsubara et la sommation finie des fréquences, qui lui est associée, sont expliqués dans les articles que j'ai déjà cités. Par contre, mon article de 1993 [7] ne peut plus être contrôlé *in extenso*, comme je l'ai déjà expliqué.

b Le cas particulier des travaux numériques

Une grande majorité des travaux scientifiques utilisent des méthodes numériques, que ce soit des programmes de traitement des données expérimentales ou des programmes de résolution numérique d'équations différentielles, etc. Cela dépasse, et de beaucoup, la sphère des chercheurs dits numériciens.

En raison de la lourdeur et de la technicité des codes numériques, et de l'ensemble des données numériques engagées dans ces travaux, il n'est jamais possible de les publier, ce qui fait qu'une partie des secrets reste souvent cachée.

Ainsi, Aubry, que j'ai cité en exemple parce qu'il a écrit l'intégralité de ses calculs sur les chaînes unidimensionnelles, a travaillé sur les bifurcations dans des systèmes bidimensionnels, ce qui a nécessité des calculs numériques longs et complexes [26–28], dont il n'a, au contraire, pu révéler le détail.

C'est un état de fait que je ne trouve pas sain. Que certains chercheurs désirent garder la confidentialité des codes qu'ils ont écrit, pourquoi pas. Pour autant, il serait utile et profitable, pour la science et l'humanité en général, que les programmes, qui ont permis des progrès scientifiques, soient conservés et diffusés, quitte à ce que leur secret soit gardé pendant une certaine période, comme pour les brevets. Je ne pense pas seulement aux travaux numériques faits par des théoriciens, mais aussi aux programmes utilisés pour le traitement des données expérimentales, qui sont parfois très sophistiqués, que ce soit en physique des particules ou en matière condensée.

La publication de ces codes en ligne, selon un protocole qui resterait à inventer, comme je l'ai exposé plus haut, me semblerait une solution viable ; il est étonnant que cela n'ait jamais été encore envisagé.

c Le recours direct aux auteurs

Si l'on veut comprendre un article, dont certaines parties restent obscures, il reste une possibilité, qui se pratique couramment dans la communauté scientifique : c'est de contacter directement un auteur, pour lui demander des précisions sur cet article.

J'ai personnellement contacté plusieurs auteurs ; la plupart des réponses reçues étaient très brèves et difficiles à interpréter. J'ai notamment contacté M. Fabrizio pour un éclaircissement sur son article [20], mais il m'a fallu des mois pour vraiment comprendre sa réponse.

On ne peut d'ailleurs être certain que tous les auteurs répondent à de telles demandes, mais il faut bien reconnaître, de toutes façons, que cette pratique atténue seulement l'opacité qui résulte de certaines publications ; à moins de rencontrer longuement les auteurs, il reste toujours des parties incomprises dans leurs articles.

d L'exégèse des auteurs

Certains chercheurs ont une reconnaissance telle, ce sont des savants si importants dans l'histoire des sciences, qu'un véritable travail d'exégèse se met en place, afin de comprendre leurs travaux.

On pense naturellement aux sciences sociales, à des auteurs comme Freud, Lacan, Barthes, Bourdieu, etc., mais de tels travaux d'exégèse existent aussi dans le domaine des sciences dures.

Ainsi, avec P. Kalugin, T. Masson, A. Joets et E. Sérié, qui faisait une thèse sous la direction de T. Masson et M. Dubois-Violette, ai-je participé à un séminaire de mathématiques, dont un des objets d'étude était de travailler sur l'algèbre non commutative fondée par Connes. Il s'agit de travaux passionnants mais peu connus du grand public, bien que la théorie des cordes, qui utilise des outils assez analogues, soit quelque peu vulgarisée.

Plus précisément, E. Sérié et T. Masson ont repris l'ensemble des calculs de Connes, en refaisant toutes les démonstrations.¹ On se trouve ici dans un cas exemplaire de validation d'une théorie.

Cependant, la masse des travaux scientifiques publiés constitue une mine extraordinaire, dont les plus belles pépites restent trop souvent mal connues, et ne peuvent être ainsi décortiquées et digérées par la communauté.

1. Cela a constitué l'essentiel de la thèse d'E. Sérié [29].

2 Les limites des procédures de validation des travaux scientifiques

a Les comités de lecture

Le principe de relecture par un comité de lecture est à mes yeux le meilleur possible; pourtant, en raison de la multiplication des publications scientifiques, tout le monde se rend compte qu'on arrive à une saturation complète du système et, finalement, une détérioration très nette du contrôle.

D'une part, les chercheurs, même les plus expérimentés, refusent de plus en plus de relire des articles; les éditeurs doivent insister à de multiples reprises, quand ils ne renoncent pas, finalement, à une pluralité de jugements. Du coup, les rapporteurs ne sont souvent plus de vrais spécialistes du domaine et leur analyse est parfois complètement erronée. D'autre part, les rapports sont de plus en plus souvent lapidaires et succincts, les rapporteurs se contentent d'une lecture sommaire.²

Il faut ajouter, pour être complet, que de tout temps, la signature des auteurs a compté énormément. Même quand un rapporteur critique l'article d'un chercheur de reconnaissance internationale, il arrivera souvent que l'éditeur ne tienne pas compte de son jugement.

b Le cas des articles publiés en ligne

Dans ce contexte, il convient de rappeler que les articles publiés en ligne n'ont aucune forme de validation. Or, de plus en plus de chercheurs se contentent de publier leurs travaux en ligne, sans les soumettre à des revues avec comité de lecture.³

3 Absence d'appareil critique

a Les articles erronés

Le problème de la validation des travaux scientifiques ne possède pas, à mes yeux, l'importance de leur traçabilité.

En effet, la correction et l'exactitude des articles procède d'un idéal, presque mythique et rarement atteint. Il reste presque toujours une petite coquille, une faute stupide, une phrase mal tournée.

Surtout, les théories incomplètes ou fausses participent à part entière de la formation des idées. Par exemple, l'article de Fröhlich [30,31] de 1954 a fondé toute la recherche sur les mécanismes propres de supraconductivité à une dimension, bien qu'il se soit avéré ensuite bien trop simpliste et donc, en toute rigueur, faux.

2. Pour ne citer que les rapports de l'article que j'ai publié avec Y. Avishai [8], aucun ne dépassait quatre lignes et, par ailleurs, aucun rapporteur n'a détaillé son commentaire.

3. Cette tendance est toutefois limitée par l'importance, dans les procédures de recrutement et d'évaluation, des articles publiés dans les grandes revues.

Le véritable problème tient davantage à la difficulté de distinguer, parmi toutes les publications, celles qui nous intéresseront réellement, et, en particulier, celles qui auront un impact scientifique.

b Les approximations mal justifiées

D'une façon générale, se pose la question des approximations utilisées dans les calculs qui sont publiés : certes, les auteurs, la plupart des fois, prennent beaucoup de soin à les justifier, parfois assez longuement.⁴

Je trouve qu'elles sont beaucoup trop peu discutées : les scientifiques préfèrent parler des résultats, alors que, comme –il me semble– ne l'aurait pas désapprouvé de Gennes [32], l'essentiel de la physique se situe dans les conditions d'application de telle ou telle approximation ; on observe une fascination de notre milieu pour les descriptions.

Je voudrais en donner un petit exemple : dans les sels de Bechgaard, nous prédisons l'existence d'une phase triplet à grand champ magnétique [33,34], tandis que les travaux numériques réalisés par Roux à Toulouse, sous la direction de Poilblanc, prédisent une phase Fulde–Ferrel–Larkin–Ovchinnikov (FFLO) [35,36].

Des considérations générales ne permettent pas de trancher en faveur de la phase triplet ou de la phase FFLO, il convient donc de comparer les diverses approximations de chaque calcul. Dans le calcul de l'équipe de Poilblanc, seul l'effet Zeeman dû aux moments de spin est pris en compte, tandis que nos calculs intègrent également l'effet du moment orbital. Par contre, la dépendance en fréquence est négligée dans nos calculs, et le paramètre d'ordre simplifié et adapté à la symétrie attendue (du moins pour un système de chaînes en interaction, pas pour celui d'une échelle de spin), alors que les calculs de l'équipe de Poilblanc ne font aucune autre approximation (ou plutôt, elles sont toutes maîtrisées).

On peut montrer, par de simples ordres de grandeur, que l'effet du moment orbital est aussi fort que l'effet Zeeman dû au spin. Pour cette raison, nous croyons que notre résultat est le bon. Toutefois, notre modèle n'exclut l'existence d'une phase FFLO qu'à certaines conditions ; or les contraintes sur le paramètre t_c (cf. mon manuscrit d'habilitation) ne peuvent être satisfaites, si on s'en tient aux valeurs expérimentales connues, $5 \lesssim t_c \lesssim 10$ K, ni pour le mécanisme triplet, ni pour le mécanisme FFLO. Finalement, la discussion ne peut être définitivement tranchée, mais j'espère avoir suffisamment attiré l'attention sur l'importance des approximations choisies, par cet exemple.

c Faiblesse des critiques

C'est ce qui me frappe le plus, avec le recul. Certaines méthodes sont discutées, certains groupes contestés dans leur méthodologie, mais chacun continue à publier tranquillement dans son milieu, sans qu'il y ait de confrontation réelle des points

4. Je ne veux pas m'attarder trop sur celles des approximations qui sont opportunément passées sous silence, qu'elles soient standard ou pas. Leur justification peut être floue, difficile, voire inexistante : les auteurs sont souvent amenés à simplifier les calculs, faute de pouvoir mieux faire. La pertinence et l'innocuité des approximations est affaire de bon sens, d'habitude, d'intuition, ou mal contrôlée, parfois !

de vue.

C'est bien sûr le rôle des conférences, où chacun peut discuter et échanger avec les autres chercheurs de sa spécialité. Mais, dans plusieurs domaines, le nombre de conférences s'est multiplié, selon un découpage en groupes, j'aurais presque écrit clans, qui s'ignorent et travaillent chacun de leur côté.

Je voudrais donner plusieurs exemples qui m'ont heurtés, dans mon propre domaine.

α Le nombre de boucles dans le développement des équations du groupe de renormalisation

Dans un travail où l'on renormalise à la fois les constantes de couplage et la surface de Fermi [22], j'ai suivi les procédures de l'école allemande [37, 38], pour le développement en boucles : on développe l'énergie propre⁵ à deux boucles et les couplages à une boucle, et on résout les équations de renormalisation couplées.

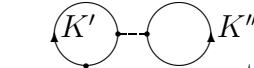
Cela peut choquer au premier abord, et d'ailleurs, c'est contraire au travail pionnier de Sólyom [39], qui développe bien l'énergie propre à deux boucles mais également les couplages à deux boucles.

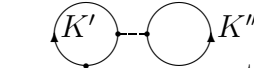
Et, bien que je n'ai pas eu personnellement de problème lors de la soumission de notre article, j'ai rencontré, lors de colloques, des chercheurs m'expliquant que la démarche de l'école allemande était entièrement fautive.

Or, et c'est en cela que je regrette l'absence de discussion critique approfondie, ces deux approches sont différentes, et, ne visant pas les mêmes objectifs, sont correctes toutes les deux.

Étudions plus précisément, tout d'abord, les calculs à une boucle :

- Dans les équations de renormalisation des couplages g , les lignes de propagation *ne sont pas* renormalisées.
- Ainsi, les couplages seront renormalisés au premier ordre en boucles (et au deuxième ordre en g) **indépendamment** de la renormalisation de l'énergie propre.
- Par contre, dans les équations de renormalisation de l'énergie propre interviennent les couplages renormalisés g ; c'est cohérent au deuxième ordre en boucles, puisqu'une insertion d'un couplage renormalisé à une boucle dans une ligne de propagation avec une boucle de renormalisation donnera bien un terme à deux boucles, qui entre en concurrence avec les graphes à deux boucles comme celui dit du soleil levant.⁶



- Certains graphes ne sont pas irréductibles, comme , et doivent être retirés dans le schéma à une particule irréductible. Ils sont redondants avec les



boucle , le couplage g par son développement renormalisé.

Examinons maintenant le développement à deux boucles :

5. Self-energy en anglais.

6. Sunrise en anglais.

- Dans les équations de renormalisation des constantes de couplages, les lignes de propagation sont renormalisées (cependant, il est notable que seuls les schémas à une boucle contribueront).
- Ainsi, les constantes de couplages seront renormalisées au deuxième ordre, de façon cohérente, c'est à dire couplées avec l'énergie propre.
- Par contre, la renormalisation de l'énergie propre reste inchangée.

β Différences entre les méthodes de renormalisation

Toujours en comparant le travail de Sólyom et celui des équipes allemandes, j'ai trouvé des différences plus importantes, qui n'ont jamais été notées, autant que je sache.

J'ai menti (volontairement) quand j'ai écrit, plus haut, qu'il est nécessaire de renormaliser des diagrammes tripodes pour renormaliser les susceptibilités. En fait, c'est vrai des méthodes modernes de renormalisation, depuis les travaux de Schulz et Zanchi [14]. Par contre, Sólyom s'appuie sur la formule de Wick (qui donne les développements divergents), puis sur les équations d'invariance d'échelle, dans lesquelles il substitue les différents développements recherchés.

Or, il est frappant que les développements obtenus par ces diverses méthodes sont différents à partir du deuxième ordre. Il n'y a pourtant rien là qui devrait surprendre, puisque les développements obtenus par le schéma de l'ordre de Wick et ceux obtenus par le schéma à une particule irréductible sont également différents (voir une discussion très fouillée sur ce point dans la thèse de Nickel [40]).⁷

Mais, il devrait exister des travaux d'analyse de ces différences. Dans toutes les disciplines non scientifiques, un travail suscite systématiquement un appareil critique très élaboré ; or, sous prétexte que les sciences dites dures sont exactes, la pertinence des modèles proposés, ou celle des méthodes employées, n'est jamais vraiment examinée, seul semble compter le résultat.

C'est pourtant oublier que nous naviguons généralement entre de multiples approximations, dont certaines ne sont jamais justifiées. De façon plus générale, il est impossible de dire qu'une théorie est exacte [2], même s'il faut par contre tâcher de mener ses calculs de façon cohérente.

γ Une faute de mathématiques

Après la publication de notre travail sur la barrière de Coulomb [8], j'ai également soumis un commentaire [41], concernant certains travaux plus anciens, qui nous ont été indiqués ultérieurement.

Ce qui m'intéresse ici, c'est que l'un d'entre eux, écrit par Haines *et al* [42] faisait une erreur grossière de mathématique, qui n'a pas même été relevé par Andrews [43], alors que ce dernier contestait leur travail.

L'erreur consiste à imposer à la fois une condition en $-\infty$ et en $+\infty$ pour résoudre une équation différentielle. Certes, les auteurs ne faisaient pas l'erreur de façon aussi stupide, puisqu'ils résolvaient le problème en deux morceaux, puis recollaient les

7. Comme expliqué justement dans [40], le processus de renormalisation selon les schémas de l'ordre de Wick et à une particule irréductible n'admettent pas de point fixe, contrairement au groupe de renormalisation étudié dans [39]. Celui-ci utilise des équations d'invariance d'échelle, qui n'existent pas pour ces méthodes modernes.

deux en $x = 0$. Mais, c'était quand même oublier qu'ils réduisaient la dimension des solutions partielles de 2 à 1, le raccordement devenant un simple problème de facteur d'échelle entre les deux morceaux, alors que les équations de raccordement d'une équation différentielle du second degré (comme l'est l'équation de Schrödinger) sont nécessairement des équations matricielles reliant deux systèmes de dimension 2.

Dans le fond, il ne serait pas heureux d'exiger de chaque auteur la même maîtrise des mathématiques; cet exemple met cependant assez crucialement en lumière l'absence d'un appareil critique, qui aurait pu aboutir à une meilleure analyse de l'article de Haines *et al.*

d Le temps des spécialistes

Il n'est pas rare de trouver des incohérences également dans les livres. Par exemple, j'ai rencontré plusieurs fois la même incohérence, dans des domaines différents : un auteur pousse un développement en série jusqu'à un ordre quelconque, alors même que certaines des approximations auxquelles il fait ses calculs lui interdiraient de comparer, mettons, le troisième ordre avec les termes qu'il a négligés.

Il ne s'agit d'ailleurs pas vraiment d'une erreur, l'auteur explique de façon formelle comment son développement se continue, il appartient au lecteur de prendre garde aux hypothèses et d'adapter éventuellement les formules.⁸

Ces ouvrages offrent une synthèse théorique et pédagogique, mais sont souvent la seule référence disponible, dès que la matière en est une spécialité pointue. Autant les matières académiques ont données lieu à un corpus vaste et riche, les auteurs dialoguant parfois à travers les références [44], autant les ouvrages spécialisés n'ont donnés qu'une littérature rare et peu commentée. Les spécialités, si je puis écrire, sont laissées dans les mains des spécialistes.

Ceci m'entraîne sur le sujet de la communication, en physique, qui est l'objet de la partie suivante.

8. Il n'en reste pas moins qu'elles sont souvent inutilisables, car beaucoup trop dures à généraliser quand on tient justement compte de ces termes oubliés; certains théoriciens ont parfois tendance à se prendre au jeu de leur calcul formel, sans s'interroger sur leur pertinence.

C De la communication en sciences

Les diverses facettes du métier de chercheur

Le métier de chercheur n'a de sens et n'est complet, selon moi, que s'il est associé à la diffusion des connaissances et découvertes que nous y acquérons ou réalisons. Cette diffusion peut consister en des séminaires entre spécialistes, mais également se faire par la voie de l'enseignement, la vulgarisation, la rédaction d'ouvrages, etc.

C'est lors d'une rencontre avec Levy-Leblond [45] en 1989, au Congrès National des Jeunes Physiciens (Physique en Herbe), à Strasbourg, que j'ai pleinement réalisé l'importance de cette dualité de fonctions et que j'ai personnellement choisi en conséquence d'être enseignant-chercheur.

La diffusion est indissociable de la communication : une communication à deux bouts, le bout de celui qui raconte, qui fait passer un message, qui enseigne, qui montre, et le bout de celui à qui s'adresse ce message, qui écoute, qui apprend, qui peut parfois réagir voire nous contredire [46].

Je voudrais m'étendre sur certains problèmes inhérents à notre milieu, qui est loin d'ailleurs, on va le constater, d'être homogène. Je vais séparer ces deux bouts de la communication : j'intitulerai la discussion sur le premier « *communication scientifique* » en soi, pour laquelle j'ai distingué le moins de problèmes, et la discussion sur le second « *diffusion des sciences* », qui pose davantage de soucis.

1 La communication scientifique

a Enseignement et communication

J'ai déjà évoqué mon choix de devenir enseignant-chercheur ; je voudrais encore dire un mot sur la partie enseignement de mon métier.

α L'enseignement à l'université

L'enseignement est une part essentielle de la diffusion des connaissances. Que ce soit en licence, où on ne traite que de sujets académiques, ou en master, où on aura fréquemment l'occasion d'intégrer des sujets nouveaux, issus de la recherche récente, cela nous permet de parfaire notre culture générale, d'approfondir nos connaissances. Les interactions avec la recherche sont nombreuses et riches. Un processus dynamique de consolidation et de structuration de nos travaux et découvertes se produit, qui se révèle extrêmement fructueux.

β La formation des enseignants

Depuis les années 90 existent des stages de formation pédagogique pour les moniteurs. Mais tous les enseignants recrutés ne la suivent pas, la seule exigence lors du recrutement est une expérience préalable.

De même, l'évaluation des enseignants reste une question difficile [47].

γ Les documents écrits

On peut trouver sur la toile de très nombreux textes pédagogiques écrits par les enseignants universitaires de toute la France, dont le niveau pédagogique, la valeur et la qualité des connaissances y sont d'un très haut niveau.

Une telle diversité peut éventuellement troubler, tant cela représente d'énergies parfois redondantes. Pourtant, chaque enseignant, tout en respectant un vaste corpus de notations internationales, construit nécessairement son univers propre de représentations mathématiques ou physiques, et il est normal, à ce niveau, qu'il veuille offrir à ses étudiants des textes conformes et cohérents avec ses cours.

Toutefois, il est dommage qu'il n'existe aucune structure capable de rassembler, voire de mutualiser l'ensemble de ces ouvrages pédagogiques ; ce serait aussi l'occasion de connaître chacun les choix des autres, et, pourquoi pas, de les imiter.

Surtout, je trouve choquante l'absence totale de reconnaissance de cette immense production, qui occupe une part non négligeable de notre temps d'enseignant : certains documents administratifs¹ nous en demandent parfois la liste, mais nulle sanction ne s'ensuit.

b Les séminaires scientifiques

Je distinguerai ici les séminaires donnés dans des laboratoires et ceux lors de conférences.

α Le lieu privilégié de la communication

Les séminaires, qu'ils soient informels ou adressés à un plus large public, sont les lieux de la communication scientifique par excellence. On y expose nos dernières découvertes, nos derniers travaux.²

Ils ne sont généralement pas destinés, sauf peut-être lors d'Écoles d'été, à expliquer exhaustivement un sujet, mais à éveiller la curiosité, à annoncer un nouveau résultat, une nouvelle méthode, un nouveau concept, et, de façon plus ou moins approfondie, à fournir quelques clés, quelques explications basiques.

Quand un sujet nous a intéressé, on voudrait l'approfondir par des lectures ou d'autres séminaires. Mais, le manque crucial de temps des enseignants-chercheurs et la logique absurde d'évaluation comptable de la recherche ignore justement la nécessité d'accroître en permanence notre culture générale .

1. Pour la prime d'encadrement, par exemple.

2. On peut y raconter aussi nos échecs, les impasses que nous avons rencontrées, malheureusement notre milieu subit une fascination pour les découvertes et les succès, et j'ai rarement entendu de tels exposés, sauf parfois en petit groupe de travail ; pourtant, en médecine, où on observe la même fascination, cela a posé un problème éthique, lorsqu'on a laissé une équipe tomber dans une chausse-trappe connue sans l'alerter [48].

β Communication ou publicité ?

Malgré une nette amélioration, depuis que de nombreux masters imposent des vraies soutenances devant jury, les scientifiques français restent moins bien formés à la communication que nos collègues anglais, américains ou allemands, par exemple.

Je souviens d'un séminaire époustouflant de Bancel en 1986, qui avait montré que les largeurs des pics de diffraction des quasi-cristaux correspondaient exactement aux raies fines d'un cristal et non à des phases moins cohérentes, comme une modulation de réseau ou un maillage de grains, qui auraient donné des pics plus larges. L'importance du message d'alors tient à la date à laquelle il fut délivré : les quasi-cristaux venaient tout juste d'être découverts, et ces mesures de largeur de pic avaient été justement faites pour taire les objections des derniers savants un peu pointilleux et méfiants, qui doutaient encore de l'existence de tels cristaux non conventionnels. Bancel fut parfait à cette occasion : il nous a proprement **vendu** l'existence des quasi-cristaux !

J'ai rééprouvé la même sensation de vertige, lors du séminaire de Metzner à la Conférence internationale en physique théorique, à Paris, en juillet 2002. Il nous a vendu avec une conviction totale et contagieuse la méthode de renormalisation par le schéma de l'ordre de Wick, comme étant la panacée à toutes les difficultés jusqu'alors connues dans le domaine. Mais je bouillais intérieurement, car, malgré toute sa supériorité sur moi dans cette spécialité, je savais, non seulement les subtilités concernant la comparaison entre les différentes méthodes de renormalisation, qui ne permettent certes pas de conclure à la supériorité de l'une d'entre elles,³ mais surtout l'écueil principal de toutes ces méthodes dites fermioniques : le flot est toujours divergent, malgré tous les raffinements qui ont été, depuis lors, proposés.

γ Les échanges internationaux

Les scientifiques sont amenés à beaucoup voyager à travers le monde, pour rencontrer leurs collègues de tous pays, de toutes disciplines. Cette mobilité est indispensable, pour la diffusion des connaissances à l'échelle internationale.

Certains collègues arrivent à suivre l'ensemble de l'activité internationale dans leur domaine. Pourtant, les conférences se multiplient, dans des domaines de plus en plus proches, au point que j'ai parlé précédemment de pratiques claniques. Je voudrais détailler ceci.

Les conférences se sont historiquement organisées, de façon spontanée et libre, à travers le monde. Chacune émane d'un groupe de scientifiques, souvent de très grande notoriété, ayant des affinités particulières entre eux. Régulièrement, de nouvelles conférences sont créées, pour tenter de mêler, justement, certaines communautés et de les faire mieux se dialoguer.

Mais, ce brassage est insuffisant et plutôt superficiel. J'observe au contraire que beaucoup de physiciens fréquentent toujours les mêmes communautés et que les publics sont presque séparés, entre deux conférences portant sur le même domaine mais organisées par des comités différents.

Certains physiciens de renom, ou plus obscurs, franchissent ces clivages et assistent à plusieurs conférences concurrentes, mais ça ne suffit pas à empêcher un

3. C'est parce qu'on peut tout écrire algébriquement, y compris la coupure, que Metzner préfère le schéma de l'ordre de Wick.

découpage de la communauté internationale en clans, relativement peu perméables.

Lorsqu'on débute et qu'on expose ses premiers travaux, on parlera, tout naturellement, devant un auditoire restreint, de collègues du même laboratoire et des laboratoires voisins avec lesquels on collabore sur le même sujet. Puis, on partira faire des exposés à différents endroits, dans le monde. Or, quand on analyse attentivement les curriculum vitae qu'on nous donne à lire, on observe que ces jeunes chercheurs iront, de façon privilégiée, dans des groupes avec lesquels leur maîtres entretiennent des liens forts. De même, les conférences choisies seront souvent celles déjà fréquentées par le groupe. Mon expérience ne départ pas de ce schéma.

De même, les chercheurs plus confirmés continuent souvent à fréquenter les mêmes conférences, les mêmes petits groupes, ce que j'appellerais les copains. Bien sûr, la nécessité de rencontrer d'autres groupes n'échappe à personne, mais cela n'est pas assez mis en pratique.

δ Les querelles scientifiques partisans

De nombreuses controverses se développent dans la communauté scientifique, qui donnent parfois lieu à des échanges passionnants ; le débat, souvent riche, se conclut alors par de nouvelles avancées en physique.

Mais, de plus en plus, au lieu d'un échange frontal, on assiste à une séparation de la communauté en sous-groupes, parfois en Écoles, qui s'ignorent plutôt que de s'affronter. Ainsi, selon que l'on assiste à une conférence ou une autre, on entendra des orateurs partisans d'une École ou d'une autre.

J'en donnerai un exemple. J'ai été frappé par la diversité des analyses concernant le diagramme de phase, et plus précisément la transition sous-dopé/sur-dopé des phases supraconductrices de type non conventionnel. Certains y voit une transition douce, qui serait le prolongement d'une ligne de transition magnétique (apparition des paires de Copper et du pseudo-gap), prélude elle-même de la transition vers la phase antiferromagnétique [49–51]. Certains auteurs ont récemment discuté la possibilité qu'il s'agisse d'une transition de Mott [52]. Selon une autre école, c'est une transition du premier ordre, liée à l'existence d'un point quantique critique à température nulle [53]. Cette deuxième interprétation est très à la mode, quoique non compatible avec la précédente (qui est du deuxième ordre). On peut également consulter un article de revue, plutôt basé sur la première interprétation [54].

À la conférence SCES'05, à Vienne, en Autriche, en 2005, tous les exposés que j'ai entendus, relatifs à ces diagrammes, portaient sur le point critique quantique, tandis qu'à la conférence ISCOM'07, à Peñíscola, en Espagne, en 2007, j'ai uniquement entendu parler de transition de Mott ou du pseudo-gap, sans aucune interprétation en terme de point critique quantique. On peut conclure qu'il existe une subjectivité d'opinion.

Il faut nuancer un peu ce jugement ; la situation est moins caricaturale que je semble l'écrire. Le diagramme de phase des divers supraconducteurs de type non conventionnel n'est pas toujours complètement connu, mais il semble déjà assuré qu'il existe une grande diversité à ce niveau d'analyse fine, bien qu'au départ ce soient plutôt leurs similitudes qui ont guidé les théoriciens.

De plus, autant les communautés semblent parfois s'ignorer, comme pour l'exemple des conférences concurrentes, autant beaucoup de physiciens, interrogés individuel-

lement, connaissent bien les différentes écoles et interprétations qui existent dans leur domaine. Et, souvent, ils sont moins subjectifs dans leur approche qu'il n'y paraît lors des conférences.

ε Les jeunes chercheurs

J'ai discuté en premier lieu des jeunes chercheurs. Malgré ce que j'ai écrit plus haut, c'est probablement l'une des rares périodes où ils peuvent se rendre dans des laboratoires qui n'appartiennent pas à la sphère de copinage de leur groupe. Le congrès Physique en Herbe est devenu la Rencontre des Jeunes Physiciens (Physiciennes), organisé par la Société Française de Physique⁴ ; au niveau de l'Université Paris XI existe le colloque *jeunes chercheurs* Bouyssi, qui permet une très grande mixité entre laboratoires, où j'ai été frappé par l'excellente connaissance qu'avaient les doctorants les uns des autres à travers tout le campus. Cette capacité à jouer de la mixité me semble malheureusement surtout l'apanage des jeunes chercheurs.

Tout ceci existe au niveau du laboratoire. La direction multiplie les initiatives (séminaire d'axe, journée du laboratoire en séminaire fermé) pour faire se connaître et travailler davantage ensemble les chercheurs. Mais la faible assiduité des chercheurs confirmés au forum thésards annuel montre qu'à ce niveau également, les jeunes pratiquent mieux la mixité et l'interdisciplinarité.

c Littérature scientifique

En dehors des articles paraissant dans les revues spécialisées, que j'ai largement traités au chapitre précédent, il existe trois sortes de publications :

- les articles de revue, qui paraissent dans ces mêmes revues spécialisées mais répondent à un besoin et des critères très différents ;
- les petits cours, qui paraissent exactement dans les mêmes conditions ;
- les ouvrages spécialisés proprement dits, véritable littérature pédagogique, malheureusement trop rare dès qu'il s'agit de recherche récente.

Tous concourent activement à la communication scientifique, et ainsi à la diffusion des sciences. Je vais rapidement les traiter successivement.

α Les articles de revue et les petits cours

Ces articles sont uniquement publiés dans les revues internationales.⁵ Ils peuvent comporter des résultats nouveaux, mais ce n'est nullement exigé. Ils sont souvent produits à l'occasion de conférences, ou d'Écoles d'été, ou autres cours. Ils peuvent avoir également été commandés par un éditeur. Plus rarement, ils sont écrits à l'initiative propre d'un auteur.

Une de leur caractéristique, qui pourrait presque être utilisée comme définition, est qu'ils sont la plupart du temps écrits par un auteur unique, parfois deux, rarement plus, bien que ce soit des articles longs.

4. Elle se déroulera le 6 novembre de cette année 2013.

5. Les critères d'évaluation des journaux devraient d'ailleurs être corrigés quand il s'agit de ces seuls articles, car, tandis que certains journaux les acceptent facilement, d'autres, plus prestigieux, les refusent à cause de leur longueur, si bien qu'on trouve de très bons articles dans *Solid State Physics*, ou *Journal of Modern Physics* pour ne citer que deux exemples.

Ils ont souvent le mérite d'une certaine neutralité, et rassemblent des opinions diverses. Cela écrit, il s'agit le plus souvent d'une simple juxtaposition, sans confrontation ; au moins, on peut facilement passer d'une théorie à l'autre. Mais, il y manque une vraie synthèse, ou ne serait-ce qu'une vraie discussion sur les compatibilités et les incompatibilités des divers modèles d'interprétation.

Ils sont essentiels et indispensables, car ce sont souvent les seuls documents disponibles pour approfondir un sujet. D'ailleurs, il est généralement recommandé de commencer l'étude d'un domaine particulier par la lecture d'un article de revue, qui, tout à la fois, balaie l'horizon de la production scientifique, et introduit quelques notions de base.

Les petits cours, quant à eux, ont l'immense mérite d'exister. Car, pour moi, ils sont souvent les uniques productions pédagogiques, dans les domaines les plus pointus, les plus actuels. Ils sont le véritable trait d'union entre les articles spécialisés et les livres. Ils sont généralement complets, dans leurs notations et dans leurs démonstrations, et bien écrits.

β Les ouvrages spécialisés

À l'inverse d'une revue, les ouvrages pédagogiques ne se contentent pas de faire la somme des connaissances connues sur un sujet donné ; au contraire, les auteurs tentent de les synthétiser, de démonter tous les secrets, de reconstruire une théorie complète et cohérente.

Ils peuvent avoir leurs limites. Citons par exemple l'absence de justification sur le passage du temps réel t au temps imaginaire $i\tau$ dans le livre de Negele [55], alors que le temps de Matsubara apparaît deux fois dans le livre, qui renvoie à un article de Lehmann [56].

Le principal problème est que ces ouvrages n'apparaissent que lorsqu'un sujet est ancien, les résultats établis et universellement admis, bref : académiques. Travaillant sur le groupe de renormalisation selon le schéma à une particule irréductible, j'ai recensé les ouvrages en traitant. Soit ils sont trop spécialisés (renormalisation dans les systèmes finis adaptée aux travaux numériques [57], pour les polymères [58, 59], en théorie des champs [60–66], en théorie statistique des champs [67, 68], appliquée à la turbulence [5, 69, 70], en théorie des champs fermioniques [71], dans l'espace réel [72, 73], appliquée aux matrices de densité [74], en mathématiques [19, 75–80], en particulier en algèbre [81–84], on peut citer [85] pour une introduction aux ouvrages mathématiques). Soit ils sont trop généraux, même quand ils sont récents ; ils⁶ m'ont permis de réapprendre les règles de base [6, 86–98]. Pour les méthodes modernes que j'utilisais, il n'y a guère que [15, 99], qui d'ailleurs ne convenaient pas entièrement (le premier utilise un schéma mixte, le second l'ordre de Wick).

Concernant la renormalisation par le schéma à une particule irréductible, je n'ai trouvé aucun ouvrage de ce type, il faut se référer à des articles, comme [95] ou [17].

d La vulgarisation scientifique

Il s'agit d'un aspect transversal à cette réflexion, dont les conclusions sont cependant très importantes.

6. J'ai eu recours à une partie seulement de la liste qui suit, mais également à certains des livres précédents, par exemple le Gross [60], qui analyse très bien le problème de la coupure.

α L'activité de vulgarisation

J'entends, par activité de vulgarisation, tout ce qui concerne la communication dans des milieux non scientifiques, ou non universitaires, que ce soit en milieu scolaire (primaire, secondaire) ou adressé au grand public ; j'y inclus les démonstrations au Palais de la découverte, tous les évènements qui sont organisés, aussi bien dans des lieux publics, comme une salle de RER ou de musée, qu'au sein de notre université, comme les journées portes-ouvertes, ou certaines expositions grand-public (il y a eu une formidable exposition sur les l'observation des particules élémentaires, voici quelques années, où j'ai pu découvrir une chambre à brouillard ; plus fréquemment, les phénomènes astronomiques suscitent des rencontres avec les chercheurs, pour observer des éclipses, ou autres phénomènes de notre galaxie). Il ne faut pas oublier les séminaires grand public (il y en a un dans notre propre laboratoire, intitulé "petit séminaire de vulgarisation", plus particulièrement adressé au personnel non chercheur de l'université⁷, qui obtient régulièrement des records d'affluence), ni les émissions à la télévision et à la radio.

Il semble entendu que l'activité de vulgarisation est facultative, le choix est laissé libre à chaque chercheur de faire de la vulgarisation ou non. Je ne crois pas que cela soit une bonne chose. Malgré cela, cette activité se porte bien, actuellement. Certes, Hubert Reeves est canadien, et aucun chercheur français ne peut rivaliser avec sa notoriété dans le grand public, mais je crois que la France a bien rattrapé son retard depuis une dizaine d'années avec des initiatives comme la main à la pâte, des chercheurs comme Hervé This ou Étienne Klein, des évènements comme la nuit des étoiles, l'année de la supraconductivité et les évènements qui ont suivi, organisés par J. Bobroff, etc. Le nombre d'émissions à la télévision a régulièrement augmenté récemment, après des années de quasi absence dans ce média, et révèle, je crois, la bonne santé de la vulgarisation scientifique dans notre pays.

Je viens de citer certains noms de chercheurs appartenant au C.N.R.S., mais, de façon générale, sauf lors des journées portes-ouvertes ou les visites du laboratoire,⁸ j'observe que ce sont plus souvent des enseignants-chercheurs qui font de la vulgarisation. La nouvelle possibilité de faire reconnaître certaines activités liées à la vulgarisation dans le service d'un enseignant-chercheur [100], que je salue, ne fera que renforcer cette prédilection.

β L'interaction avec la recherche

L'activité de vulgarisation interagit avec notre métier de chercheur, exactement comme l'enseignement, en particulier celui délivré aux premières années : il permet d'approfondir un sujet, d'en découvrir de nouveaux aspects, à l'occasion des manipulations que l'on prépare, des montages que l'on met au point.

La relativement grande liberté avec laquelle on crée les expériences de vulgarisation fait qu'on privilégiera souvent des manipulations issues des dernières recherches, paradoxalement plus facilement que pour l'enseignement des travaux pratiques qu'on dispense en premier cycle universitaire, dont les programmes sont délimités.

7. Il a été fondé par Philippe Aymard, technicien puis ingénieur parti depuis à la retraite.

8. Ce contexte est plus favorable aux chercheurs, qui sont sur place, tandis que les enseignants-chercheurs sont plus mobiles.

γ De l'importance de la vulgarisation

Pour terminer sur ce sujet, je voudrais resituer l'activité de vulgarisation dans la globalité de notre métier de chercheur.

Pourquoi faisons-nous de la recherche ? pour accroître les connaissances ? de qui ? les nôtres ? ou celles de l'humanité, celles de tout un chacun ? Dès que l'on réfléchit à ces questions, il apparaît que diffuser nos connaissances fait non seulement partie de notre métier, mais en est l'essence.

Certes, la vulgarisation ne participe pas directement de notre activité de recherche, mais c'est un de ses buts ultimes ; de même que les électrons qui s'échappent d'un accélérateur circulaire n'appartiennent plus au faisceau, mais en sont la quintessence.

J'aurais pu écrire la même chose, concernant l'enseignement universitaire. Il me semble même que ces deux activités devraient être considérées au même titre, c'est à dire l'une pouvant remplacer l'autre dans nos obligations, comme cela commence seulement à être reconnu.

Il est très important d'y réfléchir ; trop de chercheurs ont tendance à ne se consacrer qu'à leur recherche, comme s'ils n'étaient que des techniciens en quelque sorte, des exécutants ; ils ne sont aux ordres de personne, mais, en réalité, ils sont aux ordres *d'un objectif de recherche* qu'ils se sont préalablement fixé.

Pourtant, la découverte scientifique vient tout aussi bien de la liberté de la réflexion, du hasard ; la fulgurance d'une intuition ne se produit pas toujours sur la pailleasse mais à l'improviste, lors de moments non consacrés à la recherche. Justement, la vulgarisation, comme l'enseignement, permettent de prendre de la distance, de réfléchir différemment, de gérer son temps autrement.

De même, les chercheurs devraient aussi réfléchir aux implications politiques de ce qu'ils trouvent ; j'ai préféré ne pas aborder cet aspect de l'éthique, et de m'en tenir à une réflexion sur la déontologie interne à notre métier, mais ce sont évidemment des aspects très importants de nos métiers, qui devraient également être discutés.

2 La culture scientifique

a La spécialisation

La culture d'un chercheur est constituée des enseignements qu'il a retenus des cours universitaires qu'il a suivis, des lectures d'articles de journaux spécialisés, de comptes-rendus de conférences et de livres divers, des exposés qu'il a écoutés, et de toutes les discussions avec d'autres chercheurs qu'il a rencontrés.

C'est un enseignement vivant, continu, on peut dire une formation permanente, quoique non formatée. Nous ne cessons jamais d'apprendre, ne serait-ce que pour nous tenir au courant des derniers développements, des dernières découvertes, des derniers résultats dans notre spécialité.

Paradoxalement, nous devenons tous, plus ou moins rapidement, des spécialistes d'un sujet particulier, pour lequel nous acquérons avec le temps une expérience solide. Certains chercheurs ne changent jamais de sujet mais cependant en découvrent régulièrement de nouveaux aspects, qui peuvent parfois ouvrir de nouveaux champs

de la physique.⁹ J'ai personnellement connu un parcours plus rare, puisque plus mouvementé. Après avoir étudié longtemps les quasi-cristaux (jusqu'en 1999), j'ai commencé un tout nouveau travail sur le groupe de renormalisation, à partir de 2001. Et cependant, toute mon expérience concernant les phases incommensurables m'a alors servi, pour l'étude d'une échelle de spin (cf. mon manuscrit d'habilitation).

Une des caractéristiques d'un chercheur actif et une de ses qualités primordiales est d'être justement bien informé. Pour pouvoir le rester de façon permanente, un de ses outils privilégiés est la veille bibliographique.

b Le travail de veille bibliographique

C'est une des activités les plus admirables des chercheurs. Ils exercent une veille bibliographique, en dépit de toutes les contraintes qu'ils subissent (enseignement, projets A.N.R., réunions, etc.). Beaucoup de mes collègues ont une règle d'or : ils lisent chaque matin, sur leurs sites préférés, les titres des dernières publications, et examinent celles qui les intéressent ou leur semblent importantes.

Un journal-club a été animé pendant deux ans au laboratoire, dans le domaine de la physique mésoscopique, qui permet de rendre compte, chaque semaine, ensemble, des publications les plus remarquables ou les plus pertinentes du domaine.

Mais, ce tableau presque idyllique doit être plus que nuancé : il ne tient pas compte de la prolifération de la presse scientifique. Dans mon laboratoire, la plupart des chercheurs se contentent, face à l'explosion actuelle d'articles, de lire les publications quotidiennes dans arXiv-condmat, généralement dans leur seule spécialité, ou encore celles de Physical Review Letters (alors même que certaines spécialités n'y sont jamais représentées).

Ainsi, les chercheurs ne suivent souvent que la presse spécialisée dans leur propre domaine. Pourtant, certains de leurs collègues peuvent, à l'occasion, publier dans des revues relevant d'autres domaines. Par exemple, l'article [8] est publié dans Journal of Physics A. Malgré l'excellente réputation de ce journal, il ne sera pas connu de la plupart de mes collègues.¹⁰ Par ailleurs, je dois préciser que j'ai découvert l'immense bibliographie afférente à ce sujet tardivement, malgré de vaines et longues heures de recherche.

Ceci, et la trop grande spécialisation des conférences auxquelles assistent les chercheurs, explique peut-être en partie les lacunes que l'on observe dans la diffusion scientifique, un problème assez bien connu sur lequel je voudrais revenir.

c La méconnaissance des découvertes récentes

Pendant mes études en D.E.A., G. Ripka nous cita plusieurs fois en exemple le théorème de Goldstone¹¹ : « Dix ans après sa découverte, on pouvait encore

9. A. Fert a raconté, juste avant de recevoir son prix Nobel, lors de la conférence ISCOM'07, comment il n'avait fait que poursuivre ses travaux de thèse durant toute sa vie. Pourtant, il a également ouvert la voie à la spintronique, une physique nouvelle, grâce à ses travaux sur le magnétisme.

10. Ou plutôt, il n'aurait jamais pu l'être, sans les publications en ligne, et, plus précisément, la possibilité offerte, sur arXiv, par les cross-list de montrer son travail à sa propre communauté.

11. Pour faire court : à toute symétrie continue est associé un boson, dit de Goldstone, de masse nulle (c'est à dire qu'il peut se propager librement, sans coût énergétique) ; à toute brisure de cette

trouver des articles, certes corrects, mais qui ignoraient le théorème de Goldstone et refaisait l'intégralité des démonstrations dans leur cas particulier. » nous disait-il en substance.

On se rend compte quotidiennement que cet exemple est loin d'être accidentel et reflète une véritable plaie de notre milieu. Malgré tous les séminaires, les conférences, malgré tout notre travail de veille bibliographique, les résultats les plus importants mettent plus de dix ans à diffuser efficacement dans le milieu. Je pourrais citer de multiples exemples.

C'est lié à la taille de la communauté scientifique : le nombre de chercheurs dans le monde est pléthorique, et les découvertes importantes si fréquentes qu'il serait probablement impossible, même avec une autre organisation, d'être au courant de toutes.¹² À titre de comparaison, la culture littéraire d'un professeur de lettres, spécialiste du 19^{ème} siècle, ou l'érudition d'un chercheur en histoire, nous surprendraient, tant elles sont étendues, complètes, jamais en défaut sur les dernières publications dans leur domaine. Cela reflète simplement la taille plus modeste de ces milieux littéraires, plus humaine oserai-je dire.

α Un exemple personnel

J'ai publié en 1998 un article traitant du calcul des bandes électroniques par la méthode des liaisons fortes *quand on intègre tous les effets dus à la non-orthogonalité entre les états orbitaux* [101].

Certes, je me plaçais dans un contexte plus particulier, puisque [101] et [102] traitent des transferts de charge entre atomes ; mais, en réalité, l'article est très général et la méthode peut s'appliquer à toutes les situations.¹³

Or, en discutant récemment avec François Crépin, qui a fait sa thèse au laboratoire sous la direction de Pascal Simon, j'ai pu constater que la non-orthogonalité des états orbitaux reste une préoccupation quand on fait des calculs en liaisons fortes ; et que l'on utilise des approximations par défaut, alors que la solution développée dans [101] est techniquement simple.

symétrie, dans l'état fondamental, correspond une modification du boson, qui acquiert une masse non nulle.

12. Toutes les découvertes valables n'obtiennent pas d'être publiées dans Physical Review Letters, si tant est que les auteurs le veulent, certains préfèrent Nature, d'autres des revues plus spécialisées...

13. Je me fonde dans [101] sur la métrique non euclidienne adaptée à la base orbitale choisie. Il existait, au préalable, une méthode plus lourde, consistant à construire, pour toute suite de fonction, une suite duale, on pourrait dire réciproque, puisqu'elle épouse la première selon des règles d'orthogonalité. Cette méthode a été, par exemple, suggérée par Haydock [103].

Première partie

Supraconductivité dans les sels de Bechgaard

A Rappels historiques et théoriques

1 Les matériaux supraconducteurs non conventionnels

a La recherche de nouveaux matériaux

Depuis un papier de London [104], plus tard ceux de Fröhlich [30] et de Little [105], plus tard encore ceux de Langer & Ambegaokar [106], repris par Mc Cumber et Halperin [107] ou Kramer et Baratoff [108], encore après celui de Abrikosov [109], les théoriciens ont imaginé des mécanismes supraconducteurs spécifiques aux systèmes de basse dimension. Dès à présent, je distinguerai cette supraconductivité, dite non conventionnelle, et les supraconducteurs conventionnels.

Je reviendrais par la suite sur ces modèles, et voudrais, pour l’instant rappeler l’incroyable frénésie qui s’est emparée des expérimentateurs, à partir des années 50, dans la recherche de matériaux à la fois supraconducteurs et possédant une structure quasi-unidimensionnelle ou quasi-bidimensionnelle.

Le premier supraconducteur organique découvert est perylène- Br_x [110]. La structure $A15$ que l’on a exhibée dès les années 50 dans divers matériaux, comme Nb_3Ge [111, 112], V_3Si [113], etc., présente, pour les électrons du niveau 3d, une structure assez unidimensionnelle. Ces matériaux se sont cependant avérés des supraconducteurs plutôt conventionnels.

Dans les années 70, on a cru découvrir une phase supraconductrice dans le composé $TTF-TCNQ$ [114–116] mais cette découverte a été finalement infirmée [117, 118]. Bien que présentant une paraconductivité anormale [119], le composé $TMTSF-DMTCNQ$ n’est pas non plus supraconducteur [120].

Une autre famille de matériaux, les chalcogénides, dits phases de Chevrel, a également beaucoup retenue l’attention, dans ces mêmes années 70. Ce sont les composés MMo_6S_8 avec $M = Sn, Pb, La$ [121]¹, ou encore MMo_6Se_8 [122] ou encore $TRMo_6S_8$ [123] (où TR veut dire une terre rare). Ils se sont avérés quelques années plus tard être des supraconducteurs non conventionnels [124].

Trois grandes familles de matériaux supraconducteurs ont été découvertes au début des années 80 : d’abord, les supraconducteurs organiques, comme $(TMTSF)_2PF_6$ [125, 126], $(TMTSF)_2(ClO_4)_2$ [127, 128], ou plus tard $(TMTSF)_2(ReO_4)_2$ sous pression [129]; puis les systèmes dits de fermions lourds, $CeCu_2Si_2$ [130],

1. Dans cette référence, il s’agit plutôt du composé MMo_6S_7 qui est étudié.

UPt_3 [131, 132], UBe_{13} [133], etc; enfin les cuprates comme $LaBaCuO$ [134–136], $YBa_2Cu_3O_7$ [137] ou $LaSrCuO$ [138, 139].²

Depuis, on a trouvé de la supraconductivité dans les fullerènes (en particulier les nanotubes de carbone exhibent une $T_c = 15K$ [140], mais le premier fullerène supraconducteur date de 1991 [141, 142]) et les Ruthenates, Sr_2RuO_4 [143], etc.

Bien qu’arrivés plus tard, les cuprates se sont avérés être les systèmes les plus prometteurs pour la température critique : on a ainsi découvert des matériaux supraconducteurs à des températures atteignant $T_c \sim 105K$ [144, 145].

Tous ces matériaux exhibent des propriétés contraires aux supraconducteurs ordinaires, notamment sous fort champ magnétique. Il s’agit pour la plupart d’entre eux de matériaux quasi-unidimensionnels. Un matériau organique dérivé du $TTF-TCNQ$ présente, lui, une phase supraconductrice bidimensionnelle, c’est $(BEDT-TTF)_2Cu(NCS)_2$ [146].

b Les sels de Bechgaard

Je vais m’intéresser plus particulièrement aux composés comme $(TMTSF)_2ClO_4$ ou $(TMTSF)PF_6$, dits sels de Bechgaard car ils ont été synthétisés au Danemark dans l’équipe de Bechgaard [147]. On peut remplacer l’anion (l’hexafluorophosphate PF_6 ou le perchlorate ClO_4) par des sels très divers, de même que le tétraméthyl-tétraseféna-fulvalène $TMTSF$ par le tétraméthyl-tétrathia-fulvalène $TMTTF$. Cela dit, il a été montré que le diagramme de phase était universel, à une translation sur l’axe des pressions près [148]. Les “sels de Bechgaard” cristallisent avec un taux de défauts remarquablement bas.

Ces matériaux germent sous forme de cristaux en forme d’aiguilles, ce qui rend certaines expériences, pourtant cruciales, comme la mesure des composantes du tenseur de conductivité σ_{bb} ou σ_{cc} très difficiles, contrairement à celle de σ_{aa} , où a, b, c représente les trois directions anisotropes, classés selon l’importance décroissante des interactions (autrement dit, a est la direction du système quasi-unidimensionnelle = celle de plus facile aimantation, etc.). En effet, la direction de croissance des aiguilles est selon l’axe a .

Le caractère quasi-unidimensionnel de ces sels est bien vérifié expérimentalement. On mesure l’anisotropie par la valeur des intégrales de transfert t_a, t_b, t_c selon chaque direction, on trouve sensiblement les rapports $t_a/t_b \sim 10$ et $t_b/t_c \sim 10$. On mesure par ailleurs les rapports de conductibilité électrique $\sigma_{aa}/\sigma_{bb} \sim 100$ et $\sigma_{bb}/\sigma_{cc} \sim 100$ [147, 149, 150]. Ces mesures expérimentales, notamment le rapport $\sigma_i/\sigma_j = (t_i/t_j)^2$, sont confirmées de façon théorique [151].

2. Je ne donne pas la structure exacte des composés, car plusieurs structures sont supraconductrices, par exemple $La_{1-x}Ba_xCuO_3$ ou $La_{1-x}Sr_xCuO_3$ d’une part, et les perovskites $La_{2-x}Ba_xCuO_4$ ou $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ d’autre part.

Voici l'image des molécules *TMTSF* vues de côté ou de haut :

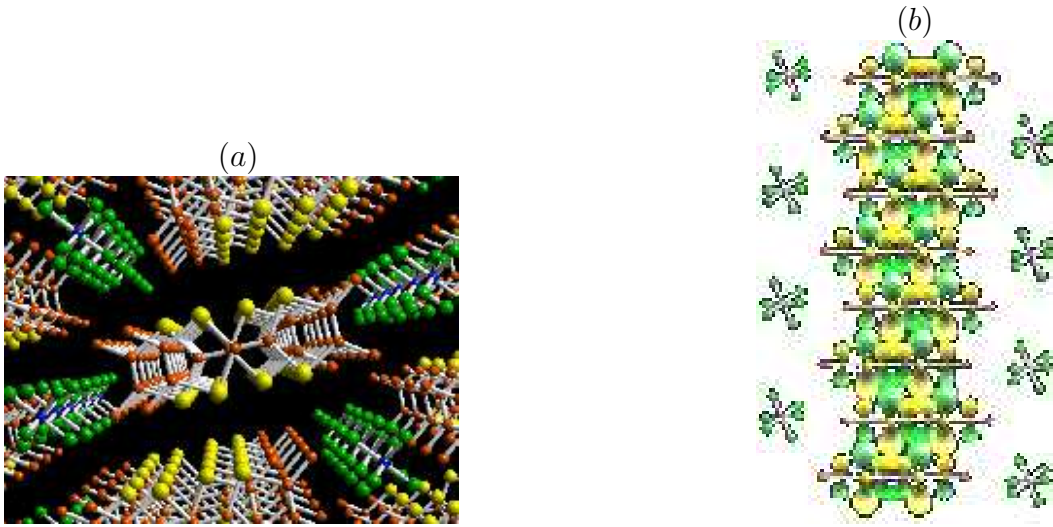


FIGURE 1 – Molécule *TMTSF* vue de haut (*a*) ou de profil (*b*). Sur la première figure, on observe la structure zigzag dans la direction *a* (la plus conductrice). Sur la seconde, on observe l'empilement périodique des chaînes précédentes, dans les autres directions du plan (*b, c*).

2 Approches théoriques

L'état fondamental et les excitations dans ces matériaux ont été analysés à travers de nombreux modèles théoriques. Un des mécanismes les plus importants qu'il faut en retenir est l'instabilité de Peierls, qui a été prédite dès les premiers modèles à une dimension.

a Modèles unidimensionnels

α Modèle de Fröhlich

Le premier modèle prédisant une supraconductivité spécifiquement unidimensionnelle est dû à Fröhlich [30]. Il se base sur l'apparition d'une distorsion du spectre au niveau de la surface de Fermi $k = \pm k_f$, décrite par Peierls [152], elle correspond à une ouverture de gap, comme montré sur la figure suivante :

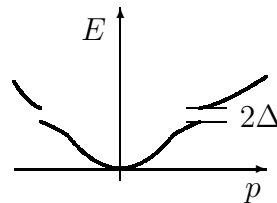


FIGURE 2 – Dispersion avec ouverture de Peierls au niveau de Fermi.

Le modèle imaginé par Fröhlich est facile à se représenter. À l'ouverture du gap correspond une modulation du réseau (Onde de Densité de Charge) de vecteur d'onde $2k_f$. Fröhlich a imaginé que la période correspondante π/k_f serait incommensurable avec la période a du réseau. Par la suite, on a appelé « *systèmes incommensurables* » les systèmes tels que $a k_f/\pi \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$ et « *systèmes commensurables* » ceux tels que $a k_f/\pi \in \mathbb{Q}$. Avec cette hypothèse d'incommensurabilité, Fröhlich a montré que la modulation pourrait glisser sans énergie, constituant ainsi un mode supraconducteur de type original.

Cette modulation est un phonon d'un type particulier, appelé soliton. Ce glissement sans frottement pourrait se comprendre, quelques années plus tard, comme un boson de Goldstone de masse nulle, lié à une invariance translationnelle [153].

Ce modèle semble paradoxal, car le système devrait être semi-conducteur. L'idée est que le soliton est une excitation dont l'énergie se situe à l'intérieur du gap de Peierls. Il y a confusion, assimilation, entre ce gap et un gap supraconducteur. Pour s'assurer de l'existence du mode supraconducteur, Fröhlich compare l'énergie de distorsion de la surface de Fermi, correspondant à l'ouverture du gap, et l'énergie du phonon, correspondant au glissement. L'énergie totale résulte de cette compétition, et donne une condition $\hbar\omega_{\max}c/(2\xi) < 4e^{-3F\nu/2} < 1$, où ν est la densité d'électrons par site atomique, c est la vitesse du son, ξ l'énergie des électrons libres dans l'état fondamental et le gap s'écrit $\Delta = 8\xi e^{-3F\nu/2}$ (ce qui définit implicitement le paramètre F).

Ce modèle a été fondateur, il a permis l'éclosion de nouvelles idées, il est en particulier précurseur pour ce qui concerne la distorsion de Peierls, qui est à rapprocher des problèmes d'emboîtement qu'on étudiera plus loin, et pour ce qui concerne les corrélations entre les excitations de spin (liées à l'ouverture du gap) et ce mécanisme de supraconductivité non conventionnel. Malgré cela, son modèle comportait quelques naïvetés, qui le rendent inapplicable en soi :

Tout d'abord, il se trouve que peu de matériaux s'avèrent incommensurables. Certes, il en existe, par exemple l'oxyde de cuivre $Sr_{14-x}Ca_xCu_{24}O_{41}$, mais ils sont rares et minoritaires.

Ensuite et surtout se pose le problème de l'ancrage de la modulation au réseau. Aubry a certes montré qu'il existait un phénomène d'ancrage intrinsèque quand le couplage électron-phonon est suffisamment fort, ce qui signifie qu'il devrait exister des systèmes, avec un couplage électron-phonon faible, où l'on observerait le mode de glissement de Fröhlich.

Mais, en pratique, les échantillons ne sont jamais assez propres pour empêcher un autre mécanisme d'ancrage par les défauts de structure, et la transition d'ancrage intrinsèque prédite par Aubry n'a jamais pu être observée. Il en résulte que la supraconductivité observée expérimentalement n'est pas explicable par le modèle de Fröhlich, même s'il a ouvert, je le répète, la voie à de nouvelles interprétations.

β Modèle de Little

Une dizaine d'année plus tard, Little [105] a proposé un modèle assez similaire. Il se base sur les équations BCS [154]. Plus précisément, il adapte la condition (34.21) de [109], correspondant au calcul à température nulle, qu'il adapte à une dimension.

Son calcul est assez approximatif, puisqu'il introduit le gap manuellement, par

la substitution $\varepsilon \rightarrow \sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}$ (je modifie la notation) et qu'il suppose (comme dans [109]) un potentiel constant dans ce calcul.

Little admet d'emblée que l'ouverture du gap génère une compétition entre le mécanisme de semi-conductivité et celui de supraconductivité lors de l'ouverture du gap. Il considère le gap supraconducteur des équations BCS, bien qu'il l'associe –sans se poser de question– à la modulation de Peierls; Schulz [155] a montré les analogies entre ces deux mécanismes, qui ne sont cependant pas réductibles à un mécanisme unique.

Cet article a eu un retentissement très important parce que Little y prévoit une température de transition supraconductrice $T_c = \sqrt{\frac{M}{m_e}} T_{c \text{ BCS}}$ qui pourrait atteindre 2000 K [156]. Ce facteur n'est pourtant pas démontré mais simplement introduit de façon *ad hoc*.

γ Modèle de Ginzburg-Landau

Par la suite, Langer et Ambegaokar [106] ont nettement amélioré le travail de Little. Leur modèle est basé sur une compétition entre les fluctuations thermiques et le courant supraconducteur. Ils ne différencient plus du tout le gap supraconducteur et le gap de Peierls, ils étudient directement la stabilité d'un gap lorsqu'on inclut les fluctuations thermiques, et exhibent un critère d'existence d'un courant électrique sans résistance.

On peut citer le modèle de Mc Cumber & Halperin [107], et surtout celui de Kramer et Baratoff [108], qui se situent dans la continuation du précédent et représentent également des avancées considérables par rapport au modèle de Little.

δ Modèle d'Abrikosov

Bien qu'assez rapproché dans le temps, le modèle proposé par Abrikosov [109] se situe dans une philosophie presque opposée aux précédents. En effet, Abrikosov, fidèle aux travaux de Gor'kov, part du principe que la supraconductivité est en compétition avec le mécanisme d'ouverture de gap et ne peut exister que si celui-ci est inhibé. Il a par exemple montré qu'un potentiel aléatoire peut inhiber l'ouverture de Peierls [157].

Il considère les conditions de suppression de la modulation de Peierls, et vérifie ensuite la possibilité d'un courant sans résistance. Il utilise, comme Little, un modèle de champ moyen dans l'approximation BCS, mais emprunte le langage et certains résultats du groupe de renormalisation. Il suit une approche tridimensionnelle de la théorie BCS, mais par des astuces qu'il justifie de façon pragmatique, calcule à une dimension d'espace.

b Modèle quasi-unidimensionnel

L'exemple précédent du calcul d'Abrikosov illustre un aspect fondamental : la théorie BCS est intrinsèquement une théorie bi- ou tridimensionnelle. On peut le comprendre de la façon suivante.

À une dimension, l'appariement électron-électron de Cooper, qui préside au mécanisme supraconducteur, respecte la symétrie $k \rightarrow -k$, tandis que l'appariement électron-trou de Peierls, qui préside au mécanisme Onde de Densité de Charge, respecte la symétrie $k \rightarrow k - 2k_f$. Les deux sont pareillement instables, ils sont en

compétition antagoniste (si $k \rightarrow k + \delta k_f$ favorise un des mécanismes, l'autre sera favorisé par $k \rightarrow k - \delta k_f$).

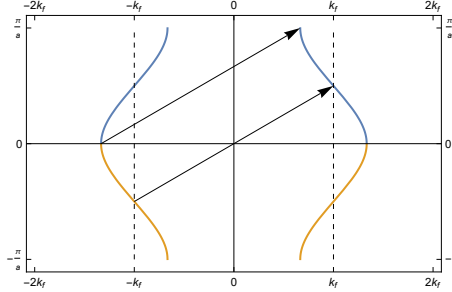


FIGURE 3 – Surface de Fermi **ouverte** d'un quasi-unidimensionnel.

Dans un système quasi-unidimensionnel, qui ne peut être défini qu'en dimension supérieure ou égale à deux, la surface de Fermi reste ouverte, comme représenté sur la figure 3. La symétrie d'appariement supraconducteur devient $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ et reste parfaite ; la symétrie liée aux modulations Onde de Densité de Charge devient $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{k}_0$, où le vecteur \mathbf{k}_0 est choisi pour optimiser le mécanisme. C'est la symétrie d'emboîtement et \mathbf{k}_0 est le vecteur d'emboîtement. On constate qu'à la différence du cas unidimensionnel, l'emboîtement est toujours imparfait, et le choix du vecteur d'emboîtement, généralement $\mathbf{k}_0 = \begin{pmatrix} 2k_f \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ ou $\mathbf{k}_0 = \begin{pmatrix} k_f \\ k_f \\ 0 \end{pmatrix}$, dépend de chaque système et des choix de paramètres.

En comparant le cas unidimensionnel et le cas quasi-unidimensionnel, on observe que le mécanisme supraconducteur est favorisé dans ce dernier, ce qui justifie la spécificité du cas strictement unidimensionnel du point de vue *théorique*.

D'un point de vue expérimental, les choses sont plus simples : aucun matériau ne peut être strictement unidimensionnel. La question est donc : peut-on cependant le modéliser par un système à une dimension ? Pour ce qui concerne les modèles BCS, la discussion précédente nous conduit à exclure un modèle à une dimension stricte. Pour ce qui concerne la supraconductivité de Fröhlich, la question reste ouverte mais, malgré son originalité, cette théorie n'a jamais pu s'appliquer à un matériau réel.

c Transition dimensionnelle 1d/3d

Revenons aux sels de Bechgaard, qui nous intéressent plus particulièrement ici. On a observé expérimentalement une transition entre un régime unidimensionnel et un régime tridimensionnel, quand on abaisse la température. La température de transition est T^* de l'ordre de 100 K.

Cette transition illustre assez bien le propos de la section précédente. Aux basses températures auxquelles on observe la supraconductivité, ces systèmes sont tridimensionnels, et il est vain de chercher à appliquer un modèle unidimensionnel, comme le modèle de Fröhlich. Comme on le verra plus loin, sous champ (même

pas trop fort, cf. [155] ou [158]), les effets orbitaux sont dominants, ce qui confirme l'aspect tridimensionnel de la supraconductivité.

Cette tridimensionalité n'exclut pas une forte anisotropie des trajectoires électroniques, en présence d'un champ magnétique, même faible. Lebed [159, 160] puis Héritier [161] ont montré que la trajectoire est une hélice qui s'enroule autour de la direction du champ magnétique (voir aussi [162]).

3 Échelle fermionique

J'ai plus particulièrement travaillé sur une échelle fermionique. C'est le système quasi-unidimensionnel le plus simple, il permet une approche analytique exacte, qui n'est pas possible pour les autres systèmes quasi-unidimensionnels, comme par exemple des chaînes faiblement couplées. En pratique, j'ai réalisé mes premiers calculs de renormalisation en parallèle avec Christoph Nickel, qui les faisait sur des chaînes couplés, et la comparaison de nos résultats a prouvé la validité de ce choix.

a Description

α Description dans l'espace réel

Une échelle fermionique est constituée par des liens longitudinaux entre particules d'une même chaîne et des liens transversaux entre particules sur deux montants différents. Les particules sont entièrement caractérisées par leur spin ($s = 1/2$ et $s_z = \pm 1/2$), comme représenté ici :

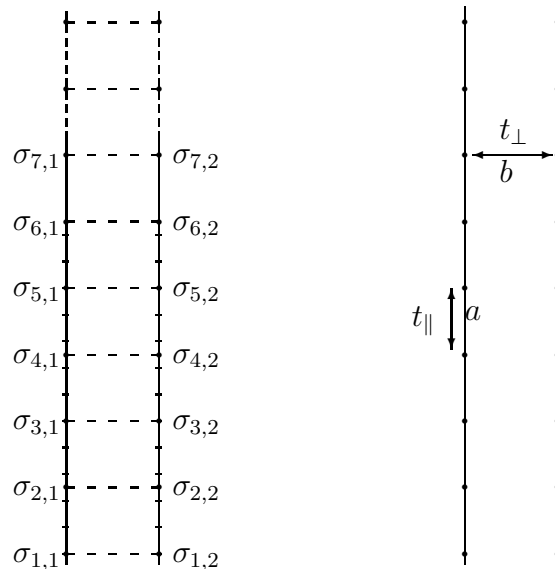


FIGURE 4 – Échelle fermionique. Les moments de spin s'écrivent σ_{ij} où i décrit la position d'un site sur chaque chaîne (montant longitudinal) et $j = 1, 2$ distingue les deux montants. La distance interchaînes est b et celle intra-chaîne a . Les intensités des liens correspondantes sont t_{\perp} et t_{\parallel} .

β Description dans l'espace réciproque

La relation de dispersion d'un système quasi-unidimensionnel de chaînes faiblement couplées, défini à deux dimensions, s'écrit

$$\varepsilon(K) = -t_{\parallel} \cos(ak_{\parallel}) - t_{\perp} \cos(bk_{\perp}) \quad (1)$$

où on écrit l'impulsion à deux dimensions $K = (k_{\parallel}, k_{\perp})$, a et b sont les distances entre sites définies précédemment. t_{\parallel} et t_{\perp} , les intensités, caractérisent le recouvrement entre orbitales voisines (la première entre orbitales sur une même chaîne, la seconde entre orbitales sur les deux montants). On notera partout, pour unifier les notations, des majuscules pour les vecteurs à deux dimensions ; généralement, les minuscules désigneront les composantes parallèles.

La surface de Fermi est ouverte, comme sur la figure suivante :

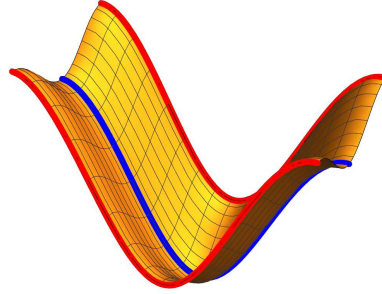


FIGURE 5 – Surface de Fermi d'un quasi-unidimensionnel (défini en dimension 2). On y a représenté la courbe pour $k_{\perp} = 0$ (en bleu) et celles pour $k_{\perp} = \pm\pi/b$ (en rouge), qui correspondent à la surface de Fermi d'une échelle fermionique.

Le cas d'une échelle fermionique correspond aux deux courbes sinusoïdales représentées en bleu et rouge car le moment k_{\perp} prend seulement deux valeurs, $k_{\perp} = 0$ et $k_{\perp} = \pi/b$. Les moments sont définis sur deux bandes de dispersion et la surface de Fermi est constituée de quatre points. Par contre, le moment k_{\parallel} défini le long des chaînes est une variable continue définie sur $[0, 2\pi/a]$.

b Hamiltonien de Hubbard

α Linéarisation de la relation de dispersion

Reprenons les deux bandes sinusoïdales d'une échelle fermionique :

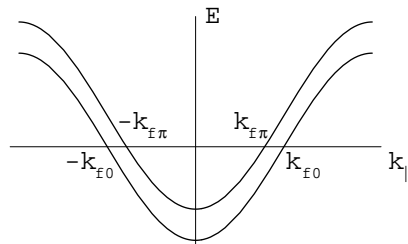


FIGURE 6 – Relation de dispersion d'une échelle fermionique.

On appelle bande 0 celle qui croise l'axe des abscisses en k_{f0} et $-k_{f0}$, elle correspond à $k_{\perp} = 0$; on appelle bande π celle qui croise l'axe des abscisses en $k_{f\pi} < k_{f0}$ et $-k_{f\pi}$, elle correspond à $k_{\perp} = \pi/b$. On les linéarise, comme l'a fait Sólyom [39] pour une seule,

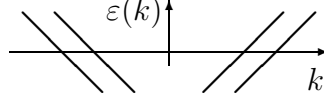


FIGURE 7 – Relation de dispersion linéarisée.

On trouve bien quatre points de Fermi, $\pm k_{f0}$ et $\pm k_{f\pi}$. Les vitesses de Fermi sont définies pour les k vérifiant $\varepsilon(k) = 0$ et valent exactement

$$v_{f0} = 2t_{\parallel} \sin(ak_{f0}) \quad v_{f\pi} = 2t_{\parallel} \sin(ak_{f\pi})$$

avec

$$k_{f0} = \frac{2 \operatorname{Arccos}(-t_{\parallel}/t_{\perp})}{a} \quad k_{f\pi} = \frac{2 \operatorname{Arccos}(t_{\parallel}/t_{\perp})}{a};$$

soit $(k_f, 0)$ le milieu des points de Fermi $(k_{f0}, 0)$ et $(k_{f\pi}, 0)$, on trouve exactement $k_f = \pi/(2a)$ ainsi que la différence entre niveaux

$$\Delta k_f \equiv k_{f\pi} - k_{f0} = \frac{2 \operatorname{Arcsin}(t_{\parallel}/t_{\perp})}{a}.$$

Expérimentalement, $t_{\perp}/t_{\parallel} \sim 1/10$, on peut écrire plus simplement

$$\Delta k_f \approx \frac{2t_{\perp}}{at_{\parallel}};$$

on peut également écrire une vitesse de Fermi unique $v_f \approx 2t_{\parallel}a \sin(ak_f)$; sur la figure 7, on vérifie directement la relation

$$\Delta k_f v_f \approx 4t_{\perp}.$$

β Hamiltonien cinétique

Le hamiltonien cinétique s'écrit, en utilisant la relation de dispersion linéarisée et en notant $\Psi_{\sigma}(K, \theta) \equiv R_{\theta\sigma}(k)$ (resp. $\Psi_{\sigma}(K, \theta) \equiv L_{\theta\sigma}(k)$), avec $K = (k, \theta)$, $\theta = 0, \frac{\pi}{b}$ et $k > 0$ (resp. $k < 0$) les opérateurs d'annihilation d'un électron se propageant vers la droite (resp. vers la gauche), et de même $\Psi^{\dagger} = R^{\dagger}$ (resp. L^{\dagger}) pour les opérateurs de création,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{cin}} = & \sum_{\sigma} v_f \left(\sum_k (k - k_{f0}) R_{0\sigma}^{\dagger}(k) R_{0\sigma}(k) + \sum_k (k - k_{f\pi}) R_{\pi\sigma}^{\dagger}(k) R_{\pi\sigma}(k) \right. \\ & \left. - \sum_k (k + k_{f0}) L_{0\sigma}^{\dagger}(k) L_{0\sigma}(k) - \sum_k (k + k_{f\pi}) L_{\pi\sigma}^{\dagger}(k) L_{\pi\sigma}(k) \right) \end{aligned} \quad (2)$$

où on a utilisé $\varepsilon(k) = \pm(k - k_{f\theta})$ avec $\pm = +$ pour les termes $R_{\theta}^{\dagger} R_{\theta}$ et $\pm = -$ pour les termes $L_{\theta}^{\dagger} L_{\theta}$.

γ **Hamiltonien d'interaction**

On a choisi le terme d'interaction de Hubbard, qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{K_1, K_2, K'_1, K'_2 \\ K_1 + K_2 = K'_1 + K'_2}} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} & \left(\mathcal{G}_1(K_1, K_2, K'_2, K'_1) R_{K'_1 \sigma_1}^\dagger L_{K'_2 \sigma_2}^\dagger R_{K_2 \sigma_2} L_{K_1 \sigma_1} \right. \\ & \left. + \mathcal{G}_2(K_1, K_2, K'_2, K'_1) R_{K'_1 \sigma_1}^\dagger L_{K'_2 \sigma_2}^\dagger L_{K_2 \sigma_2} R_{K_1 \sigma_1} \right) \end{aligned} \quad (3)$$

où \mathcal{G}_α est le couplage en notation g-ologique.³

3. \mathcal{G}_1 correspond à une diffusion arrière, \mathcal{G}_2 une diffusion avant, \mathcal{G}_3 un terme dit *umklapp* c'est à dire incluant un phonon du réseau qui absorbe une impulsion du réseau réciproque, et \mathcal{G}_4 un terme d'auto-interaction, qui ne peut contribuer que dans la renormalisation du niveau de Fermi. En notation sommaire, \mathcal{G}_3 gouverne des termes $R^\dagger R^\dagger LL$ ou $L^\dagger L^\dagger RR$ et \mathcal{G}_4 des termes $R^\dagger R^\dagger RR$ ou $L^\dagger L^\dagger LL$.

B Renormalisation fonctionnelle pour une échelle fermionique

Une des approches que j'ai suivie consiste à utiliser le groupe de renormalisation, qui permet de distinguer les termes d'interaction dominants. L'un des points forts de cette approche est qu'elle intègre des effets à plusieurs particules, tandis que toutes les autres approches reviennent à un hamiltonien à un état (qui ne comprend que des effets à deux particules au maximum).

1 Groupe de renormalisation

Le terme de *groupe* est historique. On verra plus loin qu'il ne correspond pas aux approches modernes que j'ai suivies.

a Approche Wilsonnienne

L'idée initiale est d'appliquer un changement d'échelle à l'ensemble des variables du hamiltonien, de façon à préserver les lois physiques. Plus précisément, on applique une inflation $x \rightarrow x/\lambda$, $y \rightarrow y/\lambda$, $z \rightarrow z/\lambda$, dans l'espace réel, avec $\lambda > 1$. Les interactions ne sont alors plus définies à l'échelle microscopique mais à une échelle plus grande, par conséquent, les états qui les subissent ne sont plus les particules élémentaires caractérisées par leur spin $s = 1/2$, mais des objets plus grands, qui possèdent un spin global égal à la somme des moments élémentaires. D'autres facteurs d'échelle interviennent, pour assurer la cohérence de la transformation globale.

Dans un papier historique, Wilson [10] utilise un facteur discrétisé. En l'occurrence, il étudie un réseau de dimension deux et regroupe les particules deux par deux ($1 \times 1 + 4 \times \frac{1}{4}$), ce qui tourne le système d'un angle $\pi/2$ et lui fait subir une inflation d'un facteur $\sqrt{2}$.

On voit clairement dans ce modèle simple que les nouvelles interactions définies après le changement d'échelle ne décrivent pas exactement le même système ; certaines interactions petites y sont négligées, tandis que les interactions dominantes sont préservées.

Ce processus peut être réitéré et converge vers un point fixe. Les nouvelles interactions ainsi définies sont les interactions effectives. Dans une approche continue, on peut montrer que les interactions effectives sont celles qui prennent en compte les effets d'auto-interaction successifs et que les interactions négligées ne jouent aucun rôle. Dans certains cadres, les résultats du groupe de renormalisation sont

exacts ; par exemple les coefficients critiques universels qu'on peut déterminer de cette façon.¹

Dans ce même article [10], Wilson présente la méthode générale de renormalisation définie dans l'espace réciproque. Elle diffère de la renormalisation définie dans l'espace réel. On exprime la fonction de partition, que l'on doit minimiser, à l'aide de l'action \mathcal{S}_Λ :

$$\mathcal{Z}_\Lambda = \int \exp(-\mathcal{S}_\Lambda[\phi]) d\phi \quad \text{avec } \mathcal{S}_\Lambda[\phi] = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \mathcal{H}[\phi(k)] dk$$

où les intégrales² dans \mathcal{S}_Λ admettent une coupure ultra-violette $|k| \leq \Lambda$. Le processus de renormalisation s'écrit alors $\mathcal{S}_\Lambda \rightarrow \mathcal{S}_{\Lambda/2}$, et on utilise la formule

$$\mathcal{Z}_{\Lambda/2} = \prod_{\Lambda/2 < \|K\| < \Lambda} \int d\phi \exp(-\mathcal{S}_\Lambda[\phi(K)])$$

où on note que l'intégration est hors de l'exponentielle.

Soit T l'opérateur de renormalisation. Par exemple, $T(\mathcal{S})$ est la transformation précédente. On omet provisoirement l'indice de la coupure Λ et $\mathcal{S}_\ell = \underbrace{T(T(\dots(T(\mathcal{S})\dots))}_{\ell \text{ termes}}$ est l'action après ℓ transformation. L'action effective \mathcal{S}_\star est le point fixe de la transformation et vérifie

$$T(\mathcal{S}_\star) = \mathcal{S}_\star . \tag{1}$$

Wilson obtient alors, par un développement perturbatif, des équations différentielles des couplages \mathcal{G} exprimées à l'aide de la fonction analytique Ψ (souvent paire)

$$\frac{d\mathcal{G}}{d\ell} = \Psi(\mathcal{G}) .$$

b Structure de groupe

Dans l'approche initiale de Wilson, qui est héritée de la théorie quantique des champs, le paramètre de coupure ultra-violet Λ est utilisé uniquement pour régulariser les intégrales divergentes du développement en boucles. Il n'apparaît pas dans les équations de renormalisation. Il y a bien une structure de groupe, que j'ai en particulier étudiée dans les travaux de Sólyom [39]. Cette approche a, notamment, été développé, au départ, par Kosterlitz [164], puis Nelson et Halperin [165], qui utilisent cependant un développement en fonction de $e^{-E/(k_B T)}$ plus spécifique.

Pour prendre un exemple simple, considérons une quantité Γ , qui dépend de l'énergie. On écrira $\Gamma(E/\Lambda, \ell)$, où on a introduit une énergie adimensionnée E/Λ , grâce à la coupure Λ , qui est l'énergie nue au commencement de la renormalisation,

1. Ce n'est pas vrai de façon générale, lire par exemple [163].

2. J'ai écrit un terme générique qui ne dépend des états qu'en un point de l'espace réciproque, en réalité les intégrales sont plus complexes. Un terme en ϕ^4 s'écrirait, avec une condition de conservation de l'impulsion, $\int_{[-\Lambda, \Lambda]^4} \phi(k_1)\phi(k_2)\phi(k_3)\phi(k_4)\delta(k_1 + k_2 + k_3 + k_4)dk_1dk_2dk_3dk_4$. De plus, j'ai choisi un espace réciproque de dimension 1 pour simplifier l'expression.

et ℓ est le paramètre de renormalisation déjà défini. On introduit le facteur z qui décrit la renormalisation de Γ pendant un processus :

$$\Gamma\left(\frac{E'}{\Lambda}, \ell'\right) = z\left(\frac{E'}{E}, \ell\right)\Gamma\left(\frac{E}{\Lambda}, \ell\right)$$

où les quantités primées sont celles définies après le processus. On notera qu'on peut utiliser ce formalisme de façon continue, mais on va, au contraire, itérer cette opération discrète :

$$\begin{aligned}\Gamma\left(\frac{E''}{\Lambda}, \ell''\right) &= z\left(\frac{E''}{E}, \ell\right)\Gamma\left(\frac{E}{\Lambda}, \ell\right) \\ &= z\left(\frac{E''}{E'}, \ell'\right)\Gamma\left(\frac{E'}{\Lambda}, \ell'\right) \\ &= z\left(\frac{E''}{E'}, \ell'\right)z\left(\frac{E'}{E}, \ell\right)\Gamma\left(\frac{E}{\Lambda}, \ell\right)\end{aligned}$$

d'où finalement

$$z\left(\frac{E''}{E'}, \ell'\right) = z\left(\frac{E''}{E}, \ell\right) / z\left(\frac{E'}{E}, \ell\right). \quad (2)$$

C'est une structure de groupe sur les coefficients z . L'équation (2) est très contraignante, parce qu'elle est vraie $\forall(E, \ell)$. Sóllyom a utilisé (2) avec des développements en boucles. Les travaux de Giamarchi et Schulz [166–168] s'ancrent aussi sur l'approche de Wilson : ils obtiennent les équations de renormalisation en s'appuyant sur des points fixes du groupe de renormalisation.

Au contraire, le paramètre de coupure Λ est utilisé comme variable d'échelle dans les approches que je vais présenter maintenant. L'équation de point fixe (2) disparaît, et on a seulement une structure de semi-groupe, ce qui a révolutionné les méthodes de renormalisation, qui ne devraient plus s'appeler dorénavant *groupe de renormalisation*.

c Travaux pionniers de l'approche moderne

Je ne veux pas donner un historique complet mais plutôt montrer comment s'est bâtie l'approche moderne du groupe de renormalisation, telle qu'elle existe en physique des solides.

α Équations de Polchinski

Polchinski [169] est un des précurseurs de l'approche moderne. Il utilise la coupure ultra-violette Λ comme paramètre, au lieu de ℓ . Dès lors, le divorce avec l'équation de point fixe (1) se produit. De plus, il introduit une coupure infrarouge, tandis que Wilson ne discute que de Λ en tant que coupure ultra-violette.

Les équations de renormalisation sont obtenues de façon dimensionnelle et s'écrivent, à un ordre tronqué,

$$\Lambda \frac{dg_4}{d\Lambda} = \Psi(g_4, \Lambda g_6)$$

où g_4 représentent les couplages à deux particules (analogues aux \mathcal{G} précédents), les g_6 ceux à trois particules. La fonction Ψ généralise celle de Wilson, mais il faut inclure également les équations pour les g_6 , etc.

Pour une particule massive dans un champ scalaire, Polchinski obtient une fonction génératrice des équations, qui s'écrit

$$\Lambda \frac{dZ}{d\Lambda} = \int d^4p \Lambda \frac{\partial R(p^2/\Lambda^2)}{\partial \Lambda} \int d\phi \frac{\partial}{\partial \phi} \left\{ \left(\phi(p) R^{-1}(p^2/\Lambda^2) + \frac{8\pi^4}{p^2 + m^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) e^{S(\phi, \Lambda)} \right\} = 0$$

où R est une fonction de coupure et \check{f} la transposée d'une fonction, $\check{f}(x) \equiv f(-x)$.

β Article de Zanchi et Schulz

Le travail de Zanchi et Schulz [13,14,170,171] est véritablement pionnier, ils sont les premiers à avoir appliqué l'équation de Polchinski au Hamiltonien de Hubbard. Ils ont choisi une approche à une particule irréductible, mais il faut prendre garde qu'en fait, ils utilisent les équations générales en sélectionnant les termes à une particule irréductible, et non l'équation de Wetterich.

γ Article de Wetterich

Auparavant, Wetterich [172] a développé un formalisme dont la puissance n'a pas été immédiatement comprise. L'idée est de renormaliser les termes d'interaction eux-mêmes, en particulier le terme à deux particules $\Gamma^{(4)}$ et non les constantes \mathcal{G} . Ces objets décrivent les mêmes grandeurs physiques, mais la philosophie du processus en est bouleversée.

L'équation

$$\frac{\partial}{\partial \Lambda} \Gamma_{\Lambda}^{(4)} = \frac{1}{2} \mathcal{S}_{\Lambda_0} \text{tr} \left[\frac{\partial}{\partial \Lambda} R_{\Lambda} (\Gamma_{\Lambda}^{(2)} + R_{\Lambda})^{-1} \right]$$

s'exprime en fonction de la fonction de coupure R . Elle est exacte.

δ Article de Fabrizio

Fabrizio [20] a étudié un système de deux échelles fermioniques. Il n'a pas pris en compte les moments parallèles des particules dans les couplages et j'ai prouvé qu'à petit couplage U , son diagramme était incomplet.

d Choix des paramètres d'ordre

Si on utilise une approximation quadratique de \mathcal{H}_{int} , on peut résoudre les équations de Schrödinger, ou plutôt les équations de Gor'kov, qui régissent les opérateurs de création et d'annihilation. On utilise alors une approximation de champ moyen, qui traite la densité d'état de façon cohérente. D'une part, la densité intervient dans l'expression du hamiltonien de champ moyen, mais d'une autre, on peut la calculer à partir des solutions. On étudiera cette méthode de champ moyen, analogue aux équations BCS, dans la partie sur le magnétisme.

La méthode de renormalisation est plus exacte, puisqu'elle prend en compte les termes non quadratiques, qu'on néglige dans la méthode de champ moyen. Toutefois, son essence même est de calculer les couplages quadratiques effectifs qui résultent des termes d'ordres supérieurs. C'est à ce titre qu'on peut emboîter les deux approches : on renormalise les couplages dans un premier temps, puis on étudie le hamiltonien effectif en champ moyen. J'y reviendrai.

Cette explication permet de mieux comprendre combien le choix des termes quadratiques est essentiel pour les calculs de renormalisation. Il existe une très grande

variété de combinaisons de termes quadratiques, que l'on classe selon leurs symétries. Chaque terme correspond à un paramètre d'ordre différent. Il est important de connaître tous les paramètres d'ordre possibles, pour les tester séparément.

On notera O_α^{SC} et O_α^{DW} les différents paramètres d'ordre, α étant un indice générique ici. Pour les excitations supraconductrices, responsables de la création de paires d'électrons $e-e$ ou de trous $h-h$, on écrira conventionnellement O_α^{SC} une combinaison de termes LR , sachant que les termes $L^\dagger R^\dagger$ sont générés par O^\dagger . Pour les excitations Onde de Densité, qui décrivent des excitations électron-trou, on écrira conventionnellement O_α^{DW} une combinaison de termes LR^\dagger , sachant que les termes RL^\dagger sont générés par O^\dagger . De plus nombreux détails sont donnés dans [21], mais j'ai modifié certaines notations dans cette thèse.

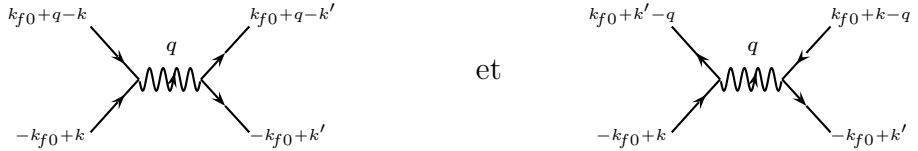
\mathcal{H}_{int} peut s'écrire à l'aide de combinaisons précises de certains paramètres d'ordre. Par exemple, avec des paramètres supraconducteurs,

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \sum_{\alpha} \sum_{k k' q} g_{\alpha}(q-k, k, k', q-k') O_{\alpha}^{\text{SC}\dagger}(-q, k') O_{\alpha}^{\text{SC}}(q, k) \quad (3a)$$

où la somme sur α contient implicitement les composantes \perp . Avec des paramètres Onde de Densité, l'écriture est très semblable, à quelques différences près :

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \sum_{\alpha} \sum_{k k' q} g_{\alpha}(k'-q, k, k', k-q) O_{\alpha}^{\text{DW}\dagger}(-q, k') O_{\alpha}^{\text{DW}}(q, k) . \quad (3b)$$

(3a) et (3b) correspondent aux diagrammes



On peut également introduire explicitement un hamiltonien d'excitation, comme dans [21], mais les calculs reviennent au même.

α Paramètres d'ordre supraconducteurs singulet

- Le paramètre d'ordre supraconducteur le plus simple que l'on puisse construire est le paramètre de symétrie singulet s intra-bande. L'argument $q = 0$ signifie qu'il est intra-bande. Si on utilise la représentation dans l'espace réciproque, à l'aide d'une série de Fourier, il vient

$$\begin{aligned} O_s^{\text{SC}}(0) &= 2 \sum_i \psi_{i,1\uparrow} \psi_{i,1\downarrow} + \psi_{i,2\uparrow} \psi_{i,2\downarrow} \\ &= \int_L \frac{adp}{2\pi} \left(L_{p,0\uparrow} R_{-p,0\downarrow} + L_{p,\pi\uparrow} R_{-p,\pi\downarrow} + R_{-p,0\uparrow} L_{p,0\downarrow} + R_{-p,\pi\uparrow} L_{p,\pi\downarrow} \right) \end{aligned}$$

où \int_L signifie, selon les cas, $\int_{k_{f0}-\frac{\pi}{a}}^{k_{f0}}$ ou $\int_{k_{f\pi}-\frac{\pi}{a}}^{k_{f\pi}}$ (l'intégrale sur la partie R découle de la condition $q = 0$). Ce paramètre d'ordre correspond au couplage tripode z_s^{SC} et à la susceptibilité χ_s^{SC} .

- Le paramètre de symétrie singulet s interbandes correspond à une excitation de vecteur d'onde $q = \pm\Delta k_f$, c'est à dire à deux dimensions $Q = (q, \frac{\pi}{b})$. Pour l'obtenir, il faut multiplier par un facteur de phase $e^{i(j\pi \pm \Delta k_f ia)}$, où a est le paramètre de maille \parallel , et \pm donne deux couplages similaires. Pour se convaincre de la justesse de cette phase, il faut utiliser la représentation dans l'espace réciproque. Il vient finalement

$$\begin{aligned} O_s^{\text{SC}}(\pi_{\pm}) &= -2i \sum_i e^{\mp i \Delta k_f ia} (\psi_{i,1\uparrow} \psi_{i,1\downarrow} - \psi_{i,2\uparrow} \psi_{i,2\downarrow}) \\ &= -i \int_L \frac{adp}{2\pi} \left(L_{p,0\uparrow} R_{\Delta k_f (1\pm 1) - p, \pi \downarrow} + L_{p,\pi \uparrow} R_{\Delta k_f (-1\pm 1) - p, 0 \downarrow} \right. \\ &\quad \left. + R_{\Delta k_f (-1\pm 1) - p, 0 \uparrow} L_{p, \pi \downarrow} + R_{\Delta k_f (1\pm 1) - p, \pi \uparrow} L_{p, 0 \downarrow} \right). \end{aligned}$$

Le facteur $e^{-iQ_{\perp} j b}$ assure que ce paramètre est antisymétrique par parité, ce qui permet de le distinguer du terme intra-bande. Ce paramètre d'ordre correspond aux couplages tripodes $z_{s\pm}^{\text{SC}}$ et aux susceptibilités $\chi_{s\pm}^{\text{SC}}$.

- On peut introduire des paramètres de symétrie singulet s dits étendus, en multipliant l'intégrande de \int_L dans la représentation réciproque par un facteur $\cos(m p a)$, avec $m \in \mathbb{N}$. Comme il y en a un nombre infini, je ne peux tous les écrire, mais il est raisonnable de se limiter à $m = 1$. Par exemple, le paramètre singulet s étendu intra-bande ($q = 0$) s'écrit :

$$\begin{aligned} O_s^{\text{SC}}(0)_{\text{étendu}} &= \sum_{\substack{i=1..N \\ j=1,2}} (\psi_{ij\uparrow} \psi_{i+1,j\downarrow} + \psi_{ij\uparrow} \psi_{i-1,j\downarrow}) \\ &= \int_L \frac{adp}{2\pi} \cos(ap) \left(L_{p,0\uparrow} R_{-p,0\downarrow} + L_{p,\pi\uparrow} R_{-p,\pi\downarrow} + R_{-p,0\uparrow} L_{p,0\downarrow} + R_{-p,\pi\uparrow} L_{p,\pi\downarrow} \right). \end{aligned}$$

- Le paramètre de symétrie singulet d intra-bande, avec $q = 0$, s'écrit :

$$\begin{aligned} O_d^{\text{SC}}(0) &= 2 \sum_i \psi_{i,1\uparrow} \psi_{i,2\downarrow} + \psi_{i,2\uparrow} \psi_{i,1\downarrow} \\ &= \int_L \frac{adp}{2\pi} \left(L_{p,0\uparrow} R_{-p,0\downarrow} - L_{p,\pi\uparrow} R_{-p,\pi\downarrow} + R_{-p,0\uparrow} L_{p,0\downarrow} - R_{-p,\pi\uparrow} L_{p,\pi\downarrow} \right); \end{aligned}$$

ce paramètre est impair selon la symétrie $d_{x^2-y^2}$ (c'est à dire \tilde{C} , cf. l'étude des symétries).

- On trouve deux paramètres de symétrie singulet g interbandes, d'excitation $q = \pi/b$, qui s'écrivent :

$$\begin{aligned} O_g^{\text{SC}}(\pi_{\pm}) &= -2i \sum_i e^{\mp i \Delta k_f ia} (\psi_{i,1\uparrow} \psi_{i+1,2\downarrow} - \psi_{i,2\uparrow} \psi_{i+1,1\downarrow}) \\ &= -e^{\pm i \frac{\Delta k_f a}{2}} \int_L \frac{adp}{2\pi} \sin\left(a\left(p - k_{f0} \mp \frac{\Delta k_f}{2}\right)\right) \times \end{aligned}$$

$$(L_{p-\Delta k_f, \pi \uparrow} R_{\pm \Delta k_f - p, 0 \downarrow} + R_{\pm \Delta k_f - p, 0 \uparrow} L_{p-\Delta k_f, \pi \downarrow} - L_{p, 0 \uparrow} R_{\Delta k_f (1\pm 1) - p, \pi \downarrow} - R_{\Delta k_f (1\pm 1) - p, \pi \uparrow} L_{p, 0 \downarrow});$$

ces paramètres d'ordre sont impairs pour les symétries d_{xy} (c'est à dire p_x et p_y) et $d_{x^2-y^2}$; attention que sous l'action de $d_{x^2-y^2}$ le facteur $\sin(a(p - k_{f0} + \frac{\Delta k_f}{2}))$ devient $\sin(a(-p - k_{f0} + \frac{\Delta k_f}{2}))$, mais tout concorde finalement.

En résumé, les paires supraconductrices correspondant aux excitations s , d et g sont représentées sur la figure suivante :

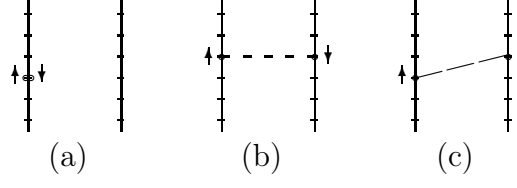


FIGURE 1 – Paires supraconductrices de symétrie s (a), d (b) and g (c).

β Paramètres d'ordre supraconducteurs triplet

- Le paramètre de symétrie triplet p_x intra-bande, avec $q = 0$, s'écrit :

$$\begin{aligned} O_{p_x}^{\text{SC}}(0) &= - \sum_{i \sigma} 2\sigma(\psi_{i,1\sigma}\psi_{i+1,1\sigma} + \psi_{i,2\sigma}\psi_{i+1,2\sigma}) \\ &= \text{i} \int_L \frac{adp}{\pi} \sum_{\sigma} \sigma(L_{p,0\sigma}R_{-p,0\sigma} + L_{p-\Delta k_f,\pi\sigma}R_{\Delta k_f-p,\pi\sigma}) \sin(a(p - k_{f0})) ; \end{aligned}$$

ce paramètre est invariant par la symétrie p_x .

- Les paramètres de symétrie triplet p_x interbandes, d'excitation $q = \pi/b$, s'écrivent :

$$\begin{aligned} O_{p_x}^{\text{SC}}(\pi_{\pm}) &= \text{i} \sum_{i \sigma} e^{\mp \text{i} \Delta k_f i a} 2\sigma(\psi_{i,1\sigma}\psi_{i+1,1\sigma} - \psi_{i,2\sigma}\psi_{i+1,2\sigma}) \tau_{\sigma\sigma}^{\alpha} \\ &= e^{\pm \text{i} \frac{\Delta k_f a}{2}} \int_L \frac{adp}{\pi} \sum_{\sigma} \sigma(L_{p,0\sigma}R_{\Delta k_f(1\pm 1)-p,\pi\sigma} + L_{p-\Delta k_f,\pi\sigma}R_{\pm \Delta k_f-p,0\sigma}) \times \\ &\quad \sin(a(p - k_{f0} \mp \frac{\Delta k_f}{2})) ; \end{aligned}$$

ces paramètres sont invariants par parité P à cause du facteur $e^{-\text{i}Q_{\perp}jb}$.

- Tous les paramètres de symétrie p_x (intra-bande ou interbandes) sont intra-chaîne, a contrario des autres paramètres supraconducteurs.
- Le paramètre de symétrie triplet f_x intra-bande, avec $q = 0$, s'écrit :

$$\begin{aligned} O_{f_x}^{\text{SC}}(0) &= - \sum_{i \sigma} \sigma(\psi_{i,1\sigma}\psi_{i+1,2\sigma} + \psi_{i,2\sigma}\psi_{i+1,1\sigma}) \\ &= -\text{i} \int_L \frac{adp}{\pi} \sum_{\sigma} \sigma(L_{p-\Delta k_f,\pi\sigma}R_{\Delta k_f-p,\pi\sigma} - L_{p,0\sigma}R_{-p,0\sigma}) \sin(a(p - k_{f0})) ; \end{aligned}$$

ce paramètre est invariant par rapport à la symétrie $d_{x^2-y^2}$, avec la modification du facteur sinus, comme pour le cas singulet g .

- Les paramètres de symétrie triplet f_y interbandes, d'excitation $q = \pi/b$, s'écrivent :

$$\begin{aligned} O_{f_y}^{\text{SC}}(\pi_{\pm}) &= \sum_{i \sigma} e^{\mp \text{i} \Delta k_f i a} \sigma(\psi_{i,1\sigma}\psi_{i,2\sigma} - \psi_{i,2\sigma}\psi_{i,1\sigma}) \\ &= - \int_L \frac{adp}{\pi} \sum_{\sigma} \sigma(L_{p,0\sigma}R_{\Delta k_f(1\pm 1)-p,\pi\sigma} - L_{p,\pi\sigma}R_{\Delta k_f(-1\pm 1)-p,0\sigma}) ; \end{aligned}$$

ces paramètres d'ordre sont impairs pour la symétrie p_y . Le facteur exponentiel n'y est ici pour rien.

En résumé, les paires supraconductrices correspondant aux excitations p_x , f_x et f_y sont représentées sur la figure suivante :

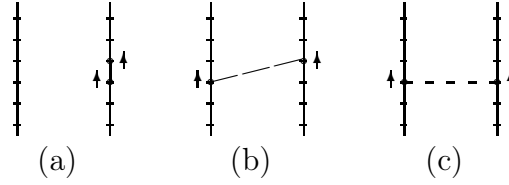


FIGURE 2 – Paires supraconductrices de symétrie p_x (a), f_x (b) and f_y (c).

γ Paramètres d'ordre Onde de Densité sur site

On peut distinguer, selon la classification expliquée dans [99], des paramètres Onde de Densité sur site et sur lien. Les premiers s'écrivent $\sum_{\sigma\sigma'} \langle \psi_{\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{Q},\sigma'} \rangle \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha$, pour les paramètres intra-chaîne et $\sum_{\sigma\sigma'} \langle \psi_{\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{Q}+\mathbf{G},\sigma'} \rangle \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha$ pour les paramètres interchaînes. La matrice τ vaut $\tau^C = I$ pour une Onde de Densité de Charge, $\tau^{S_x} = \sigma_x$, $\tau^{S_y} = \sigma_y$ et $\tau^{S_z} = \sigma_z$ (les matrices de Pauli) pour les Ondes de Densité de Spin. $\mathbf{G} = n\mathbf{1}_\perp$, avec $n \in \mathbb{Z}$ et $\mathbf{1}_\perp = (0, 1)$. On ne représente ces paramètres que dans l'espace réciproque.

Leurs vecteurs d'onde s'écrivent, à deux dimension, $Q = (-2k_{f0}, 0)$, $Q = (-2k_{f\pi}, 0)$ et $Q = (-k_{f0} - k_{f\pi}, \frac{\pi}{b}) = (-2k_f, \frac{\pi}{b})$.

On écrit les deux composantes du vecteur Q en argument et on trouve pour les paramètres intra-bande intra-chaîne :

$$O_{\text{site}}^{\text{DW}}(-2k_{f0}, 0) = \int_L \frac{adp}{2\pi} \sum_{\sigma\sigma'} \left(R_{p,0\sigma}^\dagger L_{p,0\sigma'} + R_{p+\Delta k_f, \pi\sigma}^\dagger L_{p-\Delta k_f, \pi\sigma'} \right) \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha$$

$$O_{\text{site}}^{\text{DW}}(-2k_{f\pi}, 0) = \int_L \frac{adp}{2\pi} \sum_{\sigma\sigma'} \left(R_{p-\Delta k_f, 0\sigma}^\dagger L_{p+\Delta k_f, 0\sigma'} + R_{p, \pi\sigma}^\dagger L_{p, \pi\sigma'} \right) \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha$$

et pour les paramètres interbandes intra-chaîne :

$$O_{\text{site}}^{\text{DW}}(-2k_f, \frac{\pi}{b}) = \text{i} \int_L \frac{adp}{2\pi} \sum_{\sigma\sigma'} \left(R_{p,0\sigma}^\dagger L_{p, \pi\sigma'} + R_{p, \pi\sigma}^\dagger L_{p, 0\sigma'} \right) \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha .$$

δ Paramètres d'ordre Onde de Densité sur lien

Les paramètres Onde de Densité sur lien s'écrivent $\sum_{\sigma\sigma'} \langle \psi_{\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{Q}+\mathbf{1}_\parallel, \sigma'} \rangle \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha$ pour les paramètres intra-chaîne et $\sum_{\sigma\sigma'} \langle \psi_{\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{Q}+\mathbf{G}, \sigma'} \rangle \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha$ pour les paramètres interchaînes. $\mathbf{G} = \mathbf{1}_\parallel + n\mathbf{1}_\perp$ avec $n \in \mathbb{Z}$ et $\mathbf{1}_\parallel = (1, 0)$ Les définitions de τ et $\mathbf{1}_\perp$ sont inchangées, $\mathbf{G} = \mathbf{1}_\parallel + n\mathbf{1}_\perp$ avec $n \in \mathbb{Z}$ et $\mathbf{1}_\perp = (0, 1)$. On ne représentera ces paramètres que dans l'espace réciproque. On écrit encore les deux composantes du vecteur Q en argument. On trouve pour les paramètres intra-bande intra-chaîne :

$$O_{\text{lien}}^{\text{DW}}(-2k_{f0}, 0) = \text{i} \int_L \frac{adp}{2\pi} \sin(ap) e^{-ik_{f0}a} \sum_{\sigma\sigma'} \left(R_{p,0\sigma}^\dagger L_{p,0\sigma'} + R_{p+\Delta k_f, \pi\sigma}^\dagger L_{p-\Delta k_f, \pi\sigma'} \right) \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha$$

$$O_{\text{lien}}^{\text{DW}}(-2k_f\pi, 0) = i \int_L \frac{adp}{2\pi} \sin(ap) e^{-ik_f\pi a} \sum_{\sigma\sigma'} \left(R_{p-\Delta k_f, 0\sigma}^\dagger L_{p+\Delta k_f, 0\sigma'} + R_{p, \pi\sigma}^\dagger L_{p, \pi\sigma'} \right) \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha,$$

et pour les paramètres interbandes intra-chaîne :

$$O_{\text{bond}}^{\text{DW}}(-2k_f, \frac{\pi}{b}) = - \int_L \frac{adp}{2\pi} e^{iak_f} \sin(a(p - \frac{\Delta k_f}{2})) (R_{p, \pi\sigma}^\dagger L_{p, 0\sigma'} + R_{p+\Delta k_f, 0\sigma}^\dagger L_{p+\Delta k_f, \pi\sigma'}).$$

e Schéma de renormalisation

α Couplages

J'ai adopté les notations de Fabrizio, en les étendant de façon naturelle. Tous les couplages à deux particules ont un indice 1 (diffusion arrière) ou 2 (diffusion avant) implicite. g_0 correspond aux interactions intra-bande de la bande 0, g_π aux interactions intra-bande de la bande π . Les autres couplages correspondent à des interactions interbandes. Dans les équations de renormalisation, on aura besoin de définir des couplages g adimensionnés, qui sont définis par $\tilde{g} = ga/(\pi v_f)$. Ils correspondent aux schémas suivants :

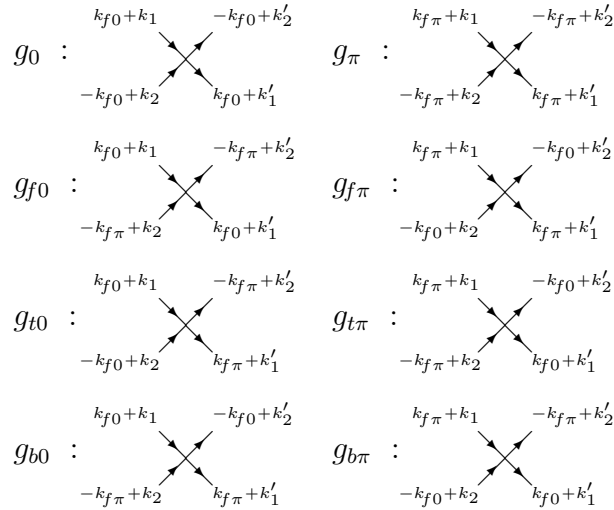


FIGURE 3 – Définitions des couplages g .

Visualisons ces interactions sur les bandes de dispersions à une dimension :

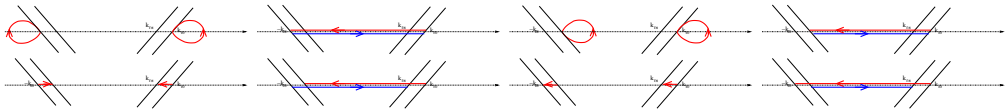


FIGURE 4 – Représentation des interactions à une dimension, dans l'ordre g_{01} , g_{02} , g_{f01} , g_{f02} , g_{t01} , g_{t02} , g_{b01} et g_{b02} .

et à deux dimensions :

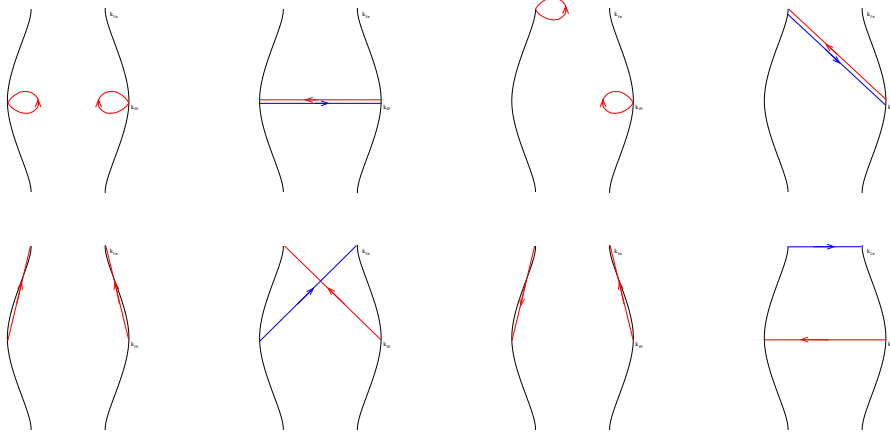


FIGURE 5 – Comme la figure 4 mais sur la surface de Fermi bidimensionnelle.

Intéressons-nous maintenant aux couplages tripodes z . On distinguera les couplages z^{SC} pour le calcul des paramètres d'ordre supraconducteurs (singulet ou triplet) et z^{DW} pour celui des paramètres d'ordre Onde de Densité de Spin ou de Charge. Plus précisément, z_0^{SC} et s_π^{SC} correspondent à des paires intra-bande, tandis que z_+^{SC} et s_-^{SC} correspondent à des paires interbandes. On représente ici les couplages supraconducteurs $z_0^{\text{SC}}, z_\pi^{\text{SC}}, z_+^{\text{SC}}$ et z_-^{SC} sans distinguer leur symétrie :

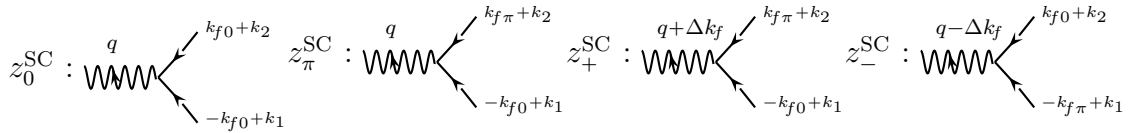


FIGURE 6 – Couplages tripodes supraconducteurs.

et ici les couplages Ondes de densité $z_0^{\text{DW}}, z_\pi^{\text{DW}}, z_+^{\text{DW}}$ et z_-^{DW} :

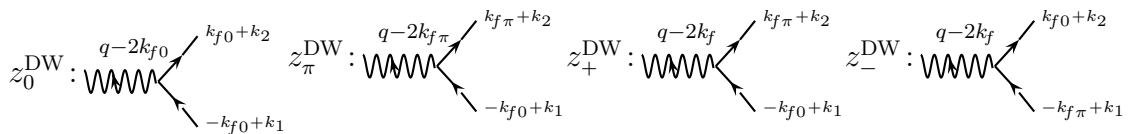


FIGURE 7 – Couplages tripodes Ondes de Densité.

Enfin, on peut définir les diagrammes des susceptibilités, qui correspondent simplement à une excitation. On définit trois susceptibilités supraconductrices $\chi_0^{\text{SC}}, \chi_{\pi+}^{\text{SC}}$ et $\chi_{\pi-}^{\text{SC}}$, la première correspond à une excitation d'une paire intra-bande, les deux autres à des paires interbandes. On ne distingue pas leur symétrie exacte :

$$\chi_0^{\text{SC}} : \text{Wavy line with } q \text{ incoming} \quad \chi_{\pi+}^{\text{SC}} : \text{Wavy line with } q + \Delta k_f \text{ incoming} \quad \chi_{\pi-}^{\text{SC}} : \text{Wavy line with } q - \Delta k_f \text{ incoming}$$

FIGURE 8 – Susceptibilités supraconductrices.

et on définit trois susceptibilités Onde de Densité χ_{00}^{DW} , $\chi_{0\pi}^{\text{DW}}$ et χ_{π}^{DW} , les deux premières correspondent à des modes intra-bande, la dernière à un mode inter-bandes :

$$\chi_0^{\text{DW}} : \begin{array}{c} q-2k_{f0} \\ \text{W} \end{array} \quad \chi_{\pi+}^{\text{DW}} : \begin{array}{c} q-2k_{f\pi} \\ \text{W} \end{array} \quad \chi_{\pi-}^{\text{DW}} : \begin{array}{c} q-2k_f \\ \text{W} \end{array}$$

FIGURE 9 – Susceptibilités Onde de Densité.

β Développement perturbatif des graphes

Je ne m'intéresse pour l'instant qu'au développement des diagrammes d'interaction à deux particules, noté $\Gamma^{(4)}$. On peut le présenter sous forme diagrammatique. On utilisera une représentation élémentaire des diagrammes de Feynman, où les couplages d'interaction (à deux particules ou entre une particule et une excitation) sont représentés par un point. On appellera branche les lignes qui relient deux points et correspondent à une intégrale. On appellera branche extérieure les lignes ouvertes qui partent d'un point et indiquent la valeur des moments des particules (c'est à dire les moments non intégrés). Commençons par un développement formel, que l'on particularisera plus loin en fonction des couplages :

Dans le terme de gauche est représenté un diagramme renormalisé. Il est égal au développement de droite, qu'on classe provisoirement en fonction du nombre de boucles. Le premier terme est le diagramme nu, sans boucle, le second le canal de Cooper, le troisième celui de Peierls. Le dernier canal est celui de Landau, mais on le négligera dorénavant car il ne donne aucune contribution divergente dans ce genre de développement, tandis que les autres divergent de façon logarithmique. On néglige les diagrammes à deux boucles ici, car ils correspondent à des ordres de perturbation plus grands (j'y reviendrai plus loin).

On notera P_1 , P_2 les impulsions des électrons arrivants et P'_1 , P'_2 celles des électrons sortants. Le diagramme de Cooper s'interprète comme une interaction électron-électron, celui de Peierls s'interprète comme une interaction électron-trou, l'impulsion du trou entrant étant donc P'_1 et celle du trou sortant P_2 .

Pour g_0 , je note les pattes extérieurs $P_1 = k_{f0} + l$, $P_2 = -k_{f0} + c$, $P'_1 = k_{f0} + c + l + p$ et $P'_2 = -k_{f0} - p$. La conservation de la quantité de mouvement est incluse implicitement. Comme il y a deux bandes, il y a deux canaux de Cooper et deux canaux de Peierls et le développement diagrammatique devient :

où d est la différence $k - k_{f_0}$ ou $k - k_{f_\pi}$ selon les cas, k étant l'impulsion dans une des branches internes des diagrammes de Cooper ou de Peierls.

Le développement diagrammatique des couplages tripodes est analogue. Pour le couplage z_0^{SC} supraconducteur, on note les pattes extérieures $-k_{f_0} + d$ et $k_{f_0} + c - d$. Il se produit une excitation d'impulsion c et on obtient finalement :

FIGURE 10 – Développement de z_0^{SC} .

Pour le couplage z_0^{SC} Onde de Densité, on note les pattes extérieures $-k_{f_0} + d$ et $k_{f_0} + p - d$. Il se produit une excitation d'impulsion p et on obtient :

FIGURE 11 – Développement de z_0^{DW} .

Le développement diagrammatique des susceptibilités est analogue. On note q l'impulsion de l'excitation. Pour χ_0^{SC} supraconducteur, on obtient finalement :

FIGURE 12 – Développement de χ_0^{SC} .

et pour χ_π^{DW} Onde de Densité :

FIGURE 13 – Développement de χ_π^{DW} .

γ Coupure ultra-violette ou infrarouge

La coupure Λ qui limite le domaine d'intégration est interprétée, dans les schémas que l'on va maintenant détailler, comme une coupure infrarouge. En effet, l'action effective est celle qui reste après avoir intégré tous les degrés de liberté non pertinents, à savoir ici les impulsions de norme $\leq \Lambda$. Les termes qui restent dans l'action effective dépendent a fortiori des impulsions $k > \Lambda$. Notons $\phi_<$ la projection d'un état dans le domaine où $|k| < \Lambda$ (on le représente dans l'espace réciproque), défini pas $\phi_<(k) = (1 - \Theta(|k| - \Lambda))\phi(k)$, avec Θ la fonction de Heaviside, $\Theta(x) = 1$ si $x \geq 0$ et $\Theta(x) = 0$ sinon ; et $\phi_>$ la projection d'un état dans le domaine $|k| \geq \Lambda$ (c'est $\phi_>(k) = \Theta(|k| - \Lambda)\phi(k)$), on a

$$\mathcal{Z} = \int d\phi e^{-\mathcal{S}[\phi]} = \int d\phi_< \int d\phi_> e^{-\mathcal{S}[\phi]} = \int d\phi_< e^{-\mathcal{S}_{\text{cin}}}< \langle e^{-\mathcal{S}_{\text{int}}}>_> .$$

L'intégration des $\phi_>$ dans \mathcal{S}_{cin} donne une constante, qui a été omise, et dans \mathcal{S}_{int} s'interprète comme une valeur moyenne. Le développement de l'exponentielle s'écrit, au deuxième ordre,

$$\langle e^{-\mathcal{S}_{\text{int}}}>_> = e^{-\langle \mathcal{S}_{\text{int}} \rangle_>} - \frac{1}{2} (\langle \mathcal{S}_{\text{int}}^2 \rangle_> - \langle \mathcal{S}_{\text{int}} \rangle_>^2)$$

et donne des termes contenant deux, quatre, six ou huit opérateurs de création (R^\dagger ou L^\dagger) ou d'annihilation (R ou L). On apparie les opérateurs élémentaires, en respectant bien l'ordre chronologique. Chaque paire correspond aux différents propagateurs que l'on retrouve dans le développement diagrammatique (incluant des termes à deux boucles si on veut trouver des termes à 6 ou 8 opérateurs élémentaires). Ces opérateurs élémentaires sont fermioniques et anticommulent tous, ce qui permet de déterminer de façon sûre le signe de chaque diagramme.

L'interprétation de la coupure Λ découle de ce qu'on la choisit comme paramètre de renormalisation, c'est à dire comme le paramètre qui évolue pendant le flot. À l'inverse, dans les équations de Wilson, la coupure est fixe et indépendante du paramètre de flot ℓ . Dans les équations développées par Wetterich, on pose au contraire

$$\Lambda = \Lambda_0 e^{-\ell} . \quad (4)$$

δ Calcul des diagrammes

Pour traduire le développement de Feynman analytiquement, on utilise ici les fonctions de Green définies à température nulle. Dans les diagrammes nus apparaissent les fonctions de Green [12] d'une particule libre $(\omega - \varepsilon(k) \pm i\eta)^{-1}$ avec

$\eta \rightarrow 0^+$ et $\pm = +$ si la particule va vers la droite (R), $\pm = -$ si elle va vers la gauche (L).

A priori, on intègre sur la valeur de k (noté d dans la section précédente); la traduction formelle du précédent développement en diagramme de Feynman de g_0 s'écrit :

$$\begin{aligned}
 g_{0 \text{ eff}}(c, l, p) = & g_0(c, l, p) + \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left\{ \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dk d\omega \frac{g_0(k, l, p)g_0(c - k, l, p)}{(\omega - v_f k \mp i\eta)(\omega - v_f(c - k) \pm i\eta)} \right. \\
 + & \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dk d\omega \frac{g_\pi(k, l, p)g_\pi(c - k, l, p)}{(\omega - v_f k \mp i\eta)(\omega - v_f(c - k) \pm i\eta)} + \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dk d\omega \frac{g_0(c, l, k)g_0(c, l, k - p)}{(\omega - v_f k \mp i\eta)(\omega - v_f(k - p) \pm i\eta)} \\
 & \left. + \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dk d\omega \frac{g_\pi(c, l, k)g_\pi(c, l, k - p)}{(\omega - v_f k \mp i\eta)(\omega - v_f(k - p) \pm i\eta)} \right\} \quad (5)
 \end{aligned}$$

où on a convenu, dès à présent, que la coupure Λ est relative au niveau de Fermi k_{f0} ou $k_{f\pi}$ selon les cas, qui correspondent à $\pm = -\mp = +$ ou $-$. Étudions la première intégrale. On écrit

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int d\omega \frac{1}{(\omega - v_f k \mp i\eta)(\omega - v_f(c - k) \pm i\eta)} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{i\pi}{v_f(2k - c) \pm \eta} . \quad (6)$$

Si on néglige (provisoirement) la dépendance en k des couplages, cette intégrale donne un facteur divergent

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dk \frac{1\pi}{v_f(2k - c) \pm i\eta} = \frac{1}{2v_f} \log \left| \frac{1 - c/(2\Lambda)}{1 + c/(2\Lambda)} \right| \underset{\Lambda \gg c}{\sim} \frac{c}{2v_f\Lambda} .$$

Toutes ces intégrales donnent des contributions similaires en $\log(\Lambda/c)$ ou $\log(\Lambda/p)$, qui ne se simplifient pas. Cette divergence ultra-violette nécessite une procédure de renormalisation J'ai suivi les schémas de Wick ou à une-particule-irréductible. Les intégrales $\int dk$ portent sur un intervalle infinitésimal et deviennent triviales.

Pour g_π , on procède de même, et on obtient un résultat similaire (et même identique, cf. l'étude des symétries). Pour g_{0t} et les autres, la démarche est similaire, à condition de modifier les couplages qui apparaissent dans les diagrammes de Cooper et de Peierls. Une étude exhaustive en sera faite dans les sections suivantes, y compris pour les couplages g_b qui nécessitent une attention particulière.

Pour les couplages tripodes et les susceptibilités, il n'y a pas de novation non plus, et on donnera directement les équations de renormalisation.

ϵ Calcul à température non nulle

À part une subtilité lors de la renormalisation de la surface de Fermi, le formalisme à température T non nulle donne les mêmes résultats, quand on fait tendre $T \rightarrow 0$. Le propagateur libre s'écrit $(i\omega - \varepsilon(k))^{-1}$, où on somme les fréquences de Matsubara $\omega_n = \pi T(2n + 1)$, pour $n \in \mathbb{Z}$. On trouve

$$\begin{aligned}
 \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{(i\omega_n - v_f k)(-i\omega_n - v_f(c - k))} &= \frac{1}{v_f(k - (c - k))} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(\frac{1}{i\omega_n - v_f k} + \frac{1}{-i\omega_n - v_f(c - k)} \right) \\
 &= \frac{1}{v_f(2k - c)} \left(\frac{\beta}{1 + e^{\beta v_f k}} + \frac{\beta}{1 + e^{\beta v_f(c - k)}} \right) \underset{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{1}{v_f(2k - c)} (\Theta(b - k) - \Theta(k)). \quad (7)
 \end{aligned}$$

On réalise qu'on a oublié un facteur $1/(\pi T)$ dans le calcul à température nulle. La suite est équivalente et se devinent ici les discussions laborieuses quand on croise les fonctions Θ de ce calcul avec les $\Theta(|k| - \Lambda)$ (schéma à une particule irréductible) ou $\Theta(\Lambda - |k|)$ (schéma de l'ordre de Wick) dans les calculs de renormalisation.

ζ Schéma de l'ordre de Wick

On se place dans le formalisme de Wetterich. Salmhofer a développé un schéma de renormalisation, dit de l'ordre de Wick, avec un choix explicite de coupure. Le propagateur est multiplié par une fonction $\Theta(\varepsilon(k) - v_f \Lambda)$ ou par un équivalent analytique dépendant d'un paramètre réel, qui redonne la marche discontinue quand ce paramètre atteint une limite prédéfinie.

L'idée est d'éliminer les paramètres k tels que $\Lambda - \delta\Lambda < |k| \leq \Lambda$, pour obtenir une action effective de plus basse énergie. Sans entrer dans le détail des calculs [15], on retrouve les équations qui en découlent à partir de (5). On intègre les impulsions sous la coupure infrarouge Λ , à partir d'une coupure initiale Λ_0 . Toutefois, on choisit sur chaque diagramme une branche, que l'on n'intègre que sur une longueur (de l'espace réciproque) $\delta\Lambda$. On ne choisit pas cette branche de façon arbitraire, mais on choisit successivement toutes les branches possibles en sommant les différents diagrammes (il ne s'agit pas d'un choix conventionnel, c'est le résultat de la différentiation du développement diagrammatique). Souvent, les contributions sont égales, et on doit juste prendre en compte une multiplicité ; par exemple, pour les canaux de Cooper et Peierls, on obtient un facteur 2.

À une dimension, les domaines sur lesquels on intègre sont représentés sur la figure suivante :

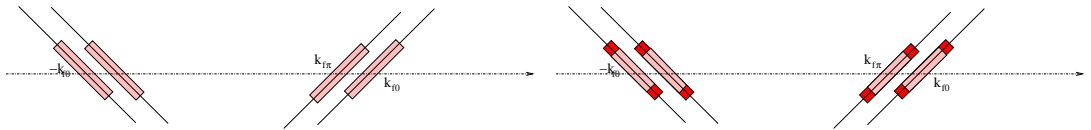


FIGURE 14 – Sur la figure de gauche, les bandes larges forment le domaine d'intégration selon le schéma de Wick. Sur la figure de droite est précisé le petit domaine de taille $\delta\Lambda$ sur lequel une des branches est intégrée.

À deux dimensions, pour un système de chaînes couplées, les domaines sont représentés sur la figure suivante :

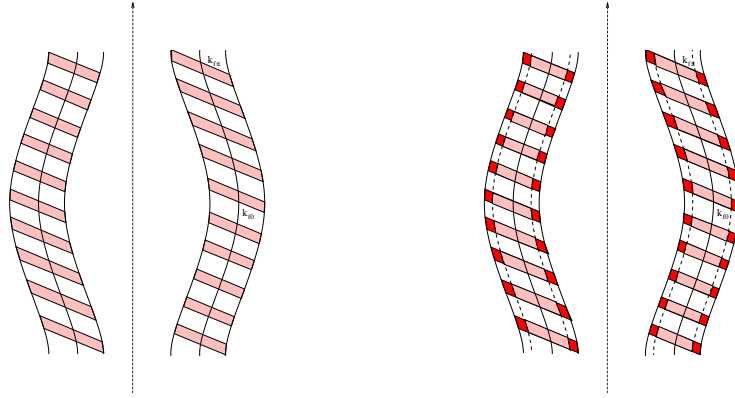


FIGURE 15 – Comme la figure précédente, à deux dimensions avec des hachures.

Grâce au $\delta\Lambda$, on a défini une transformation de renormalisation infinitésimale, qu'on itère en diminuant Λ selon la formule (4). On intègre sur **une** branche de $\Lambda - \delta\Lambda$ à Λ de sorte que l'itération de la transformation élémentaire de $\ell = 0$ à $\ell = \infty$ correspond à une intégrale de $\Lambda = 0$ à Λ_0 .

Dans le formalisme exact de Salmhofer, on vérifie qu'il ne faut pas imposer d'autres conditions que $|k| \leq \Lambda$, sur les autres branches à intégrer. Pour les diagrammes à une boucle, l'impulsion sur l'autre branche est imposée par la conservation de la quantité de mouvement et il n'y a aucun degré de liberté à intégrer. Par contre, on retrouve un tel degré de liberté à intégrer sur les diagrammes à deux boucles.

Examinons plus en détail la première boucle de Cooper. On peut choisir $k = \pm\Lambda$ et il faut s'assurer que $-\Lambda < c - k < \Lambda$. Si on choisit $k = \Lambda$, il vient $0 < c < 2\Lambda$ et alors le préfacteur dans (6) ou (7) s'écrit $1/(2\Lambda - c)$. Si on choisit $k = -\Lambda$, il vient $-2\Lambda < c < 0$ et le préfacteur devient $1/(-2\Lambda - c)$. En définitive, avec les signes corrects, qui se compensent après un calcul fastidieux, on obtient un préfacteur $1/(2\Lambda - |c|)$. Il peut devenir divergent mais cela arrive pour des valeurs de $c = \pm 2\Lambda$ qui ne contribuent pas du tout au flot de renormalisation, de sorte que tout se passe bien.

Afin de faire ces calculs pour les autres termes et tous les couplages, il est nécessaire de définir plus proprement les variables (c, l, p) . On note toujours $k = P_{\parallel} - k_{f0}$ si une particule est dans la bande 0, $k = P_{\parallel} - k_{f\pi}$ si elle est dans la bande π . Alors, pour les couplages g , on pose $c = k_1 + k_2$, $l = k_1 - k'_1$ et $p = k_1 - k'_2$. Pour tous les couplages à l'exception de g_{b0} et $g_{b\pi}$, on a également $c = k'_1 + k'_2$, $l = k'_2 - k_2$ et $p = k'_1 - k_2$. On trouve $c = k'_1 + k'_2 \mp 2\Delta k_f$, $l = k'_2 - k_2 \mp 2\Delta k_f$ et $p = k'_1 - k_2 \mp 2\Delta k_f$ avec $\mp = -$ pour le couplage g_{b0} et $\pm = +$ pour le couplage $g_{b\pi}$. L'apparition du terme Δk_f sera expliquée plus loin. Pour les couplages z , on pose $c = k_1 + k_2$ et $p = k_1 - k_2$. Dans ces couplages, on note k_1 plus simplement k (de sorte que le k des pattes intérieures s'écrit ici k'). Pour les susceptibilités, il n'y a qu'une seule variable, q l'impulsion transmise par l'excitation. L'équation (5) devient une

équation différentielle, similaire à une équation du groupe de renormalisation :

$$\begin{aligned}
 & \frac{dg_0}{d\ell}(c, l, p) = \\
 & \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|c|} \left(\sum_{\pm} g_0(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2}) g_0(c, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l-p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) - \frac{l-p}{2}) \right. \\
 & \quad \left. + \sum_{\pm} g_{t0}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2}) g_{t\pi}(c, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l-p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) - \frac{l-p}{2}) \right) \\
 & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|p|} \left(\sum_{\pm} g_0(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2}, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2}, p) g_0(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c-l}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{c-l}{2}, p) \right) \\
 & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|p+2\Delta k_f|} \left(\sum_{\pm} g_{b0}(\mp(\Lambda + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2}) + \frac{c+l}{2} - \Delta k_f, \pm(\Lambda + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2}) + \frac{c+l}{2} - \Delta k_f, p) \right. \\
 & \quad \left. g_{b\pi}(\mp(\Lambda + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2}) + \frac{c-l}{2} + \Delta k_f, \mp(\Lambda + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2}) - \frac{c-l}{2} + \Delta k_f, p+2\Delta k_f) \right)
 \end{aligned} \tag{8a}$$

où $\epsilon = -1$ partout, y compris dans toutes les équations de renormalisation suivantes. Pour les autres couplages, on obtient :

$$\begin{aligned}
 & \frac{dg_{f0}}{d\ell}(c, l, p) = \\
 & \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|c|} \left(\sum_{\pm} g_{f0}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2}) g_{f0}(c, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l-p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) - \frac{l-p}{2}) \right) \\
 & + \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|c+2\Delta k_f|} \left(\sum_{\pm} g_{b0}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2}) + \frac{l+p}{2} - \Delta k_f, \mp(c\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2}) + \frac{l+p}{2} - \Delta k_f) \right. \\
 & \quad \left. g_{b\pi}(c+2\Delta k_f, \mp(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2}) + \frac{l-p}{2} + \Delta k_f, \mp(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2}) - \frac{l-p}{2} + \Delta k_f) \right) \\
 & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|p|} \left(\sum_{\pm} g_{f0}(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2}, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2}, p) g_{f0}(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c-l}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{c-l}{2}, p) \right) \\
 & \quad + \sum_{\pm} g_{t0}(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2}, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2}, p) g_{t\pi}(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c-l}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{c-l}{2}, p)
 \end{aligned} \tag{8b}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{dg_{t0}}{d\ell}(c, l, p) = \\
 & \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|c|} \left(\sum_{\pm} g_0(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2}) g_{t0}(c, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l-p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) - \frac{l-p}{2}) \right. \\
 & \quad \left. + \sum_{\pm} g_{t0}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2}) g_{\pi}(c, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l-p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) - \frac{l-p}{2}) \right) \\
 & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|p|} \left(\sum_{\pm} g_{t0}(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2}, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2}, p) g_{f\pi}(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c-l}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{c-l}{2}, p) \right) \\
 & \quad + \sum_{\pm} g_{f0}(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2}, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2}, p) g_{t0}(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c-l}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{c-l}{2}, p)
 \end{aligned} \tag{8c}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{dg_{b0}}{d\ell}(c, l, p) = \\
 & \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|c|} \left(\sum_{\pm} g_{f0}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2} + \Delta k_f, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l+p}{2} + \Delta k_f) g_{b0}(c, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{l-p}{2} - \Delta k_f, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) - \frac{l-p}{2} - \Delta k_f) \right) \\
 & + \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|c+2\Delta k_f|} \left(\sum_{\pm} g_{b0}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2}) + \frac{l+p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2}) + \frac{l+p}{2}) \right. \\
 & \quad \left. g_{f\pi}(c+2\Delta k_f, \mp(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2}) - \frac{l-p}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2}) - \frac{l-p}{2}) \right) \\
 & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|p|} \left(\sum_{\pm} g_0(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2} + \Delta k_f, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c+l}{2} + \Delta k_f, p) g_{b0}(\mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{c-l}{2} - \Delta k_f, \mp(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{c-l}{2} - \Delta k_f, p) \right) \\
 & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + \epsilon 4|p+2\Delta k_f|} \left(\sum_{\pm} g_{b0}(\mp(\Lambda + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2}) + \frac{c+l}{2}, \pm(\Lambda + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2}) + \frac{c+l}{2}, p) \right. \\
 & \quad \left. g_{\pi}(\mp(\Lambda + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2}) + \frac{c-l}{2}, \mp(\Lambda + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2}) - \frac{c-l}{2}, p+2\Delta k_f) \right).
 \end{aligned} \tag{8d}$$

Les équations pour les couplages π correspondants seront implicitement données, en appliquant les symétries. Les indices de spin ont été omis et peuvent s'écrire de façon générique ;

$$\frac{dg_\alpha}{d\ell} = \sum_{\beta,\gamma} g_\beta (\mathcal{C}_\alpha^{\beta\gamma} + \mathcal{P}_\alpha^{\beta\gamma}) g_\gamma \quad (9)$$

où les matrices \mathcal{C} et \mathcal{P} représentent les canaux de Cooper et de Peierls, qui valent, dans la représentation g-ologique [18, 40, 171],

$$\mathcal{C}_1 = - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathcal{C}_2 = - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (10a)$$

$$\mathcal{P}_1 = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathcal{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (10b)$$

On peut changer de représentation. Dans [18, 40] sont définies les représentations *supraconductivité* singulet/triplet avec un indice $\alpha = s, t$, ou *Onde de Densité* Charge/Spin avec un indice $\alpha = C, S$. Pour passer des représentations g-ologique à supraconductivité, on écrit

$$\begin{aligned} g_s &= -g_1 - g_2 \\ g_t &= g_1 - g_2 ; \end{aligned} \quad (11)$$

pour passer de la représentation g-ologique à Onde de Densité, on écrit

$$\begin{aligned} g_C &= g_2 - 2g_1 \\ g_S &= g_2 . \end{aligned} \quad (12)$$

Les équations de renormalisation des couplages z , avec des variables (k, c, p) , ont également un indice de spin. Si on écrit les couplages supraconducteurs z^{SC} dans la représentation singulet/triplet $\alpha = s, t$, et les couplages Onde de Densité z^{DW} dans la représentation Charge/Spin $\alpha = C, S$, l'indice de spin s'écrit de façon générique :

$$\frac{dz_\alpha}{d\ell} = g_\alpha z_\alpha . \quad (13)$$

Dans ce cas, on peut omettre l'indice de spin dans les équations de renormalisation, qui s'écrivent, toujours avec $\epsilon = -1$,

$$\begin{aligned} \frac{dz_0^{\text{SC}}}{d\ell}(c, k) &= \frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|c|} \left(\sum_{\pm} \tilde{g}_0(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{\epsilon}{2} - k, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{\epsilon}{2} - k) z_0^{\text{SC}}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{\epsilon}{2}) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\pm} \tilde{g}_{t0}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{\epsilon}{2} - k, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{\epsilon}{2} - k) z_\pi^{\text{SC}}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{\epsilon}{2}) \right) \end{aligned} \quad (14a)$$

$$\begin{aligned} \frac{dz_+^{\text{SC}}}{d\ell}(c, k) &= \frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|c|} \sum_{\pm} \tilde{g}_{f0}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{\epsilon}{2} - k, \mp(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{\epsilon}{2} - k) z_+^{\text{SC}}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c|}{2}) + \frac{\epsilon}{2}) \\ &\quad + \frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|c + 2\Delta k_f|} \sum_{\pm} \tilde{g}_{b0}(c, \pm(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_f|}{2}) + \frac{\epsilon}{2} - \Delta k_f - k, \mp(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_f|}{2}) + \frac{\epsilon}{2} - \Delta k_f - k) \\ &\quad \times z_-^{\text{SC}}(c + 2\Delta k_f, \pm(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_f|}{2}) + \frac{\epsilon}{2} + \Delta k_f) \end{aligned} \quad (14b)$$

$$\begin{aligned} \frac{dz_0^{\text{DW}}}{d\ell}(p, k) &= \frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|p|} \sum_{\pm} \tilde{g}_0(\pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{p}{2} + k, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{p}{2} - k, p) z_0^{\text{DW}}(p, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{p}{2}) \\ &+ \frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|p + 2\Delta k_f|} \sum_{\pm} \tilde{g}_{b\pi}(\pm(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2}) + \frac{p}{2} + \Delta k_f + k, \pm(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2}) - \frac{p}{2} + \Delta k_f - k, p + 2\Delta k_f) \\ &\quad \times z_{\pi}^{\text{DW}}(p + 2\Delta k_f, \pm(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2}) - \frac{p}{2} - \Delta k_f) \end{aligned} \quad (14c)$$

$$\begin{aligned} \frac{dz_+^{\text{DW}}}{d\ell}(p, k) &= \frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|p|} \left(\sum_{\pm} \tilde{g}_{f0}(\pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{p}{2} + k, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{p}{2} - k, p) z_+^{\text{DW}}(p, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{p}{2}) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\pm} \tilde{g}_{t\pi}(\pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) + \frac{p}{2} + k, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{p}{2} - k, p) z_-^{\text{DW}}(p, \pm(\Lambda + \frac{|p|}{2}) - \frac{p}{2}) \right). \end{aligned} \quad (14d)$$

La dépendance en spin des susceptibilités χ est la même que celle des couplages z . On l'omet et les équations de renormalisation des susceptibilités s'écrivent (toujours avec $\epsilon = -1$) :

$$\frac{d\chi_0^{\text{SC}}}{d\ell}(q) = -\frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|q|} \sum_{\pm} \left(z_0^{\text{SC}}(q, \pm(\Lambda + \frac{|q|}{2}) + \frac{q}{2})^2 + z_{\pi}^{\text{SC}}(q, \pm(\Lambda + \frac{|q|}{2}) + \frac{q}{2})^2 \right) \quad (15a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_+^{\text{SC}}}{d\ell}(q) &= -\frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|q|} \sum_{\pm} z_+^{\text{SC}}(q, \pm(\Lambda + \frac{|q|}{2}) + \frac{q}{2})^2 \\ &\quad - \frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|q + 2\Delta k_f|} \sum_{\pm} z_-^{\text{SC}}(q + 2\Delta k_f, \pm(\Lambda + \frac{|q + 2\Delta k_f|}{2}) + \frac{q}{2} + \Delta k_f)^2 \end{aligned} \quad (15b)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_0^{\text{DW}}}{d\ell}(q) &= -\frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|q|} \sum_{\pm} z_0^{\text{DW}}(-q, \pm(\Lambda + \frac{|q|}{2}) + \frac{q}{2})^2 \\ &\quad - \frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|q + 2\Delta k_f|} \sum_{\pm} -\frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|q - 2\Delta k_f|} \sum_{\pm} z_{\pi}^{\text{DW}}(-q + 2\Delta k_f, \pm(\Lambda + \frac{|q - 2\Delta k_f|}{2}) + \frac{q}{2} - \Delta k_f)^2 \end{aligned} \quad (15c)$$

$$\frac{d\chi_+^{\text{DW}}}{d\ell}(q) = -\frac{\Lambda}{4\Lambda + \epsilon 2|q|} \sum_{\pm} \left(z_+^{\text{DW}}(-q, \pm(\Lambda + \frac{|q|}{2}) + \frac{q}{2})^2 + z_-^{\text{DW}}(-q, \pm(\Lambda + \frac{|q|}{2}) + \frac{q}{2})^2 \right). \quad (15d)$$

η Schéma à une particule irréductible

Le schéma à une particule irréductible à été utilisé sur ces systèmes d'abord par Zanchi et Schulz [13, 14], puis par Honerkamp [173], Binz [174], Katanin [38], etc. Il ne découle pas du choix de la coupure mais d'un calcul des diagrammes à une particule irréductible, c'est à dire des diagrammes de Feynman qui reste connexe quand on coupe une branche. On définit encore une intégration sur un intervalle élémentaire $[\Lambda - \delta\Lambda, \Lambda]$ de sorte qu'en itérant la transformation élémentaire, on décrit tout l'intervalle $[0, \Lambda_0]$ que l'on veut éliminer dans l'action effective.

Cependant, Zanchi *et al* [14] ont montré que les intégrales, dans les autres branches, doivent vérifier $|k| > \Lambda$, a contrario du schéma de l'ordre de Wick. Les propagateurs de Green sont également modifiés. Par exemple, si on examine le premier terme de Cooper comme on l'a fait pour le schéma de l'ordre de Wick, on trouve des inégalités inversées, de sorte que le préfacteur dans (6) ou (7) s'écrit en définitive $1/(2\Lambda + |c|)$ et on doit changer $\epsilon = -1$ en $\epsilon = +1$ dans (8a) et les suivantes pour tous les couplages g .

De même, pour les couplages z , toujours avec les variables (k, c, p) , on obtient les mêmes équations (14a) et suivantes en changeant $\epsilon = -1$ en $\epsilon = +1$. Enfin, les équations (15a) et suivantes pour les susceptibilités χ sont modifiées de la même façon.

f Dépendance fonctionnelle des couplages

Mon premier apport dans ce domaine a été de prendre en compte de façon rigoureuse la valeur des moments dans les branches extérieures, autrement dit la dépendance en (c, l, p) . On parle de renormalisation fonctionnelle, mais, d'une part ce terme est parfois galvaudé, d'autre part, la seule innovation concerne l'introduction de k_{\parallel} : dans [20], k_{\perp} est déjà pris en compte par l'indice $\theta = 0, \pi$ des couplages.

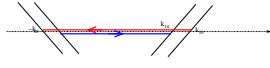
α Approximation des couplages constants

Dans la quasi totalité des articles où l'on utilise la technique de renormalisation fermionique, on néglige la dépendance en (c, l, p) . La plupart des auteurs expliquent qu'on peut supposer que les couplages g sont constants, bien qu'en réalité, on devrait plutôt écrire que $g \approx 0$ dès qu'on a $|c| \gg \Lambda_c$, $|l| \gg \Lambda_c$ ou $|p| \gg \Lambda_c$, avec $\Lambda_c \approx \max(T, \Delta k_f)$.

En réalité, les auteurs devraient plus correctement expliquer qu'on ne s'intéresse vraiment qu'aux couplages $g(0, 0, 0)$, autrement dit, en notation traditionnelle, $\mathcal{G}(k_f, -k_f, k_f, -k_f)$, où j'ai omis de préciser la bande sur laquelle on choisit le point de Fermi. Cependant, certains couplages ne peuvent être définis sur cette surface et couplent, au contraire, des couplages à différents moments. Ces processus sont souvent négligeables, ce qui fournit une meilleure justification de l'approximation utilisée couramment. Il existe cependant des situations où ces couplages ne peuvent être oubliés, comme je vais l'expliquer maintenant.

β Incohérence pour le couplage g_b

Sur les figures 5 et 4, on a représenté des interactions entre particules situées à la surface de Fermi. Ces interactions existent pourtant quand les impulsions s'écartent de la surface de Fermi (voir plus loin la figure 18) et on aurait pu les représenter ainsi, en gardant en mémoire, cependant, que, lorsque les particules sont trop éloignées de la surface de Fermi, l'interaction décroît fortement et devient négligeable.

Mieux, pour le cas des couplages g_b , les figures 5 et 4 sont fausses. Par exemple, la figure  viole la conservation de la quantité de mouvement. Pour retrouver cette loi de conservation, il faut décaler les impulsions, comme sur la figure modifiée

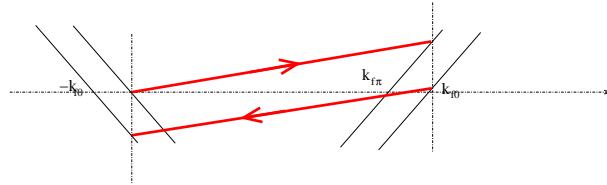


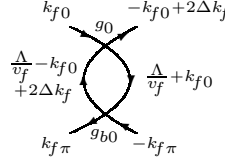
FIGURE 16 – Représentation sur la surface de Fermi à une dimension d'un couplage g_b modifiée pour respecter la conservation de l'impulsion.

On peut calculer l'écart d'impulsion qu'il faut introduire de façon exacte :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1,2} p_i - p'_i &\equiv (P_1 - k_{f0} + P_2 + k_{f\pi} - P'_2 - k_{f0} - P'_1 + k_{f\pi}) \\ &= 2(k_{f0} - k_{f\pi}) = 2\Delta k_f ; \end{aligned}$$

c'est la différence entre les deux niveaux de Fermi, qui est $\propto t_{\perp}$. Ce paramètre jalonne les calculs que j'ai menés pour prendre en compte l'écart des impulsions relatif aux niveaux de Fermi.

Dès lors que l'on écrit proprement le couplage g_b , on doit également prendre en compte des valeurs non nulles de c , l ou p pour les autres couplages. Par exemple, le développement de $\frac{dg_{b0}}{d\ell}$ comprend le terme de Peierls suivant :



qui fait apparaître un couplage $\mathcal{G}_0(k_{f0}, -k_{f0} + 2\Delta k_f, -k_{f0} + 2\Delta k_f, k_{f0})$, avec $c = 2\Delta k_f$, $l = 0$ et $p = 0$. On vérifie cependant après coup que les couplages g_b restent toujours très faibles et que ce processus devrait rester négligeable. Mais un autre mécanisme concurrent assure la promotion de ces couplages dont les pattes sont éloignées de la surface de Fermi : c'est le couplage des g_b avec les couplages divergents.

Si le flot pouvait se poursuivre jusqu'à $\ell = \infty$ sans divergence, un argument simple permettrait pourtant de s'assurer de l'absence d'influence des g_b : les équations de point fixe des couplages renormalisés ne font intervenir que les couplages dits pertinents, et ne devraient pas dépendre des g_b . Mais, comme le flot diverge et s'interrompt avant d'atteindre l'infini, cet argument ne peut être retenu, et finalement, rien n'interdit une influence effective des couplages g_b et en particulier de leur dépendance fonctionnelle en k_{\parallel} .

γ Discrétisation des impulsions

J'ai fait l'approximation suivante, qui consiste à discrétiser toutes les valeurs des impulsions selon les multiples de $2\Delta k_f$, c'est à dire assimiler tous les couplages $g(b, l, p)$ avec $|b - 2m\Delta k_f| < \Delta k_f$, $|l - 2n\Delta k_f| < \Delta k_f$ et $|p - 2p\Delta k_f| < \Delta k_f$, où $m, n, p \in \mathbb{Z}$ aux couplages $g(2m\Delta k_f, 2n\Delta k_f, 2p\Delta k_f)$, que l'on notera $g^{(mnp)}$ (en déclinant pour tous les couplages g_{t0} , etc.). Précisons que ces couplages apparaissent uniquement dans les branches fermées, où la distance de l'impulsion à la surface de Fermi est donnée par k et varie, selon les schémas de renormalisation de l'ordre de Wick et à une particule irréductible, entre $\Lambda - \delta\Lambda$ et Λ .

En pratique, on a donc $k = \Lambda$ et le signe $<$ est à prendre au sens strict, on remplace k par $2q\Delta k_f$, avec $q = \lfloor \frac{\Lambda}{2\Delta k_f} + \frac{1}{2} \rfloor$ et $\lfloor x \rfloor$ est la partie entière de x par défaut. Dans les cas d'égalité, on prend la valeur inférieure, puisqu'en fait $k = \Lambda^-$ (on a $\delta\Lambda > 0$).

Si $\Lambda_0 \ll \Delta k_f$, cette discrétisation est toujours bien justifiée. Par contre, pour $\Lambda_0 > \Delta k_f$, on distinguera deux régimes pendant le flot de renormalisation : pendant une première phase, les branches internes produisent des nouveaux couplages, de façon plus efficace que les couplages g_b , et assurent, en retour, une relative promotion de ces couplages g_b . Pendant la seconde phase, on se retrouve dans le premier cas étudié avec $\Lambda \ll \Delta k_f$ et les comportements se figent.

J'avais initialement projeté d'étudier également une discrétisation deux fois plus fine, mais nous nous sommes finalement convaincus que les résultats ne seraient pas

qualitativement différents, et que le gain quantitatif ne méritait pas d'y consacrer du temps, plus utile à d'autres analyses.

Chaque couplage g^{000} , g^{100} , g^{010} , g^{001} , etc., vérifie une équation différentielle différente. La valeur maximale des nombres m , n , p , est toujours plus grande d'une unité dans le terme de droite de l'équation différentielle. Autrement dit, même avec cette approximation, il faudrait inclure un nombre infini de couplages. On limite le nombre de couplages; on note n_{\max} et, pour $m > n_{\max}$, $n > n_{\max}$ ou $p > n_{\max}$, les couplages ne sont plus renormalisés mais constants (on distingue toujours, bien sûr, entre g_0 , g_{0t} , etc., on constate qu'en pratique on ne distinguera pas ici les couplages g_0 et g_π , ni g_{t0} et $g_{t\pi}$, etc).

Cette procédure de troncature admet deux variantes. Soit on impose que les couplages sont nuls pour les écarts à la surface de Fermi suffisamment grands. Soit on impose qu'ils sont constants, dans ce cas, on a simplement choisi la valeur nue non renormalisée. La première variante est justifiée quand $\Delta k_f \gg \Lambda_0$. La seconde l'est dans l'hypothèse inverse. Cependant, comme Λ décroît au fur et à mesure du flot de renormalisation, il faudrait, en toute rigueur, passer d'une variante à l'autre en fonction de ℓ . En pratique, on n'a pas constaté de différence très marquée entre les deux variantes, et je n'ai pas modifié la procédure pendant le flot.

Même en tronquant le nombre de couplages de cette façon, il reste beaucoup trop grand, mais on n'a pas pris en compte les symétries du système. En effet, en appliquant les différentes symétries du système, on identifie un très grand nombre de couplages. L'ensemble des couplages identifiés s'appelle une orbite, et il suffit de résoudre les différentes équations différentielles entre orbites (il suffit de choisir n'importe quel couplage d'une orbite pour la représenter dans l'équation). Si on choisit $n_{\max} = 3$, on trouve 390 orbites différentes. Si on choisit $n_{\max} = 4$, on en trouve 806.

g Symétries

On va étudier les différentes symétries qui sont la conjugaison, l'échange (antisymétrique) entre particules entrantes, l'échange (antisymétrique) entre particules sortantes, la parité, la rotation d'un demi-tour dans l'espace de spin et les symétries miroir selon les axes \parallel ou \perp . S'y ajoute la symétrie $d_{x^2-y^2}$, qui mérite une section particulière. Concernant cette section, on trouvera de plus amples détails dans [21].

α Symétries ordinaires

La conjugaison C correspond à une transformation $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}$, $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ et $\sigma \rightarrow -\sigma$. L'échange antisymétrique A entre particules entrantes consiste à échanger P_1 et P_2 , l'échange antisymétrique A' à échanger P'_1 et P'_2 . La parité correspond à une transformation $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ et $\sigma \rightarrow \sigma$. La rotation S dans l'espace de spin s'écrit $\sigma \rightarrow -\sigma$. Enfin, p_x la symétrie miroir selon l'axe \parallel agit sur les impulsions d'une bande donnée tandis que p_y échange les bandes. On a $P = p_x p_y$ et il y a parfois une confusion entre P et p_x . On peut également identifier CP à une inversion du temps, qui est commode à utiliser, puisqu'on transforme $(P_1, P_2, P'_1, P'_2) \rightarrow (P'_2, P'_1, P_2, P_1)$.

On ne s'intéresse pas à toutes les transformations par symétrie. Si on s'en tient aux seuls couplages $\Gamma^{(4)}$, on ne doit pas garder les transformations $R^\dagger L^\dagger R L \rightarrow L^\dagger R^\dagger R L$ par exemple. De ce fait, on utilise seulement la conservation par les deux

symétries suivantes : PAA' , qui donne

$$\begin{aligned} g_i(c, l, p) &= g_i(-c, l, p) \quad i = 0, \pi, t0, t\pi \\ g_{f\pi}(c, l, p) &= g_{f0}(-c, l, p) \\ g_{b\pi}(c, l, p) &= g_{b0}(-c, l - 2\Delta k_f, p - 2\Delta k_f) \end{aligned} \quad (16a)$$

et PC , qui donne

$$\begin{aligned} g_i(c, l, p) &= g_i(c, -l, p) \quad i = 0, \pi, f0, f\pi \\ g_{t\pi}(c, l, p) &= g_{t0}(c, -l, p) \\ g_{b\pi}(c, l, p) &= g_{b0}(c - 2\Delta k_f, -l, p - 2\Delta k_f). \end{aligned} \quad (16b)$$

Pour les couplages tripodes supraconducteurs, on utilise finalement la symétrie PA (équivalente à PA') d'où :

$$\begin{aligned} z_{s\theta}^{\text{SC}}(c, k) &= z_{s\theta}^{\text{SC}}(-c, k - c) \quad \theta = 0, \pi \\ z_{t0}^{\text{SC}}(c, k) &= z_{t\pi}^{\text{SC}}(-c, k - c) \\ z_{s-}^{\text{SC}}(c, k) &= \pm z_{s+}^{\text{SC}}(-c, k - c) \\ z_{t-}^{\text{SC}}(c, k) &= \pm z_{t+}^{\text{SC}}(-c, k - c) \end{aligned} \quad (17)$$

avec $\pm = +$ pour les symétries s et p_x , et $\pm = -$ pour les symétries d , g , f_x et f_y . Pour les couplages tripodes Onde de Densité, on utilise la symétrie CA et on trouve :

$$\begin{aligned} z_{\theta}^{\text{DW}}(p, k) &= \pm z_{\theta}^{\text{DW}}(p, p - k) \quad \theta = 0, \pi \\ z_{-}^{\text{DW}}(p, k) &= \pm z_{+}^{\text{DW}}(p, p - k) \end{aligned} \quad (18)$$

où $\pm = +$ pour les couplages site et $\pm = -$ pour les couplages lien.

β Symétrie spéciale $d_{x^2-y^2}$

On remarque qu'aucune relation ne lie g_0 et g_{π} . C'est une question très intéressante parce qu'ils sont égaux au départ du flot : à $\ell = 0$ $g_0(0) = g_{\pi}(0) = U$, le couplage du hamiltonien de Hubbard ; que leurs équations de renormalisation sont égales, et, plus généralement, ces deux couplages ont un rôle symétrique dans toutes les équations ; de sorte qu'ils sont égaux à tout ordre de perturbation.

Cela vient d'une symétrie supplémentaire $d_{x^2-y^2}$. Ce point a été décrit par de nombreux auteurs (par exemple [175]) mais ceux-ci ne discutent jamais l'origine de cette symétrie. Or, en raison de la structure particulière de la surface de Fermi (à deux bandes), la symétrie $d_{x^2-y^2}$ qui existe à deux dimensions n'est pas définie pour ce système.

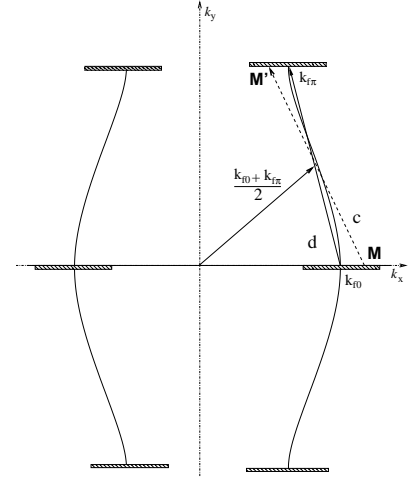


FIGURE 17 – Symétrie $d_{x^2-y^2}$ pour une échelle fermionique. On trouve deux symétries possible, soit \tilde{C} l'inversion autour du point au bout du vecteur k_f , qui fait correspondre les points M et M' , soit la translation par le vecteur Δk_f , qui envoie le point M sur le symétrique de M' par rapport à $k_{f\pi}$ (non représenté ici).

On peut trouver deux symétries, qui prolongent de façon correcte $d_{x^2-y^2}$ dans l'espace de phase d'une échelle fermionique (elles sont notées \tilde{C} et \mathcal{C} dans [21]). Il s'agit de l'inversion autour de points spéciaux $\pm k_f$ (où l'on comprend les vecteurs bidimensionnels avec l'addition vectorielle, $\pm = +$ pour les particules allant à droite R et $\pm = -$ pour celles allant à gauche L) et de la translation par le vecteur $\pm \Delta k_f$ (avec la même convention vectoriel et le même signe \pm), représentées sur la figure 17 ci-avant.

Cependant, la translation ne convient pas parce qu'elle n'est pas conservée par les couplages g_b , z_+ et z_- , alors que \mathcal{H}_{cin} et \mathcal{H}_{int} conserve \tilde{C} . On identifiera dès lors cette symétrie avec $d_{x^2-y^2}$ tout en se rappelant qu'il s'agit d'une identification conventionnelle, à vocation pédagogique, qui permet notamment de mieux faire le parallèle entre ce système d'une échelle fermionique et le système de chaînes faiblement couplées.

En particulier, si on l'examine de façon plus détaillée sur un schéma à une dimension, on est frappé par le caractère non canonique de cette symétrie, pour une échelle fermionique, alors qu'elle est canonique pour un système unidimensionnel :

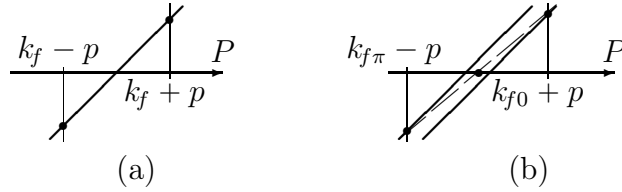


FIGURE 18 – Symétrie $d_{x^2-y^2}$ autour des points de Fermi : (a) pour un système à une bande; (b) pour un système à deux bandes.

Les équations qui découlent de cette symétrie supplémentaire s'écrivent

$$\begin{aligned}
 g_\pi(c, l, p) &= g_0(-c, -l, -p) \\
 g_{f\pi}(c, l, p) &= g_{f0}(-c, -l, -p) \\
 g_{t\pi}(c, l, p) &= g_{t0}(-c, -l, -p) \\
 g_{b\pi}(c, l, p) &= g_{b0}(-c, -l, -p)
 \end{aligned} \tag{19}$$

pour les couplages g_i . Pour ce qui concerne les couplages z_i^{SC} , on trouve

$$\begin{aligned}
 z_\pi^{\text{SC}}(c, k) &= \pm z_0^{\text{SC}}(-c, -k) \\
 z_-^{\text{SC}}(c, k) &= \pm z_+^{\text{SC}}(-c, -k)
 \end{aligned} \tag{20}$$

où $\pm = +$ pour les symétries s et p_x et $\pm = -$ pour les symétries d , g , f_x et f_y . Pour ce qui concerne les couplages z_i^{DW} , on trouve

$$\begin{aligned}
 z_\pi^{\text{DW}}(p, k) &= \pm z_0^{\text{DW}}(-p, -k) \\
 z_-^{\text{DW}}(p, k) &= \pm z_+^{\text{DW}}(-p, -k)
 \end{aligned} \tag{21}$$

où $\pm = +$ pour les couplages site et $\pm = -$ pour les couplages lien.

h Modulation de la diffusion arrière interchaînes

Dans les systèmes supraconducteurs classiques, on attend l'apparition de paires de Cooper de symétrie singulet et d'Ondes de Densité de Spin. Pourtant, sous champ magnétique, il est possible d'observer des paires de symétrie triplet, ainsi que des Ondes de Densité de Charge. On étudiera ces mécanismes dans le chapitre C, mais je dois les citer ici car, sous l'impulsion de C. Bourbonnais, nous les avons également étudiés par le groupe de renormalisation.

En effet, on peut introduire une modulation de certains couplages, qui modélise exactement l'effet du champ magnétique. Plus précisément, on introduit la modulation dans les paramètres nus à $\ell = 0$, en choisissant comme conditions initiales les couplages : $g_{01} = U + C_{\text{arr}}$, $g_{f01} = U - C_{\text{arr}}$, $g_{t01} = U - C_{\text{arr}}$ and $g_{b01} = U + C_{\text{arr}}$.

La modulation précédente correspond à une modulation de la diffusion arrière interchaînes. On peut aussi introduire une modulation de la diffusion avant et écrire : $g_{02} = U + C_{\text{av}}$, $g_{f02} = U + C_{\text{av}}$, $g_{t02} = U - C_{\text{av}}$ et $g_{b02} = U - C_{\text{av}}$, voire mêler les deux. Cela dit, seule la modulation de la diffusion arrière donne des résultats intéressants, dans les diagrammes de phase.

i Diagrammes de phase

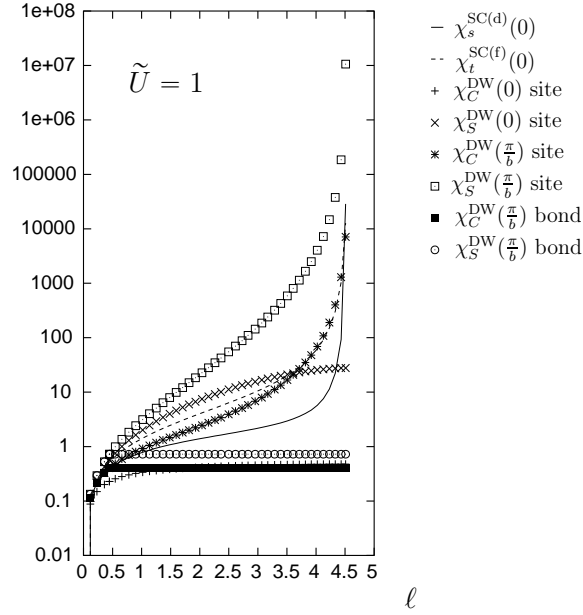
α Divergences des susceptibilités

Les susceptibilités, correspondant aux différents paramètres d'ordre introduits plus haut, ne divergent pas toutes, quand ℓ croît. Mais il y en a toujours au moins une qui diverge. On considère alors qu'elle correspond à un mécanisme dominant, autrement dit qu'on peut négliger les autres mécanismes.

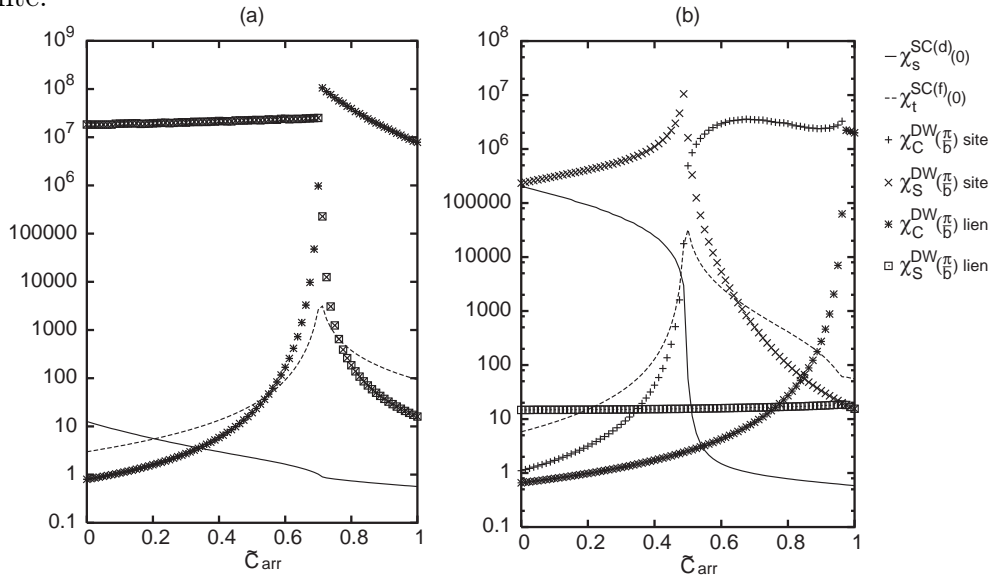
Souvent, on observe deux divergences simultanées. Voici figure 19 un exemple, quand on choisit les paramètres $2t_{\perp}/\Lambda_o = 0,32$ et $aC_{\text{arr}}/(\pi v_f) = 0,18$, où quatre susceptibilité (une supraconductrice singulet d intra-bande, une supraconductrice triplet f_x intra-bande, une Onde de Densité de Spin interbandes sur site, une Onde de Densité de Charge interbandes sur site) divergent simultanément.

C'est un cas très exotique, avec une grande simultanéité de mécanismes. On verra au chapitre C que la supraconductivité de ce système est très non conventionnelle et qu'elle coexiste naturellement avec des Onde de Densité; plus précisément, la supraconductivité singulet est associée avec des instabilités Onde de Densité de Spin, tandis que la supraconductivité triplet est associée avec des instabilités Onde de Densité de Charge.a

Certains théoriciens discutent, dans le cas de divergences simultanées, de l'importance de distinguer si les susceptibilités divergent pour une même valeur critique ℓ_c ou non. Si non, celle à laquelle correspond la plus petite valeur de ℓ_c est la plus pertinente. Dans notre système, les divergences sont toujours simultanées sans erreur possible. Dans ce cas, la discussion porte plutôt sur l'importance relative des divergences, qui donnerait une indication des poids respectifs des mécanismes correspondants. J'ai essayé de mesurer cette importance relative, mais c'est très difficile. D'ailleurs, de façon plus générale, on est sur une faille théorique. Rien ne prouve, mathématiquement, qu'une divergence plus grande soit un signe certain d'une plus grande pertinence du mécanisme associé, même si cela semble très raisonnable.


 FIGURE 19 – Flot des susceptibilités pour $2t_{\perp}/\Lambda_o = 0,32$ et $aC_{\text{arr}}/(\pi v_f) = 0,18$.

Pour rendre plus lisible les divergences des diverses susceptibilités, j'ai tracé leur valeur au moment où le flot s'interrompt à cause de ces divergences (on verra dans le chapitre C que d'autres choix sont possibles). Voici par exemple deux figures de ces valeurs des susceptibilités $\chi(\ell_c)$ en fonction de C_{arr} , pour deux valeurs différentes de t_{\perp} (le recouvrement entre orbitales des deux montants de l'échelle). Pour $2t_{\perp}/\Lambda_o = 0,01$, il n'y a pas de supraconductivité, sauf en un point de transition. Pour $2t_{\perp}/\Lambda_o = 0,1$, on voit figure 20 la disparition progressive de la supraconductivité, quand C_{arr} augmente.


 FIGURE 20 – Courbe de $\chi(\Lambda_c)$ versus C_{arr} pour $\frac{Ua}{\pi v_f} = 1$ et (a) $\frac{2t_{\perp}}{\Lambda_o} = 0,01$; (b) $\frac{2t_{\perp}}{\Lambda_o} = 0,1$.

Cette méthode permet de visualiser la très grande richesse du diagramme de

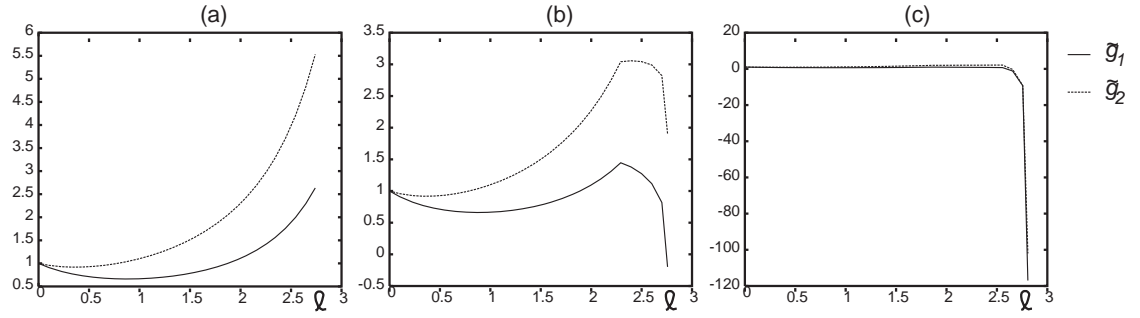


FIGURE 21 – Flot des couplages \tilde{g}_{01} et \tilde{g}_{02} pour : (a) $t_{\perp} \lesssim t_{\perp c}(U)$; (b) $t_{\perp} = t_{\perp c}(U)$; (c) $t_{\perp} \gtrsim t_{\perp c}(U)$.

phase et la puissance du groupe de renormalisation, qui permet d'explorer ce diagramme. Toutefois, je voudrais expliquer une certaine incohérence qui réside dans ces diagrammes de phase, avant de les présenter.

β Divergence des couplages d'interaction

Les couplages g à deux particules divergent également. C'est peut-être un artefact dû à la méthode choisie, car, par un schéma de renormalisation à deux particules irréductible, Dupuis obtient des constantes de couplages renormalisées non divergentes [176]. Quoiqu'il en soit, c'est un échec de la méthode de renormalisation, selon les schémas que j'ai utilisés, puisqu'on ne peut obtenir d'action effective. En particulier, un des plus graves problèmes qui en résulte et n'est pas souvent mentionné est que tous les diagrammes de phase sont déterminés en fonction des paramètres nus (t_{\perp} , U , C_{arr}). Or, par essence, ce sont les paramètres effectifs renormalisés qui sont sensés décrire les systèmes physiques. La lecture et l'interprétation de nos diagrammes de phase est très délicate, malgré leur indiscutable richesse.

Ceci écrit, l'étude du flot des g est très intéressante. Sur les figures 21, on distingue plusieurs comportements, selon la valeur de t_{\perp} . En fait, quand t_{\perp} est suffisamment petit, comme sur la figure (a), le flot diverge avant que les couplages g aient divergé. Si t_{\perp} est suffisamment grand, comme sur la figure (c), on observe un changement de comportement très net à partir d'une certaine valeur ℓ du flot, qui correspond en fait à $\Lambda \sim \Delta k_f$. La figure (b) correspond à un cas intermédiaire. $t_{\perp c}$ est une valeur critique, qu'on introduira à la section suivante.

Ce qui est vraiment intéressant sur ces courbes est le changement de signe des couplages. Si on met des couplages positifs, on ne favorise pas la supraconductivité, puisqu'il faut une énergie positive pour créer une paire de Cooper. Mais, quand les couplages deviennent négatifs, cela signifie que la supraconductivité existe, puisque les paires peuvent se former spontanément. C'est bien sûr cohérent avec les phases supraconductrices que l'on observe, mais c'est très intéressant, puisqu'il n'y a pas de phonons dans ce modèle : ce n'est pas l'interaction avec le réseau cristallin qui est responsable de la supraconductivité dans ces modèles de basse dimension mais l'interférence entre mécanismes Onde de Densité (lié au magnétisme) et supraconductivité, reliée à l'effet Kohn-Luttinger [177]. Comme expliqué dans [178], les diagrammes du premier ordre s'annulent, ce qui explique le signe de l'interaction résultante.

γ Transition Onde de Densité / supraconductivité

La prise en compte des moments des pattes extérieures des diagrammes $\Gamma^{(4)}$, bien que modélisée de façon très schématique, a permis de révéler une partie du diagramme de phase ignorée par Fabrizio [20]. On l'a déjà repérée dans les flots ci-dessus : quand t_{\perp} est suffisamment petit, il n'y a pas de divergence des susceptibilités supraconductrices (les couplages g_{0i} restent positifs) et le système est antiferromagnétique (c'est à dire qu'il développe seulement des Ondes de Densité de Spin). On définit donc une valeur critique $t_{\perp c}$ à partir de laquelle apparaît de la supraconductivité. On vérifie sur la figure suivante la disparition de la supraconductivité pour $t_{\perp} = t_{\perp c}$:

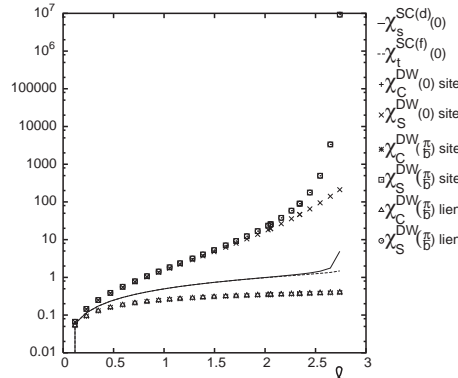


FIGURE 22 – Flot des susceptibilités, pour $Ua/(\pi v_f) = 1$ et $2t_{\perp}/\Lambda_o = 0,016$. La susceptibilité supraconductrice $\chi_s^{SC(d)}(0)$ reste nulle à ℓ_c .

La disparition de la supraconductivité en l'absence de champ magnétique et l'apparition d'une phase Onde de Densité sont bien connue dans les échelles fermioniques, bien qu'elles n'apparaissent pas dans le diagramme de Fabrizio. On peut renforcer les Ondes de Densité avec le paramètre C_{av} et faire apparaître des structures plus riches. Voici par exemple le flot de renormalisation pour $t_{\perp}/\Lambda_o = 0,02$ et $aC_{av}/(\pi v_f) = 0,95$:

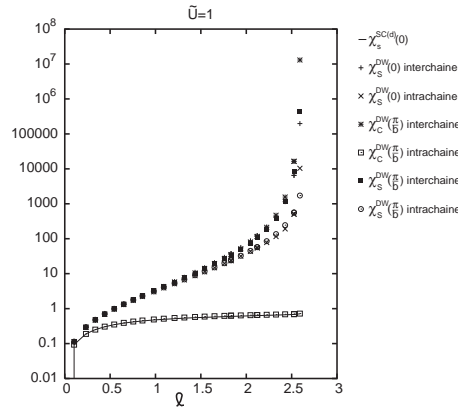


FIGURE 23 – Flot des susceptibilités pour $t_{\perp}/\Lambda_o = 0.02$ et $aC_{av}/(\pi v_f) = 0.95$.

Pour d'autres valeurs des paramètres nus, au contraire, les flots de renormalisation ne se distinguent pas, selon qu'on prend en compte les moments extérieurs ou non. Voici par exemple un flot de renormalisation des susceptibilités pour $t_{\perp} > t_{\perp c}$, où l'on distingue bien la divergence de la supraconductivité et le plateau de la susceptibilité Onde de Densité de Spin :

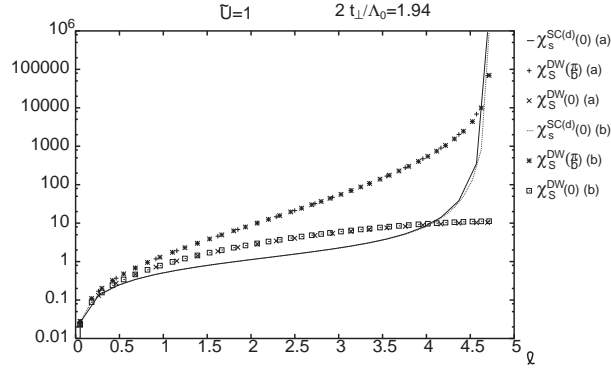


FIGURE 24 – Flot des susceptibilités $\chi_s^{SC(d)}$ et χ_S^{DW} (intra ou interbandes), pour $Ua/(\pi v_f) = 1$ et $2t_\perp/\Lambda_0 = 1,94$: selon la procédure usuelle (a) ; en prenant en compte les dépendances des moments des pattes extérieures (b).

On peut résumer l'ensemble de ces données dans un diagramme de phase. Dans la zone centrale les susceptibilités supraconductrice et Onde de Densité de Spin divergent simultanément.

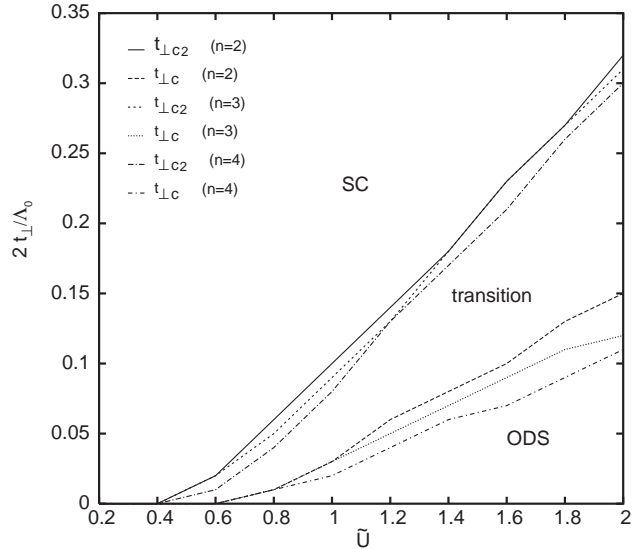


FIGURE 25 – Diagramme de phase en fonction des paramètres nus t_\perp et U . Il apparaît une phase Onde de Densité de Spin, qui est révélée grâce à ma méthode de renormalisation fonctionnelle.

δ Symétrie des paires supraconductrices

On étudiera en détail la transition singulet/triplet de la phase supraconductrice dans le chapitre C. On l'observe déjà dans les diagrammes qui ont été présentés ci-dessus.

Observons les courbes de $\chi(\ell_c)$ en fonction de t_\perp pour deux valeurs différentes de C_{arr} . À petit t_\perp , il n'y a pas de supraconductivité. Pour le cas $aC_{arr}/(\pi v_f) = 0,6$, il apparaît une bande où la supraconductivité triplet supplante la supraconductivité singulet ; à part ce mécanisme, les comportements sont assez similaires, avec en particulier un effondrement de la susceptibilité Onde de Densité de Charge sur lien concomitant avec l'émergence de la supraconductivité. Toutefois, à grand t_\perp , pour

$aC_{\text{arr}}/(\pi v_f) = 0,4$, c'est la susceptibilité Onde de Densité de Spin qui prend le dessus, tandis que pour $aC_{\text{arr}}/(\pi v_f) = 0,6$, c'est la susceptibilité Onde de Densité de Charge.

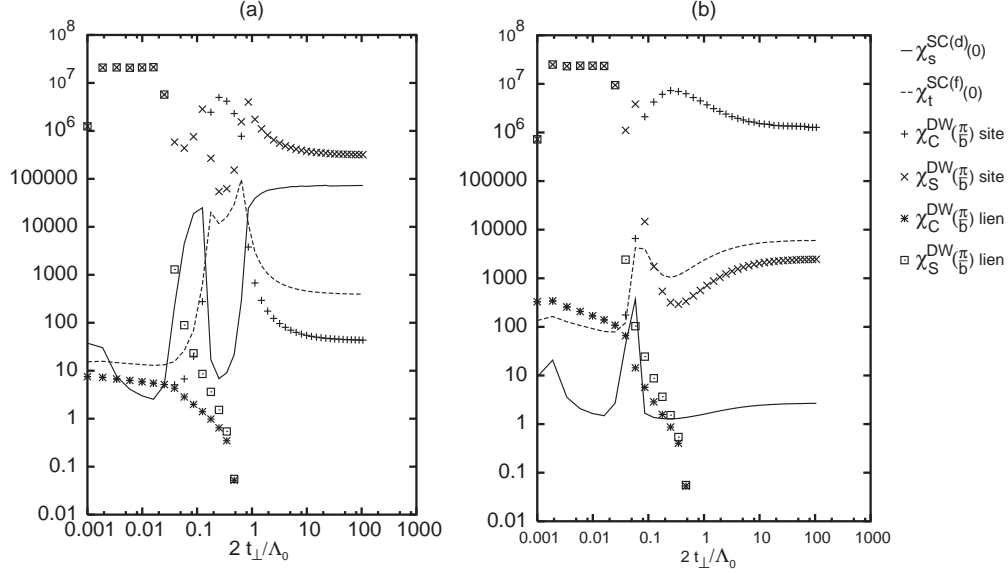


FIGURE 26 – Courbes des susceptibilités $\chi(\ell_c)$ en fonction de $2t_{\perp}/\Lambda_0$, pour : (a) $aC_{\text{arr}}/(\pi v_f) = 0,4$; (b) $aC_{\text{arr}}/(\pi v_f) = 0,6$.

On peut résumer l'ensemble des comportements dans le diagramme de phase en fonction de t_{\perp} et de C_{arr} , en se rappelant que son interprétation reste problématique :

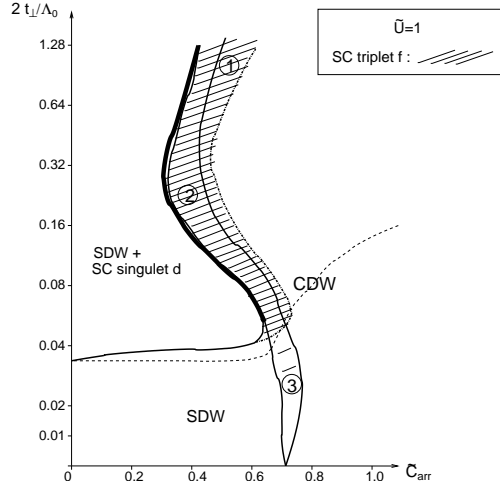


FIGURE 27 – Diagramme de phase pour $Ua/(\pi v_f) = 1$ en fonction de t_{\perp} et C_{arr} . La supraconductivité est de symétrie triplet dans la zone hachurée. La ligne hachurée indique une transition au dessus de laquelle les Onde de Densité sur site et sur lien se séparent, tandis qu'elles sont indistinguables en dessous. Les fluctuations Onde de Densité de Spin disparaissent au delà des zones (2) et (3). La ligne épaisse indique une coexistence de quatre divergences, le reste est expliqué sur la figure.

2 Renormalisation de la surface de Fermi

On a parfois critiqué, à propos de mon travail, lors de conférences ou de séminaires, l'absence de renormalisation de la surface de Fermi, c'est à dire du propagateur de Green. Pourtant, j'ai expliqué dans la première partie de cette thèse la cohérence de notre approche (qui est celle de nombreux auteurs également [38, 174]).

Ce n'est donc pas cette motivation, qui m'a poussé sur ce prolongement de notre travail. Dans un article de Schulz [179] est prédite la possibilité que les flots de renormalisation dépendent du schéma choisi. Bien que les équations de renormalisation soient différentes, les équations de point fixe ne dépendent pas du schéma de renormalisation. Cependant, encore une fois, comme le flot diverge et s'interrompt, on ne peut utiliser cet argument et écarter une telle possibilité. D'ailleurs, dans [38] est déjà mentionné un tel mécanisme, mais par une seule allusion discrète et non développée.

a Calcul de l'énergie propre

Pour renormaliser l'énergie propre Σ , il faut la développer diagrammatiquement au deuxième ordre en boucles [12, 20, 176].

On note $G_0 = Z/(-i\omega + v_f(K - k_{f0} + \mu))$ (resp. $G_\pi = Z/(-i\omega + v_f(K - k_{f\pi} + \mu))$) les propagateurs libres des états R se dirigeant vers la droite d'impulsion $k_\perp = 0$ (resp. $k_\perp = \pi/b$), et μ le potentiel chimique. On a, en notant $\theta = 0, \pi$ selon les cas,

$$\Sigma_{R\theta} = \delta G_0^{-1} = \frac{1}{Z}(\delta v_f(K - k_{f\theta}) - v_f \delta k_{f\theta} + \delta \mu) - \frac{G_0^{-1}}{Z} \delta Z .$$

α Diagramme à une boucle

De façon identique au développement du terme d'interaction de l'action, présenté rapidement page 59, on doit développer le terme cinétique (qui est simplement quadratique) et qu'on notera S_0 . Le couplage \mathcal{G}_4 (défini à la note 3 page 46) peut donner une contribution non divergente, mais qu'on ne peut négliger ici. En fin de compte, on va trouver que cette contribution est nulle.

Le diagramme correspondant est un terme à une boucle, représenté figure 28. En écrivant le propagateur et la somme $S_0 = \sum_K \Psi_K^\dagger G_K \Psi_K$, on trouve :

$$\begin{aligned} \delta S_0 &= \frac{T}{N} \sum_{KK'} \left(\Gamma(K', K, K, K') + \Gamma(K, K', K', K) \right. \\ &\quad \left. - \Gamma(K', K, K', K) - \Gamma(K, K', K, K') \right) \Psi_K^\dagger G_{K'} \Psi_K \\ &= \frac{4T}{N} \sum_{KK'} \Gamma(K', K, K, K') \Psi_K^\dagger G_{K'} \Psi_K \\ &= \frac{4T}{N} \mathcal{G}_4 \left(\sum_{K'} G_{K'} \right) \sum_K R_K^\dagger R_K + \frac{4T}{N} \sum_{KK'} \left(\underbrace{\mathcal{G}_2 - \mathcal{G}_1}_{\text{spin } \parallel} + \underbrace{\mathcal{G}_2}_{\text{spin } \perp} \right) R_K^\dagger R_K + (R \leftrightarrow L) . \end{aligned}$$

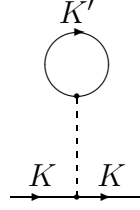


FIGURE 28 – Diagramme à une boucle d'un propagateur.

On néglige ici la dépendance en K , il y a alors un facteur commun

$$\frac{4T}{N} \sum_K \frac{-1}{i\omega - \varepsilon} \xrightarrow{T \rightarrow 0} -\frac{2\delta\Lambda}{\pi v_f}$$

et le terme

$$\delta S_0 = -\frac{2\delta\Lambda}{\pi v_f} (\mathcal{G}_4 + 2\mathcal{G}_2 - \mathcal{G}_1) \delta\Lambda \Psi_K^\dagger \Psi_K$$

s'interprète [12] comme une contribution de la renormalisation de la surface de Fermi $\sum_K \delta\mu \Psi_K^\dagger \Psi_K$, ce qui donne

$$\delta\mu = -\frac{2\delta\Lambda}{\pi v_f} (\mathcal{G}_4 + 2\mathcal{G}_2 - \mathcal{G}_1) \delta\Lambda .$$

Au final, on trouve, à cet ordre,

$$\delta k_{f0} = -\delta k_{f\pi} = \frac{Z}{\pi v_f^2} \times \left(g_{\pi 2} - g_{02} + g_{f\pi 2} - g_{f02} - \frac{g_{\pi 1} - g_{01} + g_{f\pi 1} - g_{f01}}{2} \right). \quad (22)$$

β Diagrammes à deux boucles

Le développement diagrammatique contient deux termes à deux boucles, qui sont représentés sur la figure 29. Ces termes proviennent uniquement du facteur $\frac{1}{2} \langle \mathcal{S}_{\text{int}}^2 \rangle_>$ (cf. page 59), qui peut s'écrire

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \langle \mathcal{S}_{\text{int}}^2 \rangle_> &= \frac{T^2}{2N^2} \sum_{\substack{K_1 K_2 K'_1 K'_2 \\ \sigma_1 \sigma_2 \sigma'_1 \sigma'_2}} \mathcal{G}(K_1, K_2, K'_2, K'_1) \sum_{\substack{\tilde{K}_1 \tilde{K}_2 \tilde{K}'_1 \tilde{K}'_2 \\ \tilde{\sigma}_1 \tilde{\sigma}_2 \tilde{\sigma}'_1 \tilde{\sigma}'_2}} \mathcal{G}(\tilde{K}_1, \tilde{K}_2, \tilde{K}'_1, \tilde{K}'_2) \psi_{K'_1 \sigma'_1}^\dagger \psi_{K'_2 \sigma'_2}^\dagger \psi_{K_1 \sigma_1} \psi_{K_2 \sigma_2} \\ &\times \psi_{\tilde{K}'_1 \tilde{\sigma}'_1}^\dagger \psi_{\tilde{K}'_2 \tilde{\sigma}'_2}^\dagger \psi_{\tilde{K}_1 \tilde{\sigma}_1} \psi_{\tilde{K}_2 \tilde{\sigma}_2} \delta(K'_1 + K'_2 - K_1 - K_2) \delta(\tilde{K}'_1 + \tilde{K}'_2 - \tilde{K}_1 - \tilde{K}_2) \\ &= \frac{T^2}{N^2} \sum_{\substack{KK'K''K''' \\ \sigma\dots}} \psi_{K\sigma}^\dagger \psi_{K\sigma} G_{K'} G_{K''} G_{K'''} \left(\mathcal{G}(K, K', K'', K''') - \mathcal{G}(K', K, K'', K''') \right) \\ &\times \left(\mathcal{G}(K''', K'', K', K) - \mathcal{G}(K'', K''', K', K) \right. \\ &\left. + \mathcal{G}(K''', K'', K, K') - \mathcal{G}(K'', K''', K, K') \right) \times \delta(K + K' - K'' - K''') \\ &+ \frac{16T^2}{N^2} \sum_{\substack{KK''K''' \\ \sigma\dots}} \psi_{K\sigma}^\dagger \psi_{K\sigma} G_{K'}^2 G_{K'''} \mathcal{G}(K, K', K', K) \mathcal{G}(K', K''', K''', K'). \end{aligned}$$

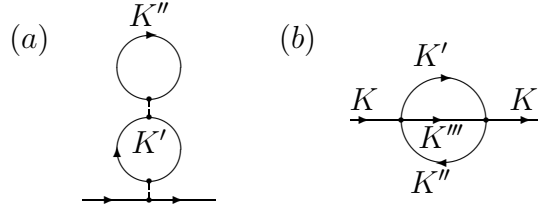


FIGURE 29 – Diagrammes à deux boucles d'un propagateur.

On n'a pas précisé les valeurs de spin, qui ont été déjà traité auparavant. Le deuxième terme qui correspond au diagramme Fig. 29 (a) ne contribue pas. Pour s'en convaincre, calculons-le dans le formalisme à température non nulle en prenant la limite $T \rightarrow 0$. Si on met la coupure sur la branche K' (définie sur la figure 29), il vient les facteurs

$$\sum_{K'''} G_{K'''} \widetilde{T \rightarrow 0} - \frac{1}{T} n(k''' - k_f) \text{ et } \sum_{K'} G_{K'}^2 \widetilde{T \rightarrow 0} \frac{1}{T^2} \frac{e^{\beta \varepsilon'}}{(1 + e^{\beta \varepsilon'})^2} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0 \text{ sauf pour } \Lambda \ll T,$$

n étant la fonction de Fermi $1/(1 + e^{\beta v_f x})$. Si on met la coupure sur K''' , avec le schéma à une particule irréductible, on obtient la même conclusion. Par contre, pour le schéma de l'ordre de Wick, il vient une contribution pour $\varepsilon' \simeq \alpha \approx 0$, qui vaut

$$\begin{aligned} \int_0^\alpha \frac{e^{\beta x}}{(1 + e^{\beta x})^2} dx &= \frac{1}{\beta} \int_0^{\alpha \beta} \frac{e^u}{(1 + e^u)^2} dx = \frac{1}{\beta} \int_0^{\alpha \beta} \frac{dy}{(1 + y)^2} = \frac{1}{\beta} \left[\frac{-1}{1 + y} \right]_0^{\alpha \beta} \\ &= \frac{1}{\beta} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{1 + e^{\alpha \beta}} \right) \begin{cases} \widetilde{\alpha \ll T} \frac{\alpha}{4} ; \\ \widetilde{\alpha \gg T} \frac{1}{2\beta} . \end{cases} \end{aligned}$$

Le diagramme (a) s'écrit, en représentation (c, l, p) , $-\frac{4\delta\Lambda}{v_f^2 \pi^2} g(k, k, 0) g(\Lambda, \Lambda, 0) \frac{\Lambda}{4T}$ et est négligeable, sauf quand $\Lambda \rightarrow 0$ trop rapidement. Bourbonnais trouve une contribution deux fois plus petite, ce qui est cohérent parce qu'il utilise un schéma mixte qui mélange celui de l'ordre de Wick et celui à une particule irréductible [180]. Par contre, le calcul a été fait à $T = 0$ par Douçot et Dusuel [12] et donne une contribution nulle. Par la suite, nous avons omis la contribution de ce graphe (a), quoique ce point soit loin d'être définitivement élucidé.

Le second diagramme (b) *sunrise* correspond au premier terme dans le gros calcul qui précède et donne trois contributions. Les deux premières, qu'on peut identifier par la symétrie AA' , divergent de façon logarithmique. La troisième contient le couplage \mathcal{G}_4 et donne :

$$\begin{aligned} \delta(\Delta k_f) \Big|_{\mathcal{G}_4}^{2\text{boucles}} &= -\frac{4ZU^2\delta\Lambda}{\pi^2 v_f^3} \times \left(\int_{-\Lambda+2v_f\Delta k_f}^0 \frac{d\varepsilon}{-2\Lambda+2v_f\Delta k_f} - \int_{-\Lambda-2v_f\Delta k_f}^0 \frac{d\varepsilon}{-2\Lambda-2v_f\Delta k_f} \right. \\ &\quad \left. + \int_0^{\Lambda+2v_f\Delta k_f} \frac{d\varepsilon}{2\Lambda+2v_f\Delta k_f} - \int_0^{\Lambda-2v_f\Delta k_f} \frac{d\varepsilon}{2\Lambda-2v_f\Delta k_f} \right) \\ &= -\frac{4ZU^2\delta\Lambda}{\pi^2 v_f^3} \times \begin{cases} \frac{1+2v_f\Delta k_f/\Lambda}{1+v_f\Delta k_f/\Lambda} \text{ si } \Lambda \leq 2v_f\Delta k_f ; \\ \frac{2v_f\Delta k_f/\Lambda}{1-v_f^2\Delta k_f^2/\Lambda^2} \text{ si } \Lambda \geq 2v_f\Delta k_f . \end{cases} \end{aligned}$$

Je ne peux détailler tous les calculs. À chaque fois on doit sommer

$$\frac{-1}{(\mathrm{i}\omega' - \varepsilon')(\mathrm{i}\omega'' - \varepsilon'')(\underbrace{\mathrm{i}\omega''' - \varepsilon'''}_{=\omega' + \Omega - \omega''})} = \frac{-1}{\mathrm{i}(\omega'' - \varepsilon'')(\varepsilon' - \varepsilon''' + \mathrm{i}(\Omega - \omega''))}$$

$$\times \left(\frac{1}{\mathrm{i}\omega' - \varepsilon'} - \frac{1}{\mathrm{i}\omega' - \varepsilon''' + \mathrm{i}(\Omega - \omega'')} \right)$$

où Ω est l'énergie dans les pattes extérieures. On fait la somme sur K' , c'est à dire $(T/N) \sum_{K'}$, il vient

$$\frac{1}{(\mathrm{i}\omega'' - \varepsilon'')(\mathrm{i}\omega'' - \mathrm{i}\Omega + \varepsilon''' - \varepsilon')} (n(\varepsilon') - n(\varepsilon''' - \underbrace{\mathrm{i}(\Omega - \omega'')}_{\text{donne un facteur } e^{2i\pi(n-n'')}=1}))$$

$$= \frac{1}{\varepsilon'' - \mathrm{i}\Omega + \varepsilon''' - \varepsilon'} \times \left(\frac{1}{\mathrm{i}\omega'' - \varepsilon''} - \frac{1}{\mathrm{i}\omega'' - \mathrm{i}\Omega + \varepsilon''' - \varepsilon'} \right) (n(\varepsilon') - n(\varepsilon'''))$$

puis la somme sur K'' , c'est à dire $(T/N) \sum_{K''}$, il vient

$$\frac{1}{\varepsilon'' - \mathrm{i}\Omega + \varepsilon''' - \varepsilon'} (n(\varepsilon'') - n(\varepsilon' - \varepsilon'' + \underbrace{\mathrm{i}\Omega}_{\text{donne un facteur } e^{i\pi(n+2m)}=-1})) (n(\varepsilon') - n(\varepsilon'''))$$

$$= \frac{1}{\varepsilon'' - \mathrm{i}\Omega + \varepsilon''' - \varepsilon'} \times \left(\frac{1}{1 + e^{\beta\varepsilon''}} - \frac{1}{1 - e^{\beta(\varepsilon' - \varepsilon''')}} \right) \left(\frac{1}{1 + e^{\beta\varepsilon'}} - \frac{1}{1 + e^{\beta\varepsilon''}} \right)$$

$$= \frac{1}{2(\varepsilon'' - \mathrm{i}\Omega + \varepsilon''' - \varepsilon')} \left(\operatorname{coth}\left(\frac{\beta(\varepsilon' - \varepsilon''')}{2}\right) - \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon''}{2}\right) \right) \left(\tanh\left(\frac{\beta\varepsilon''}{2}\right) - \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon'}{2}\right) \right)$$

$$= \frac{1}{2(\varepsilon'' - \mathrm{i}\Omega + \varepsilon''' - \varepsilon')} \left(\operatorname{th}\left(\frac{\beta\varepsilon'}{2}\right) \operatorname{th}\left(\frac{\beta\varepsilon''}{2}\right) + \operatorname{th}\left(\frac{\beta\varepsilon'}{2}\right) \operatorname{th}\left(\frac{\beta\varepsilon''}{2}\right) - \operatorname{th}\left(\frac{\beta\varepsilon''}{2}\right) \operatorname{th}\left(\frac{\beta\varepsilon''}{2}\right) - 1 \right).$$

Dans la limite $T \rightarrow 0$, c'est à dire $\beta \rightarrow \infty$, on a $\tanh(\beta\varepsilon) \simeq \operatorname{sign}(\varepsilon)$ et le facteur hyper-trigonométrique dans l'expression précédente devient :

$$\left(-1 - \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon''}{2}\right) \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon'''}{2}\right) \right) \left(1 - \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon'}{2}\right) \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon''}{2}\right) \right) \left(1 - \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon'}{2}\right) \tanh\left(\frac{\beta\varepsilon'''}{2}\right) \right) / 2$$

car la différence entre ce nouveau terme et l'ancien est proportionnelle à

$$\left(1 - \tanh^2\left(\frac{\beta\varepsilon'}{2}\right) \right) \left(1 - \tanh^2\left(\frac{\beta\varepsilon''}{2}\right) \right) \left(1 - \tanh^2\left(\frac{\beta\varepsilon'''}{2}\right) \right)$$

et \tanh se comprend comme la fonction sign . L'intégration du propagateur donne lieu à une pléiade de cas, que l'on doit intégrer séparément en distinguant v_{f0} et $v_{f\pi}$. On substitue (22) dans $v_{f\pi} - v_{f0}$ en ne gardant ce terme qu'au premier ordre.

γ Équations de renormalisation

En négligeant les moments des pattes extérieures, on trouve des expressions qui dépendent du schéma de renormalisation :

$$\delta(\Delta k_f) \Big|_{\substack{2\text{-boucles} \\ \text{sans } \mathcal{G}_4}} = \mp \frac{4Z\delta\Lambda}{\pi^2 v_f^3} \left(\frac{v_f k - \Lambda}{|v_f k - \Lambda|} + \frac{v_f k + \Lambda}{|v_f k + \Lambda|} + 2 \log\left(\frac{-2\Lambda_0 - v_f k}{-\Lambda - |\Lambda - v_f k|}\right) \right. \\ \left. + 2 \log\left(\frac{2\Lambda_0 - v_f k}{\Lambda + |\Lambda + v_f k|}\right) \right) \times ((\mathcal{G}_1)^2 + (\mathcal{G}_2)^2 - \mathcal{G}_1 \mathcal{G}_2)$$

où $\pm = +$ pour les couplages g_0 , g_{f0} et g_{t0} , tandis que $\pm = -$ pour les g_π , $g_{f\pi}$ et $g_{t\pi}$. On retrouve les résultats de [37] pour le schéma à une particule irréductible et celui de [38] pour celui de l'ordre de Wick. Attention, les couplages g_{b0} et $g_{b\pi}$ sont modifiés par rapport à ces références, le second facteur dans l'expression précédente devient

$$\frac{v_f(k \pm 2\Delta k_f) - \Lambda}{|v_f(k \pm 2\Delta k_f) - \Lambda|} + \frac{v_f(k \pm 2\Delta k_f) + \Lambda}{|v_f(k \pm 2\Delta k_f) + \Lambda|} + 2 \log \left(\frac{2\Lambda_o + v_f(k \mp 2\Delta k_f)}{\Lambda + |\Lambda - v_f(k \mp 2\Delta k_f)|} \frac{2\Lambda_o - v_f(k \mp 2\Delta k_f)}{\Lambda + |\Lambda + v_f(k \pm 2\Delta k_f)|} \right)$$

où il faut lire $\pm = +$ pour le schéma à une particule irréductible et $\pm = -$ pour celui de l'ordre de Wick. En fin de compte, il s'agit de sommer les contributions de chaque couplage.

b Diagramme de phase

La différence entre les contributions des couplages g_{b0} et $g_{b\pi}$ se reflète dans le diagramme de phase. Pour certaines valeurs des paramètres nus t_\perp et U , la susceptibilité supraconductrice diverge, si on utilise le schéma de l'ordre de Wick, et pas si on utilise celui à une particule irréductible. Plus de détails peuvent être trouvés dans [22]. La structure du diagramme de phase est globalement inchangée mais diffère, pour les gammes des paramètres nus qui nous intéressent, de façon quantitativement grande, comme on le constate sur le diagramme de phase comparatif suivant :

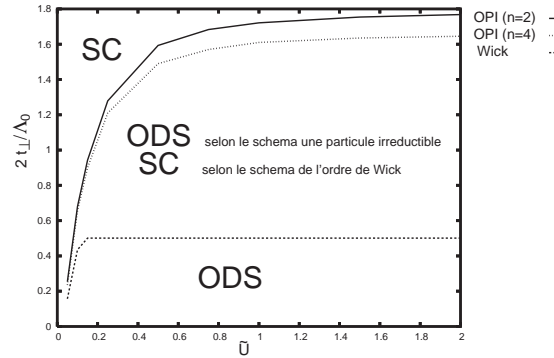


FIGURE 30 – Diagrammes de phase comparés en fonction de $Ua/(\pi v_f) = 1$ et t_\perp . Ils diffèrent sur toute la zone centrale, comme indiqué.

Ceci prouve la validité de la conjecture émise par Schulz, sur l'influence du schéma de renormalisation. La vraie conclusion est que les résultats sont d'une interprétation difficile. C. Nickel donne (page 73 de sa thèse [40]) des arguments en faveur du schéma à une particule irréductible : pour résumer d'un mot son analyse, qui est beaucoup plus élaborée, il montre qu'en définitive peuvent apparaître, dans les diagrammes calculés par le schéma de l'ordre de Wick, des contributions où les moments sont au delà de la coupure, tandis que le schéma à une particule irréductible reste toujours cohérent et que l'application du processus de renormalisation construit progressivement une action de basse énergie. Cet avis n'est pas encore bien connu ni consensuel et le débat reste ouvert.

C Magnétisme et supraconductivité

De très nombreuses expériences ont été menées sur les sels de Bechgaard sous champ. C'est même un domaine d'investigation actuellement très actif, aucun modèle théorique ne permettant de comprendre l'ensemble des résultats de façon satisfaisante.

J'ai surtout travaillé sur l'hypothèse, d'abord suggérée par Lebed [181–183], puis Sá de Melo [184, 185], cf. également [33, 186], d'une transition de la symétrie du paramètre d'ordre supraconducteur. Elle entre dans le paradigme des transitions de Landau, mais elle se distingue notamment parce que l'état supraconducteur ne disparaît pas à la transition. Nous avons surtout considéré le cas d'une transition singulet/triplet.

Pendant la thèse de N. Belmechri, j'ai étudié le problème sous trois axes : d'une part, j'ai cherché les couplages renormalisés, selon une prescription de Bourbonnais pour contourner la divergence ultra-violette ; ensuite, j'ai résolu les équations de champ moyen en utilisant la méthode de Bogoliubov dans une représentation de Nambu ; enfin, j'ai utilisé les équations de Gor'kov, comme dans la théorie BCS ordinaire.

Plus tard, j'ai repris une question plus particulière : j'ai étudié une phase éventuelle de coexistence avec deux paramètres d'ordre singulet et triplet [187]. Il ne s'agit pas d'une phase où se mélangerait des micro-agrégats de phase singulet et triplet, mais bien d'une phase thermodynamiquement stable. Il faut donc résoudre les équations de Gor'kov avec deux paramètres, et j'ai dû inventer une partie de la théorie thermodynamique, qui n'a jamais été étudiée auparavant, bien que cette phase ait été déjà proposée auparavant [188, 189].

1 Contexte expérimental

Le comportement des sels de Bechgaard dépend fortement de l'orientation du champ magnétique, en particulier selon qu'il est perpendiculaire au plan des chaînes couplées ou pas. Ceci a été vu dès les premières expériences [126] mais plusieurs études [175, 190] ont récemment investi cette question de façon systématique et très approfondie.

Les expériences réalisées notamment par Brown [191–194] ont montré que, lorsque le champ magnétique est perpendiculaire au plan des chaînes ($H \parallel c$) ou perpendiculaire aux chaînes mais dans leur plan ($H \parallel b^*$), la supraconductivité peut résister jusqu'à des valeurs extrêmement élevées du champ, comme on le constate sur la figure suivante :

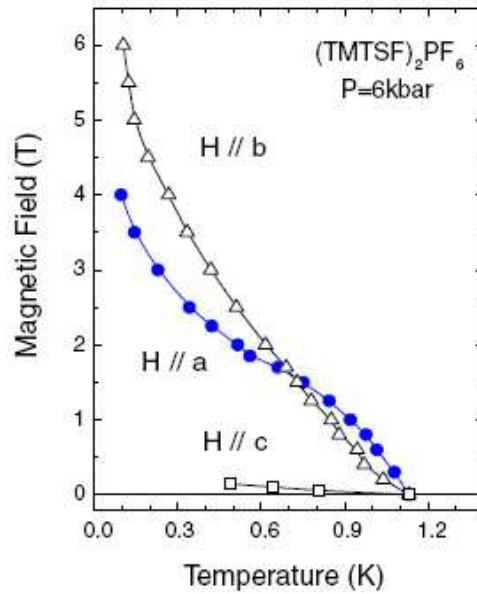


FIGURE 1 – Champ magnétique critique en fonction de la température, pour deux orientations différentes, dans $(TMTSF)_2PF_6$.

Pour des paires de Cooper de symétrie singulet, il existe un champ critique limite, appelé champ de Pauli et noté H_c , au delà duquel la supraconductivité est détruite. La valeur de H_c a été calculée de façon théorique avec une certaine précision, dans le modèle BCS et ne peut expliquer la résistance de la supraconductivité telle qu'elle a été observée. Cependant, l'hypothèse d'une transition vers une autre phase singulet, dite FFLO, permet de définir un nouveau champ critique $H_{c2} > H_c$, qui est plus compatible avec les résultats expérimentaux. Encore une fois, l'orientation du champ magnétique est essentielle : quand le champ est perpendiculaire au plan des chaînes, on ne peut pas supprimer la supraconductivité, alors que, pour d'autres directions, on obtient des valeurs compatibles avec un état FFLO.

Le fait qu'il puisse exister, dans certaines conditions, des paires supraconductrices à très fort champ ne peut, à mon avis, s'expliquer que par une symétrie triplet. Pourtant, partant de ce que la symétrie FFLO est sensible à l'orientation du champ, les auteurs, et plus particulièrement Lebed¹ en ont, à l'inverse, conclu que les états respectaient cette symétrie. Pourtant, l'argument n'est pas entièrement fondé, puisqu'on ignore de quel symétrie triplet il pourrait s'agir.

a État fondamental à champ nul

La possibilité que l'état supraconducteur dans les sels de Bechgaard puisse être de symétrie triplet a été suggéré très tôt [197, 198], on peut lire notamment [109]. Presque tous les spécialistes² considèrent aujourd'hui que l'état supraconducteur des sels de Bechgaard à champ nul est de symétrie singulet. L'argument le plus

1. Lebed, qui était plutôt partisan d'une transition singulet/triplet, ménage la chèvre et le chou dans [195, 196] en assurant que $(TMTSF)_2PF_6$ possède une symétrie triplet tandis que $(TMTSF)_2ClO_4$ possède une symétrie FFLO.

2. Citons comme contre-exemple [199].

fort est que la position du pic, dit du Knight shift, mesuré par RMN (Résistance Magnéto-Nucléaire) ne bouge pas quand on varie la température, comme on le constate sur la figure expérimentale suivante :

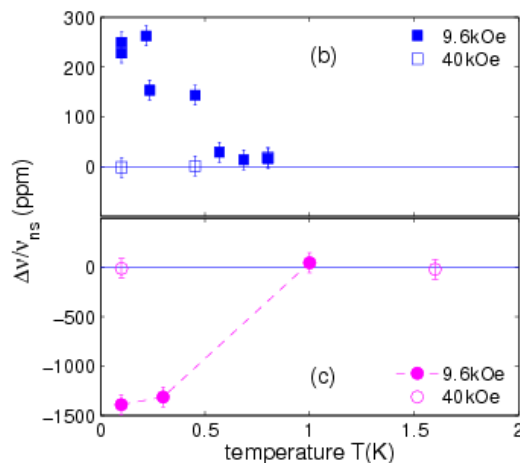


FIGURE 2 – Mesure du pic de Knight shift en fonction de la température pour deux valeurs du champ magnétique [194]. À bas champ, la position du pic est constante, à plus fort champ, elle varie avec la température.

Sur cette figure 2, on constate, à l’inverse, que le pic de Knight shift bouge quand le champ atteint une valeur H plus grande que les valeurs typiques de champ critique H_c . Cette figure a souvent été fournie comme argument en faveur d’une transition singulet/triplet. Depuis que la discussion en faveur d’une phase FFLO a pris de l’ampleur, cet argument a été discrètement enseveli. Il est paradoxal qu’on l’utilise encore en faveur de la phase singulet à champ nul.

Une des questions qui a le plus passionnée la communauté est la présence de nœuds à la surface de Fermi, c’est à dire de points de cette surface où la densité s’annule. Elle a été définitivement confirmée par le travail de thèse de Joo [200]. Si on croise cette information avec le fait que les états sont singulet, cela démontre que la symétrie est de type d , ce qui est un résultat en soi remarquable.

b Existence d’une phase Onde de densité de spin

On peut observer, dans certaines phases, une coexistence entre des paires supraconductrices et des Ondes de Densité de Spin. Ce résultat est très étonnant, car les Ondes de Densité de Spin sont des modes précurseurs d’une phase antiferromagnétique. Pour s’en convaincre, on peut considérer qu’une phase antiferromagnétique est une Onde de Densité de Spin géante et gelée, autrement dit accrochée au réseau.

Cet antagonisme entre phases antiferromagnétique et supraconductrice est effectivement mis en cause dans de tels systèmes, on observe au contraire qu’elles sont très souvent voisines dans de nombreux matériaux quasi-unidimensionnels, comme les composés à base de BEDT, dont voici un diagramme de phase typique :

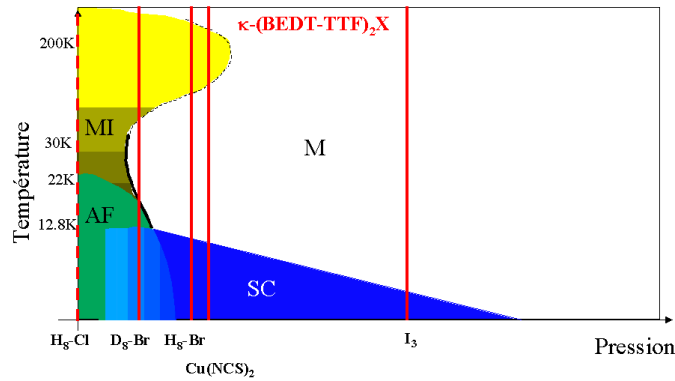


FIGURE 3 – Diagramme de phase générique des composés de la famille $\kappa-(BEDT-TTF)_2X$. Image empruntée au groupe “Conducteurs Moléculaires et Hautes Pressions” du Laboratoire de Physique des Solides d’Orsay. Les phases sont notées : AF=Antiferromagnétisme, MI=Isolant de Mott, SC=Supraconductivité.

Dans les sels de Bechgaard, la proximité de ces phases est très éclairante :

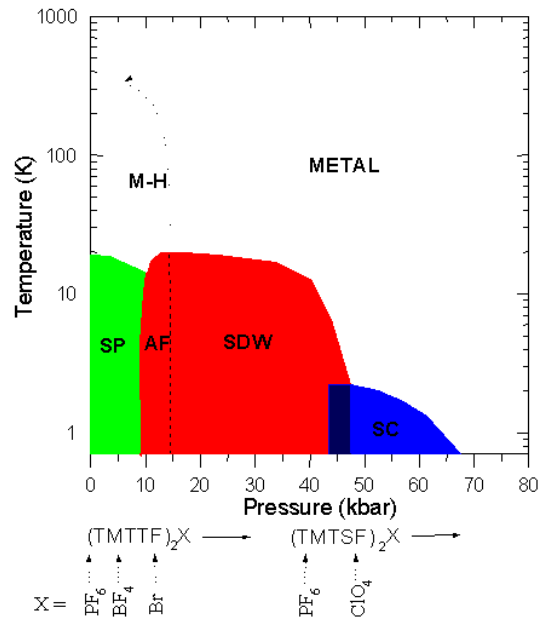


FIGURE 4 – Diagramme de phase générique des composés TM_2X . Image empruntée au groupe “Conducteurs Moléculaires et Hautes Pressions” du Laboratoire de Physique des Solides d’Orsay. Les phases sont notées : SP=Spin-Peierls, AF=Antiferromagnétisme, SDW=Onde de Densité de Spin, SC=Supraconductivité, M-H=Isolant de Mott-Hubbard. Les flèches indiquent la position des différents composés à pression ambiante.

Cette coexistence a été étudiée relativement tôt, par exemple par Machida [201]. On la trouve bien dans les calculs par le groupe de renormalisation, comme on vient de l’étudier. Je n’ai pas pu le faire, par contre, avec l’approche BCS, parce qu’il aurait fallu, soit introduire trois paramètres d’ordre indépendants, ce qui est

techniquement trop difficile, soit renoncer à étudier la transition singulet/triplet, qui nous intéressait davantage.

2 Méthode de Bogoliubov

J'ai utilisé la méthode décrite dans [202] et [203], en suivant plus particulièrement cette dernière et très complète référence. Par la suite, avec P. Kalugin, nous avons étudié de façon très approfondie les fondements de la représentation de Nambu [204], notamment son lien avec la représentation dans l'espace de Fock, mais ce sujet m'entraînerait très loin du thème que j'ai choisi pour cette thèse et je ne l'exposerai pas ici.

a Représentation dans l'espace de Nambu

α Effet orbital implicite

L'une manifestation importante bien que paradoxale de l'effet orbital est la trajectoire des électrons sous champ magnétique. En effet, comme discuté au **A 2 c**, la trajectoire des électrons est hélicoïdale et quasi-unidimensionnelle. On prend en compte cet effet avec la courbe de dispersion à deux bandes, qui possède quatre points de Fermi, contrairement au modèle unidimensionnel simple, qui en possède deux.

La séparation en deux bandes provient de la dépendance de l'énergie ε en fonction de k_{\perp} , qui provient du recouvrement entre orbitales inter-chaînes et est fonction du couplage orbital (ou plutôt, c'est la valeur du couplage renormalisé qui serait fonction du champ magnétique, si on était capable de le calculer).

Dans les travaux que j'ai effectués, c'est la seule prise en compte de l'effet orbital. Il est notable qu'elle suffit à produire des résultats différents des travaux de renormalisation exacte sur des systèmes à une dimension [205], bien qu'il serait préférable d'avoir une dépendance directe en fonction du champ magnétique. Bien que je les ai inclus dans le corps de cette partie, les sections suivantes concernant l'introduction d'un tel terme dans le hamiltonien relèvent de la prospective ultérieure à ces travaux. En particulier, il faut être conscient qu'il faudrait probablement plusieurs années de travail pour tester ces nouveaux termes, et savoir s'ils peuvent influencer sur les résultats et notamment permettent l'observation d'une phase de coexistence stable.

β Terme de couplage orbital avec le champ magnétique

Il existe plusieurs termes faisant intervenir le champ magnétique dans le hamiltonien. On pourrait suivre la modulation des constantes de diffusion arrière \mathcal{G}_1 , comme suggéré par Bourbonnais. C'est une renormalisation du terme d'interaction quadratique. Je préférerais introduire un terme linéaire. On peut, soit inclure un terme de spin-orbite $-2\sigma\mu_B H$, soit essayer de décrire le moment orbital. Il semble que la supraconductivité soit plus robuste quand le champ est orthogonal aux chaînes, donc quand le moment orbital est important. Notamment, de nombreux auteurs attribuent le phénomène de réentrance [206] de la supraconductivité sous champ comme une manifestation de l'effet du moment orbital.

Si on prend le hamiltonien donné à la formule (1) de [207], il apparaît un terme linéaire $\hat{z}ecvH$. Si on fait une transformation de Fourier discrète, on obtient

$$\mathcal{H}_{\text{magn}} = \mu_{\text{orb}}H \cos \theta$$

avec $\mu_{\text{orb}} = 2ecv$ (il vient un terme constant supplémentaire ainsi qu'un facteur de phase, qui ne jouent aucuns rôles et que j'ai supprimés). Je noterai par la suite $h = \mu_{\text{orb}}H$.

γ Quadri-spineur dans l'espace de Nambu

Les états physiques sont décrit par le vecteur

$$\begin{pmatrix} u_{\uparrow 0}(k) \\ u_{\downarrow 0}(k) \\ u_{\uparrow \pi}(k) \\ u_{\downarrow \pi}(k) \\ u_{\uparrow 0}^\dagger(-k) \\ u_{\downarrow 0}^\dagger(-k) \\ u_{\uparrow \pi}^\dagger(-k) \\ u_{\downarrow \pi}^\dagger(-k) \end{pmatrix}$$

où les u sont les fonctions d'onde associées à une particule de spin $s = 1/2$ et possèdent également un indice de bande. J'appelle base de Nambu celle formée par ces vecteurs.

δ Hamiltonien dans la base de Nambu

Le hamiltonien avec un terme de couplage spin-orbite s'écrit, dans cette base,

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon(k) - h & 0 & 0 & 0 & \Delta_{00}^{\uparrow\uparrow} & \Delta_{0\pi}^{\uparrow\uparrow} & \Delta_{00}^{\uparrow\downarrow} & \Delta_{0\pi}^{+\uparrow\downarrow} \\ 0 & \varepsilon(k) - h & 0 & 0 & \Delta_{0\pi}^{\uparrow\uparrow} & \Delta_{\pi\pi}^{\uparrow\uparrow} & \Delta_{0\pi}^{-\uparrow\downarrow} & \Delta_{\pi\pi}^{\uparrow\downarrow} \\ 0 & 0 & \varepsilon(k) + h & 0 & \Delta_{00}^{\downarrow\uparrow} & \Delta_{0\pi}^{-\downarrow\uparrow} & \Delta_{00}^{\downarrow\downarrow} & \Delta_{0\pi}^{\downarrow\downarrow} \\ 0 & 0 & 0 & \varepsilon(k) + h & \Delta_{0\pi}^{+\downarrow\uparrow} & \Delta_{\pi\pi}^{\downarrow\uparrow} & \Delta_{0\pi}^{\downarrow\downarrow} & \Delta_{\pi\pi}^{\downarrow\downarrow} \\ \Delta_{00}^{\uparrow\uparrow} & \Delta_{0\pi}^{\uparrow\uparrow} & \Delta_{00}^{\downarrow\uparrow} & \Delta_{0\pi}^{+\downarrow\uparrow} & -\varepsilon(k) + h & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_{0\pi}^{\uparrow\uparrow} & \Delta_{\pi\pi}^{\uparrow\uparrow} & \Delta_{0\pi}^{-\downarrow\uparrow} & \Delta_{\pi\pi}^{\downarrow\uparrow} & 0 & -\varepsilon(k) + h & 0 & 0 \\ \Delta_{00}^{\uparrow\downarrow} & \Delta_{0\pi}^{-\uparrow\downarrow} & \Delta_{00}^{\downarrow\downarrow} & \Delta_{0\pi}^{\downarrow\downarrow} & 0 & 0 & -\varepsilon(k) - h & 0 \\ \Delta_{0\pi}^{+\uparrow\downarrow} & \Delta_{\pi\pi}^{\uparrow\downarrow} & \Delta_{0\pi}^{\downarrow\downarrow} & \Delta_{\pi\pi}^{\downarrow\downarrow} & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon(k) - h \end{pmatrix}$$

avec les paramètres d'ordre

$$\begin{aligned}
 \Delta_{00}^{\sigma\sigma} &= (g_{01} - g_{02})\langle u_{0\sigma}(-k)u_{0\sigma}(k) \rangle + (g_{t1} - g_{t2})\langle u_{\pi\sigma}(-k)u_{\pi\sigma}(k) \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} \text{ symétrie triplet ;} \\
 \Delta_{00}^{\sigma,-\sigma} &= g_{01}\langle u_{0\sigma}(-k)u_{0,-\sigma}(k) \rangle - g_{02}\langle u_{0,-\sigma}(-k)u_{0\sigma}(k) \rangle \\
 &\quad + g_{t1}\langle u_{\pi\sigma}(-k)u_{\pi,-\sigma}(k) \rangle - g_{t2}\langle u_{\pi,-\sigma}(-k)u_{\pi\sigma}(k) \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} \text{ symétrie singulet ;} \\
 \Delta_{\pi\pi}^{\sigma\sigma} &= (g_{01} - g_{02})\langle u_{0\sigma}(-k)u_{0\sigma}(k) \rangle + (g_{t1} - g_{t2})\langle u_{\pi\sigma}(-k)u_{\pi\sigma}(k) \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} \text{ symétrie triplet ;} \\
 \Delta_{\pi\pi}^{\sigma,-\sigma} &= g_{01}\langle u_{\pi\sigma}(-k)u_{\pi,-\sigma}(k) \rangle - g_{02}\langle u_{\pi,-\sigma}(-k)u_{\pi\sigma}(k) \rangle \\
 &\quad + g_{t1}\langle u_{0\sigma}(-k)u_{0,-\sigma}(k) \rangle - g_{t2}\langle u_{0,-\sigma}(-k)u_{0\sigma}(k) \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} \text{ symétrie singulet ;} \\
 \Delta_{0\pi}^{\sigma\sigma} &= (g_{f1} - g_{f2})\langle u_{\pi\sigma}(-k)u_{0\sigma}(k) \rangle + (g_{b1} - g_{b2})\langle u_{0\sigma}(-k)u_{\pi\sigma}(k) \rangle \\
 &= (g_{f1} - g_{f2})\langle u_{0\sigma}(-k)u_{\pi\sigma}(k) \rangle + (g_{b1} - g_{b2})\langle u_{\pi\sigma}(-k)u_{0\sigma}(k) \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} \text{ symétrie triplet ;} \\
 \Delta_{0\pi}^{+,\sigma,-\sigma} &= g_{f1}\langle u_{\pi\sigma}(-k)u_{0,-\sigma}(k) \rangle - g_{f2}\langle u_{\pi,-\sigma}(-k)u_{0\sigma}(k) \rangle \\
 &\quad + g_{b1}\langle u_{0\sigma}(-k)u_{\pi,-\sigma}(k) \rangle - g_{b2}\langle u_{0,-\sigma}(-k)u_{\pi\sigma}(k) \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} \text{ symétrie singulet ;} \\
 \Delta_{0\pi}^{-,\sigma,-\sigma} &= g_{f1}\langle u_{0\sigma}(-k)u_{\pi,-\sigma}(k) \rangle - g_{f2}\langle u_{0,-\sigma}(-k)u_{\pi\sigma}(k) \rangle \\
 &\quad + g_{b1}\langle u_{\pi\sigma}(-k)u_{0,-\sigma}(k) \rangle - g_{b2}\langle u_{\pi,-\sigma}(-k)u_{0\sigma}(k) \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} \text{ symétrie singulet.}
 \end{aligned}$$

ϵ Recouvrement des symétries

Choisissons $k > 0$, on peut écrire R ou L au lieu de u . On trouve alors

$$\begin{aligned}
 \Delta_{00}^{\sigma\sigma} &= (g_{01} - g_{02})\langle L_{0\sigma}R_{0\sigma} \rangle + (g_{t1} - g_{t2})\langle L_{\pi\sigma}R_{\pi\sigma} \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} ; \\
 \Delta_{00}^{\sigma,-\sigma} &= g_{01}\langle L_{0\sigma}R_{0,-\sigma} \rangle - g_{02}\langle L_{0,-\sigma}R_{0\sigma} \rangle + g_{t1}\langle L_{\pi\sigma}R_{\pi,-\sigma} \rangle - g_{t2}\langle L_{\pi,-\sigma}R_{\pi\sigma} \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} ; \\
 \Delta_{\pi\pi}^{\sigma\sigma} &= (g_{01} - g_{02})\langle L_{\pi\sigma}R_{\pi\sigma} \rangle + (g_{t1} - g_{t2})\langle L_{0\sigma}R_{0\sigma} \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} ; \\
 \Delta_{\pi\pi}^{\sigma,-\sigma} &= g_{01}\langle L_{\pi\sigma}R_{\pi,-\sigma} \rangle - g_{02}\langle L_{\pi,-\sigma}R_{\pi\sigma} \rangle + g_{t1}\langle L_{0\sigma}R_{0,-\sigma} \rangle - g_{t2}\langle L_{0,-\sigma}R_{0\sigma} \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} ; \\
 \Delta_{0\pi}^{\sigma\sigma} &= (g_{f1} - g_{f2})\langle L_{\pi\sigma}R_{0\sigma} \rangle + (g_{b1} - g_{b2})\langle L_{0\sigma}R_{\pi\sigma} \rangle & \sigma = \pm\frac{1}{2} ; \\
 \Delta_{0\pi}^{+,\sigma,-\sigma} &= g_{f1}\langle L_{\pi\sigma}R_{0,-\sigma} \rangle - g_{f2}\langle L_{\pi,-\sigma}R_{0\sigma} \rangle + g_{b1}\langle L_{0\sigma}R_{\pi,-\sigma} \rangle - g_{b2}\langle L_{0,-\sigma}R_{\pi\sigma} \rangle \\
 &= -\Delta_{0\pi}^{-,\sigma,-\sigma} & \sigma = \pm\frac{1}{2} ;
 \end{aligned}$$

où on a omis la dépendance en k . Ces paramètres d'ordre sont des combinaisons linéaires de ceux qu'on a définis à la section **B1d**, avec des facteurs plus généraux. On peut leur attribuer leur symétrie respective en suivant cette classification.

b Résolution à champ nul

On suppose ici $H = 0$. Il y a beaucoup trop de paramètres d'ordre tels que je les ai écrits. Pour simplifier la résolution des vecteurs propres et valeurs propres de la matrice hamiltonienne précédente, j'ai étudié quelques cas particulier, en suivant les symétries du problème.

J'en présente ici un, qui donne des résultats intéressants, parce que le spectre n'est pas dégénéré. On pose $\Delta_{0\pi}^{\uparrow\uparrow} = \Delta_{0\pi}^{\downarrow\downarrow} = 0$, $\Delta_s = \Delta_{00}^{\uparrow\downarrow} = -\Delta_{\pi\pi}^{\downarrow\uparrow} = -\Delta_{00}^{\downarrow\uparrow} = \Delta_{\pi\pi}^{\uparrow\downarrow}$, $\Delta_{s\pi} = \Delta_{0\pi}^{+\uparrow\downarrow} = -\Delta_{0\pi}^{-\uparrow\downarrow} = -\Delta_{0\pi}^{+\downarrow\uparrow} = \Delta_{0\pi}^{-\downarrow\uparrow}$ et $\Delta_t = \Delta_{00}^{\sigma\sigma} = \Delta_{\pi\pi}^{\sigma\sigma} = \Delta_{00}^{-\sigma,-\sigma} = \Delta_{\pi\pi}^{-\sigma,-\sigma}$.

L'ensemble des vecteurs propres écrits en colonne forme la matrice P suivante

$$\left(\begin{array}{cccccccc} -\sqrt{\frac{\varepsilon+e_+}{e_+}} & 0 & \sqrt{\frac{\varepsilon+e_-}{e_-}} & 0 & \frac{\Delta_t}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & -\frac{\Delta_s+\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & -\frac{\Delta_t}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & \frac{\Delta_s-\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} \\ \sqrt{\frac{\varepsilon+e_+}{e_+}} & 0 & \sqrt{\frac{\varepsilon+e_-}{e_-}} & 0 & -\frac{\Delta_t}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & \frac{\Delta_s+\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & -\frac{\Delta_t}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & \frac{\Delta_s-\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} \\ 0 & \sqrt{\frac{\varepsilon+e_+}{e_+}} & 0 & -\sqrt{\frac{\varepsilon+e_-}{e_-}} & -\frac{\Delta_s+\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & \frac{\Delta_t}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & \frac{\Delta_s-\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & \frac{\Delta_t}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} \\ 0 & \sqrt{\frac{\varepsilon+e_+}{e_+}} & 0 & \sqrt{\frac{\varepsilon+e_-}{e_-}} & -\frac{\Delta_s+\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & -\frac{\Delta_t}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & -\frac{\Delta_s-\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & -\frac{\Delta_t}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} \\ -\frac{\Delta_t}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & -\frac{\Delta_s+\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & \frac{\Delta_t}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & \frac{\Delta_s-\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & -\sqrt{\frac{\varepsilon+e_+}{e_+}} & 0 & \sqrt{\frac{\varepsilon+e_-}{e_-}} & 0 \\ \frac{\Delta_t}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & \frac{\Delta_s+\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & \frac{\Delta_t}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & \frac{\Delta_s-\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & -\sqrt{\frac{\varepsilon+e_+}{e_+}} & 0 & \sqrt{\frac{\varepsilon+e_-}{e_-}} & 0 \\ \frac{\Delta_s+\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & \frac{\Delta_t}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & \frac{\Delta_s-\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & -\frac{\Delta_t}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & 0 & \sqrt{\frac{\varepsilon+e_+}{e_+}} & 0 & -\sqrt{\frac{\varepsilon+e_-}{e_-}} \\ \frac{\Delta_s+\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & \frac{\Delta_t}{\sqrt{e_+(\varepsilon+e_+)}} & -\frac{\Delta_s-\Delta_{s\pi}}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & \frac{\Delta_t}{\sqrt{e_-(\varepsilon+e_-)}} & 0 & \sqrt{\frac{\varepsilon+e_+}{e_+}} & 0 & \sqrt{\frac{\varepsilon+e_-}{e_-}} \end{array} \right)$$

où $\varepsilon \equiv \varepsilon(k)$ et $e_{\pm} = \sqrt{(\Delta_s \pm \Delta_{s\pi})^2 + \Delta_t^2 + \varepsilon^2}$. J'ai choisi P unitaire, du type $\begin{pmatrix} U(k) & V(k) \\ \bar{V}(-k) & \bar{U}(-k) \end{pmatrix}$ où \bar{z} est le conjugué de $z \in \mathbb{C}$, conformément à la méthode de Bogoliubov.

c Équations du gap

Les valeurs moyennes $\langle a_k^\dagger a_k \rangle = \frac{1}{1+e^{\beta\varepsilon(k)}} = \frac{1}{2}(1 - \tanh(\beta\varepsilon(k)/2))$ et $\langle a_k a_k^\dagger \rangle = \frac{1}{1+e^{-\beta\varepsilon(k)}} = \frac{1}{2}(1 + \tanh(\beta\varepsilon(k)/2))$ s'appliquent aux fonctions a et a^\dagger , qui sont les vecteurs propres du hamiltonien. Il suffit donc d'exprimer les u et les u^\dagger en fonction des a et de a^\dagger (en utilisant P) dans les expressions des paramètres d'ordre, pour en déduire des équations auto-cohérentes des paramètres d'ordre. Ce sont les équations du gap. Pour le cas du champ nul, on trouve, après simplification

$$\begin{aligned} \Delta_{00}^{\uparrow\uparrow} &= (g_{02} - g_{01} + g_{t2} - g_{t1}) \left(\frac{\tanh(e_+/2)}{e_+} + \frac{\tanh(e_-/2)}{e_-} \right) \frac{\Delta_t}{4} \\ \Delta_{0\pi}^{\uparrow\uparrow} &= (g_{f2} - g_{f1} + g_{b2} - g_{b1}) \left(\frac{\tanh(e_+/2)}{e_+} - \frac{\tanh(e_-/2)}{e_-} \right) \Delta_t \\ \Delta_{00}^{\uparrow\downarrow} &= (g_{01} + g_{02} + g_{t1} + g_{t2}) \left(\frac{\tanh(e_+/2)}{e_+} \frac{\Delta_s + \Delta_{s\pi}}{4} + \frac{\tanh(e_-/2)}{e_-} \frac{\Delta_s - \Delta_{s\pi}}{4} \right) \\ \Delta_{0\pi}^{\uparrow\downarrow} &= (g_{f1} + g_{f2} + g_{b1} + g_{b2}) \left(\frac{\tanh(e_+/2)}{e_+} \frac{\Delta_s + \Delta_{s\pi}}{4} - \frac{\tanh(e_-/2)}{e_-} \frac{\Delta_s - \Delta_{s\pi}}{4} \right). \end{aligned}$$

Les calculs des autres termes sont cohérents avec les hypothèses $\Delta_{00}^{\uparrow\uparrow} = \Delta_{00}^{\downarrow\downarrow} = \Delta_{\pi\pi}^{\uparrow\uparrow} = \Delta_{\pi\pi}^{\downarrow\downarrow}$, $\Delta_{00}^{\uparrow\downarrow} = -\Delta_{00}^{\downarrow\uparrow} = \Delta_{\pi\pi}^{\uparrow\downarrow} = -\Delta_{\pi\pi}^{\downarrow\uparrow}$ et $\Delta_{0\pi}^{+, \uparrow\downarrow} = \Delta_{0\pi}^{-, \uparrow\downarrow} = \Delta_{0\pi}^{\downarrow\uparrow} = \Delta_{0\pi}^{\uparrow\downarrow}$. On pourrait choisir d'autres hypothèses, mais on constate que, de toutes façons, pour avoir une cohérence globale, il faut imposer $\Delta_s = 0$ ou $\Delta_{s\pi} = 0$. Dans ce cas, le problème est résolu.

d Résolution sous champ

Les choses se compliquent infiniment sous champ, car il n'est plus possible de choisir $\Delta_{00}^{\uparrow\uparrow} = \Delta_{00}^{\downarrow\downarrow}$ par exemple, à cause du champ H . J'ai abordé le problème en perturbation. J'ai démontré une relation (avec un moment μ générique)

$$(\varepsilon(k) + \mu H)\Delta_{00}^{\uparrow\uparrow} = (\varepsilon(k) - \mu H)\Delta_{00}^{\downarrow\downarrow}.$$

Les calculs en perturbation sont abordables, mais je suis tombé sur un problème, qui m'a justement motivé à rédiger ces notes : sous de très nombreuses hypothèses, des valeurs propres du hamiltonien sous champ sont entièrement différentes de la résolution à champ nul. Il y a donc une discontinuité, qui est contradictoire avec l'approche perturbative. On peut espérer que les quantités finales soient finalement bien continues avec le champ magnétique, mais, à l'époque où j'ai fait ces calculs, Noomen Belmechri avait déjà commencé les siens selon la méthode de Gor'kov. Or, comme il m'a expliqué et j'ai pu le constater très rapidement, aucune difficulté de cet ordre ne surgit par cette seconde méthode.

Ces deux approches devraient être équivalentes. Plus précisément, l'une s'obtient comme une transformation de Fourier $\omega \rightarrow t$ de l'autre. Il n'est donc jamais exclu qu'une pathologie se révèle par une approche et pas par l'autre, bien que les ouvrages de référence ignorent généralement ce problème [208].

3 Méthode de Gor'kov à deux paramètres d'ordre

a Opérateurs

α Approximation quadratique

Le hamiltonien $\mathcal{H}_{\text{cin}} + \mathcal{H}_{\text{int}}$ donné par les équations (2) et (3) est développé en puissances des fonctions de création ou d'annihilation. On ne garde que des termes quadratiques, bien que \mathcal{H}_{int} soit quartique. Le choix des termes quadratiques que l'on retient sélectionne certains mécanismes plutôt que d'autres, et nous avons gardé les termes d'appariement supraconducteur de symétrie d et f_x , en cherchant plus spécifiquement les solutions couplées avec deux paramètres simultanément non nuls :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{supr}} = & \sum_{\substack{k \\ \theta=0, \pi \\ \sigma=\pm 1/2}} \left(\varepsilon(k)(R_{k\theta\sigma}R_{k\theta\sigma}^\dagger + L_{k\theta\sigma}L_{k\theta\sigma}^\dagger) \right. \\ & + \Delta_s \cos(\theta)2\sigma(R_{k\theta\sigma}L_{-k, \theta, -\sigma} + R_{-k, \theta, -\sigma}^\dagger L_{k\theta\sigma}^\dagger) + \Delta_{s\pi} \cos(\theta)2\sigma(R_{k\theta\sigma}L_{-k, \pi-\theta, -\sigma} + R_{-k, \pi-\theta, -\sigma}^\dagger L_{k\theta\sigma}^\dagger) \\ & \left. + \Delta_t \cos(\theta)2\sigma(R_{k\theta\sigma}L_{-k, \theta, \sigma} + R_{-k, \theta, \sigma}^\dagger L_{k\theta\sigma}^\dagger) + \Delta_{t\pi} \cos(\theta)2\sigma(R_{k\theta\sigma}L_{-k, \pi-\theta, \sigma} + R_{-k, \pi-\theta, \sigma}^\dagger L_{k\theta\sigma}^\dagger) \right). \end{aligned}$$

Attention, la dépendance en k n'est pas fidèle, il faudrait séparer les termes $\theta = 0$ et $\theta = \pi$ et inclure les expressions analogues aux paramètres d'ordre donnés en **B1d**. Cependant, on va négliger par la suite la dépendance en k_{\parallel} , et cette écriture est déjà trop détaillée.

β Opérateurs de création et d'annihilation dépendant du temps

On introduit des opérateurs de création ou d'annihilation dépendant du temps. Soient a et a^\dagger les opérateurs (constants) d'annihilation ou de création d'une particule, on pose

$$a(t) = e^{i\mathcal{H}t} a e^{-i\mathcal{H}t} \quad \text{et} \quad a^\dagger(t) = e^{i\mathcal{H}t} a^\dagger e^{-i\mathcal{H}t}; \quad (1)$$

il vient

$$i \frac{\partial}{\partial t} a(t) = [\mathcal{H}, a(t)] \quad \text{et} \quad i \frac{\partial}{\partial t} a^\dagger(t) = [\mathcal{H}, a^\dagger(t)] \quad . \quad (2)$$

On est revenu à une approche façon Schrödinger, définie dans le formalisme de Heisenberg où ce sont les opérateurs qui dépendent du temps et pas les états. C'est ce qu'on appelle couramment la seconde quantification. Il n'y a pas de contradiction avec le schéma de Heisenberg, puisqu'il s'agit bien d'opérateurs, et l'équation d'évolution dans le temps, équivalente à l'équation de Schrödinger, est très différente.

b Équation de Gor'kov

α Fonctions de Green singulet d et triplet f_x

On introduit des fonctions de Green, qui sont liées aux paramètres d'ordre introduit à la section **B1d**. On rappelle qu'on n'a gardé que les paramètres singulet d (qui correspondent aux fonctions \mathcal{F}_s) et triplet f_x (qui correspondent aux fonctions \mathcal{F}_t). Ce choix répond à une double contrainte; d'une part, ce sont les paramètres d'ordre dont les susceptibilités calculées par le groupe de renormalisation divergent le plus; d'autre part, ce sont les plus simples. On pose :

$$\begin{aligned} G(p, \sigma, t, t') &= -i \sum_{\theta=0, \pi} \int dq \begin{cases} \langle R_{k, \theta \sigma}(t) R_{k', \theta \sigma}^\dagger(t') \rangle_T & \text{si } p > 0 \\ \langle L_{k, \theta \sigma}(t) L_{k', \theta \sigma}^\dagger(t') \rangle_T & \text{si } p < 0 \end{cases} \\ \mathcal{F}_s(p, \sigma, t, t') &= -2i \sigma \sum_{\theta=0, \pi} \cos \theta \int dq \begin{cases} \langle L_{k \theta \sigma}(t) R_{-k', \theta, -\sigma}(t') \rangle_T & \text{si } p > 0 \\ \langle L_{k \theta \sigma}(t') R_{-k', \theta, -\sigma}(t) \rangle_T & \text{si } p < 0 \end{cases} \\ \mathcal{F}_{s\pi\pm}(p, \sigma, t, t') &= -2i \sigma \sum_{\theta=0, \pi} \cos \theta \int dq \begin{cases} \langle L_{k \theta \sigma}(t) R_{\Delta k_f(\cos \theta \pm 1) - k', \pi - \theta, -\sigma}(t') \rangle_T & \text{si } p > 0 \\ \langle L_{k \theta \sigma}(t') R_{\Delta k_f(\cos \theta \pm 1) - k', \pi - \theta, -\sigma}(t) \rangle_T & \text{si } p < 0 \end{cases} \\ \mathcal{F}_t(p, \sigma, t, t') &= 2\sigma \sum_{\theta=0, \pi} \cos \theta \int dq \begin{cases} \langle L_{k \theta \sigma}(t) R_{-k', \theta \sigma}(t') \rangle_T & \text{si } p > 0 \\ \langle L_{k \theta \sigma}(t') R_{-k', \theta \sigma}(t) \rangle_T & \text{si } p < 0 \end{cases} \\ \mathcal{F}_{t\pi\pm}(p - p', \sigma, t, t') &= 2\sigma \sum_{\theta=0, \pi} \cos \theta \int dq \begin{cases} \langle L_{k \theta \sigma}(t) R_{\Delta k_f(\cos \theta \pm 1) - k', \pi - \theta, \sigma}(t') \rangle_T & \text{si } p > 0 \\ \langle L_{k \theta \sigma}(t') R_{\Delta k_f(\cos \theta \pm 1) - k', \pi - \theta, \sigma}(t) \rangle_T & \text{si } p < 0 \end{cases} \end{aligned}$$

où ³ $p = \frac{k+k'}{2}$ et $q = k - k'$. $\langle \rangle_T$ signifie qu'on prend l'ordre chronologique, dit normal en temps, $\langle R(t) R^\dagger(t') \rangle_T = \Theta(t - t') R^\dagger(t') R(t) + \Theta(t' - t) R(t) R^\dagger(t')$ par exemple (Θ

3. Ce choix respecte la métrique car le jacobien $\begin{pmatrix} \frac{\partial p}{\partial k} & \frac{\partial p}{\partial k'} \\ \frac{\partial q}{\partial k} & \frac{\partial q}{\partial k'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = 1$. L'expression des fonctions de Green n'est pas complète car je n'y ai pas inclus les cas $|q| > 2p$ ($\iff kk' < 0$),

est la fonction Heaviside). Pour réduire le nombre de couplages, on posera, par symétrie, $\mathcal{F}_{s\pi} = \mathcal{F}_{s\pi+} = \pm\mathcal{F}_{s\pi-}$ et $\mathcal{F}_{t\pi} = \mathcal{F}_{t\pi+} = \pm\mathcal{F}_{t\pi-}$. Le choix des deux signes \pm est indépendant et libre.

β Fonctions de Green supplémentaires

Après cette simplification, on aura besoin d'introduire trois autres fonctions de Green spéciales :

$$\begin{aligned} S_0(p, \sigma, t, t') &= \sum_{\theta=0,\pi} \int dq \begin{cases} \langle R_{k,\theta\sigma}(t) R_{k',\theta,-\sigma}^\dagger(t') \rangle_T & \text{si } p > 0 \\ -\langle L_{k,\theta\sigma}(t) L_{k',\theta,-\sigma}^\dagger(t') \rangle_T & \text{si } p < 0 \end{cases} \\ S_\pm(p, \sigma, t, t') &= \sum_{\theta=0,\pi} \int dq \begin{cases} \langle R_{k,\theta\sigma}(t) R_{\Delta k_f(\cos\theta\pm 1)-k',\theta,-\sigma}^\dagger(t') \rangle_T & \text{si } p > 0 \\ \langle L_{k,\theta\sigma}(t) L_{\Delta k_f(\cos\theta\pm 1)-k',\theta,-\sigma}^\dagger(t') \rangle_T & \text{si } p < 0 \end{cases} \\ C_\pm(p, \sigma, t, t') &= -i \sum_{\theta=0,\pi} \int dq \begin{cases} \langle R_{k,\theta\sigma}(t) R_{\Delta k_f(\cos\theta\pm 1)-k',\theta\sigma}^\dagger(t') \rangle_T & \text{si } p > 0 \\ -\langle L_{k,\theta\sigma}(t) L_{\Delta k_f(\cos\theta\pm 1)-k',\theta\sigma}^\dagger(t') \rangle_T & \text{si } p < 0 \end{cases} \end{aligned}$$

avec les mêmes notations. Ce sont cinq paramètres, que l'on réduit à trois de la même façon que précédemment, en posant $S_\pi = S_+ = \pm S_-$ et $C = C_+ = \pm C_-$.

γ Équations d'évolution dans le temps

Les équations d'évolution se calculent en appliquant (2) sur toutes les fonctions de Green et en substituant $t' - t$ par t dans les expressions précédentes ; t est le temps d'existence d'une quasi-particule. L'ordre $t' - t$ est purement conventionnel. On trouve :

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G &= 1 + \varepsilon(p)G + \Delta_s \mathcal{F}_s + \Delta_t \mathcal{F}_t + \Delta_{s\pi} \mathcal{F}_{s\pi} + \Delta_{t\pi} \mathcal{F}_{t\pi} \\ i \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}_s &= -\varepsilon(p)\mathcal{F}_s + \Delta_s G - \Delta_t S_0 - \Delta_{s\pi} C + \Delta_{t\pi} S_\pi \\ i \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}_t &= -\varepsilon(p)\mathcal{F}_t + \Delta_s S_0 + \Delta_t G - \Delta_{s\pi} S_\pi - \Delta_{t\pi} C \\ i \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}_{s\pi} &= -\varepsilon(p)\mathcal{F}_{s\pi} - \Delta_s C + \Delta_t S_\pi + \Delta_{s\pi} G - \Delta_{t\pi} S_0 \\ i \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{F}_{t\pi} &= -\varepsilon(p)\mathcal{F}_{t\pi} - \Delta_s S_\pi + \Delta_t C + \Delta_{s\pi} S_0 + \Delta_{t\pi} G \\ i \frac{\partial}{\partial t} S_0 &= \varepsilon(p)S_0 + \Delta_s \mathcal{F}_t - \Delta_t \mathcal{F}_s + \Delta_{s\pi} \mathcal{F}_{t\pi} - \Delta_{t\pi} \mathcal{F}_{s\pi} \\ i \frac{\partial}{\partial t} S_\pi &= \varepsilon(p)S_\pi - \Delta_s \mathcal{F}_{t\pi} + \Delta_t \mathcal{F}_{s\pi} - \Delta_{s\pi} \mathcal{F}_t + \Delta_{t\pi} \mathcal{F}_s \\ i \frac{\partial}{\partial t} C &= -\varepsilon(p)C - \Delta_s \mathcal{F}_{s\pi} - \Delta_t \mathcal{F}_{t\pi} - \Delta_{s\pi} \mathcal{F}_s - \Delta_{t\pi} \mathcal{F}_t \end{aligned}$$

où le 1 provient de la dérivation (au sens des distributions) de Θ , de la formule $\{R, R^\dagger\} = i\hbar = i$ (je choisis $\hbar = 1$ partout) et de $\int dq \delta(k - k') = \int dq \delta(q) = 1$.

Le champ magnétique n'est pas explicitement inclus, mais il suffit d'ajouter formellement $-\mu_b H$ (terme Zeeman) ou $\mu_{\text{orb}} B$ (couplage orbital) ou les deux à ε .

qui aurait donné des expressions différentes. Il suffirait d'utiliser les opérateurs c et c^\dagger pour ne pas rencontrer ces difficultés.

δ Formulation matricielle

On peut récrire les équations sous forme matricielle, en remplaçant $\partial/\partial t$ par ω car on utilise un temps imaginaire. On trouve :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon + i\omega & \Delta_s & \Delta_t & \Delta_{s\pi} & \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_s & -\varepsilon + i\omega & 0 & 0 & 0 & -\Delta_t & \Delta_{t\pi} & -\Delta_{s\pi} \\ \Delta_t & 0 & -\varepsilon + i\omega & 0 & 0 & \Delta_s & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{t\pi} \\ \Delta_{s\pi} & 0 & 0 & -\varepsilon + i\omega & 0 & -\Delta_{t\pi} & \Delta_t & -\Delta_s \\ \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon + i\omega & \Delta_{s\pi} & -\Delta_s & -\Delta_t \\ 0 & -\Delta_t & \Delta_s & -\Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} & \varepsilon + i\omega & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{t\pi} & -\Delta_{s\pi} & \Delta_t & -\Delta_s & 0 & \varepsilon + i\omega & 0 \\ 0 & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{t\pi} & -\Delta_s & -\Delta_t & 0 & 0 & \varepsilon + i\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G & -\mathcal{F}_s & -\mathcal{F}_t & -\mathcal{F}_{s\pi} & -\mathcal{F}_{t\pi} & -S_0 & -S_\pi & -C \\ \mathcal{F}_s^\dagger & G & S_0 & -C & -S_\pi & -\mathcal{F}_t^\dagger & \mathcal{F}_{t\pi}^\dagger & -\mathcal{F}_{s\pi}^\dagger \\ \mathcal{F}_t & -S_0 & G & S_\pi & -C & \mathcal{F}_s^\dagger & -\mathcal{F}_{s\pi}^\dagger & -\mathcal{F}_{t\pi}^\dagger \\ -\mathcal{F}_{s\pi}^\dagger & -C & -S_\pi & G & S_0 & -\mathcal{F}_{t\pi}^\dagger & \mathcal{F}_t^\dagger & -\mathcal{F}_s^\dagger \\ \mathcal{F}_{t\pi}^\dagger & S_\pi & -C & -S_0 & G & \mathcal{F}_{s\pi}^\dagger & -\mathcal{F}_s^\dagger & -\mathcal{F}_t^\dagger \\ S_0 & \mathcal{F}_t & -\mathcal{F}_s & \mathcal{F}_{t\pi} & -\mathcal{F}_{s\pi} & G & C & S_\pi \\ S_\pi & -\mathcal{F}_{t\pi} & \mathcal{F}_{s\pi} & -\mathcal{F}_t & \mathcal{F}_s & C & G & S_0 \\ C & \mathcal{F}_{s\pi} & \mathcal{F}_{t\pi} & \mathcal{F}_s & \mathcal{F}_t & -S_\pi & -S_0 & G \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

(les huit équations sont répétées chacune huit fois). Chaque terme de ces matrices est un opérateur (qui pourrait avoir une représentation matricielle, au minimum 2×2). En particulier, si on ajoute un terme de couplage magnétique (Zeeman ou orbital), il vient une matrice à coefficients réels 16×16 . Si on ajoute les deux, elle est 32×32 . On résout cette équation en écrivant explicitement les fonctions de Green comme les cofacteurs de la première matrice.

c Équations du gap couplées

α Paramètres d'ordre

En appliquant la valeur moyenne successivement sur chaque facteur de l'expression (3a), ou directement à partir de (2) et (3), on trouve que

$$\Delta_s = \langle \mathcal{F}_s \rangle_{t=0} \quad (3)$$

et de même pour tous les autres paramètres d'ordre.

β Choix des symétries

Si on choisit $\mathcal{F}_{s+} = \mathcal{F}_{s-}$, cela doit correspondre à un choix $\Delta_{s+} = \Delta_{s-} = \Delta_{s\pi}$ implicite, où $\Delta_{s\pm} = \langle \mathcal{F}_{s\pm} \rangle_{t=0}$ d'après (3).

Choisissons de même $\Delta_{t+} = \Delta_{t-} = \Delta_{t\pi}$; si on ne confond pas, dans ce cas, \mathcal{F}_{s+}

et \mathcal{F}_{s-} , ni \mathcal{F}_{t+} et \mathcal{F}_{t-} , ni S_+ et S_- , ni C_+ et C_- , on trouve la matrice 12×12 :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & \Delta_s & \Delta_t & \Delta_{s\pi} & \Delta_{s\pi} & \Delta_{t\pi} & \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_s & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_t & \Delta_{t\pi} & \Delta_{t\pi} & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{s\pi} \\ \Delta_t & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta_s & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{t\pi} & -\Delta_{t\pi} \\ \Delta_{s\pi} & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & -\Delta_{t\pi} & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 \\ \Delta_{s\pi} & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & -\Delta_{t\pi} & 0 & \Delta_t & 0 & -\Delta_s \\ \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & \Delta_{s\pi} & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t & 0 \\ \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & \Delta_{s\pi} & 0 & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t \\ 0 & -\Delta_t & \Delta_s & -\Delta_{t\pi} & -\Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} & \Delta_{s\pi} & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{t\pi} & -\Delta_{s\pi} & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{t\pi} & -\Delta_{s\pi} & 0 & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{t\pi} & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{t\pi} & 0 & -\Delta_s & -\Delta_t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$$

où on a omis le terme $i\omega$ partout dans la diagonale, ce qui correspond à omettre la matrice $i\omega I$. En posant $\mathcal{F}_{s\pi} = \frac{\mathcal{F}_{s+} + \mathcal{F}_{s-}}{2}$, $\mathcal{F}_{t\pi} = \frac{\mathcal{F}_{t+} + \mathcal{F}_{t-}}{2}$, $S_\pi = \frac{S_+ + S_-}{2}$ et $C_\pi = \frac{C_+ + C_-}{2}$, on retrouve exactement la matrice 8×8 précédente.

Choisissons maintenant $\Delta_{s+} = -\Delta_{s-} = \Delta_{s\pi}$ et $\Delta_{t+} = -\Delta_{t-} = \Delta_{t\pi}$; on trouve la matrice 12×12 (avec la même omission des termes $i\omega$) :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & \Delta_s & \Delta_t & \Delta_{s\pi} & -\Delta_{s\pi} & \Delta_{t\pi} & -\Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_s & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_t & -\Delta_{t\pi} & \Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} & -\Delta_{s\pi} \\ \Delta_t & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta_s & \Delta_{s\pi} & -\Delta_{s\pi} & \Delta_{t\pi} & -\Delta_{t\pi} \\ \Delta_{s\pi} & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & -\Delta_{t\pi} & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 \\ -\Delta_{s\pi} & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & \Delta_{t\pi} & 0 & \Delta_t & 0 & -\Delta_s \\ \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & \Delta_{s\pi} & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t & 0 \\ -\Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & -\Delta_{s\pi} & 0 & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t \\ 0 & -\Delta_t & \Delta_s & -\Delta_{t\pi} & \Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} & -\Delta_{s\pi} & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{t\pi} & -\Delta_{s\pi} & 0 & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{s\pi} & \Delta_{t\pi} & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{t\pi} & 0 & -\Delta_s & -\Delta_t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$$

En posant $\mathcal{F}_{s\pi} = \frac{\mathcal{F}_{s+} - \mathcal{F}_{s-}}{2}$, $\mathcal{F}_{t\pi} = \frac{\mathcal{F}_{t+} - \mathcal{F}_{t-}}{2}$, $S_\pi = \frac{S_+ - S_-}{2}$ et $C_\pi = \frac{C_+ - C_-}{2}$, on trouve la matrice 8×8 suivante (avec la même omission des termes $i\omega$) :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & \Delta_s & \Delta_t & \Delta_{s\pi} & \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_s & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & -\Delta_t & -\Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} \\ \Delta_t & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & \Delta_s & \Delta_{s\pi} & \Delta_{t\pi} \\ \Delta_{s\pi} & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & -\Delta_{t\pi} & \Delta_t & -\Delta_s \\ \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & \Delta_{s\pi} & -\Delta_s & -\Delta_t \\ 0 & -\Delta_t & \Delta_s & -\Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} & \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} & \Delta_t & -\Delta_s & 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & \Delta_{s\pi} & \Delta_{t\pi} & -\Delta_s & -\Delta_t & 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$$

Choisissons enfin $\Delta_{s+} = -\Delta_{s-} = \Delta_{s\pi}$ et $\Delta_{t+} = \Delta_{t-} = \Delta_{t\pi}$; on trouve la matrice

12 × 12 (avec la même omission des termes $i\omega$) :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & \Delta_s & \Delta_t & \Delta_{s\pi} & -\Delta_{s\pi} & \Delta_{t\pi} & \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_s & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_t & \Delta_{t\pi} & \Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} & -\Delta_{s\pi} \\ \Delta_t & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta_s & \Delta_{s\pi} & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{t\pi} & -\Delta_{t\pi} \\ \Delta_{s\pi} & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & -\Delta_{t\pi} & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 \\ -\Delta_{s\pi} & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & -\Delta_{t\pi} & 0 & \Delta_t & 0 & -\Delta_s \\ \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & \Delta_{s\pi} & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t & 0 \\ \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & -\Delta_{s\pi} & 0 & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t \\ 0 & -\Delta_t & \Delta_s & -\Delta_{t\pi} & -\Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} & -\Delta_{s\pi} & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{t\pi} & -\Delta_{s\pi} & 0 & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{s\pi} & -\Delta_{t\pi} & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{t\pi} & 0 & -\Delta_s & -\Delta_t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$$

qui est irréductible. Dans ce cas, les solutions ne vérifient pas nécessairement $\mathcal{F}_{s+} = -\mathcal{F}_{s-}$ ni $\mathcal{F}_{t+} = \mathcal{F}_{t-}$. Pour en être sûr, il faut résoudre la matrice plus générale (avec la même omission des termes $i\omega$) :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & \Delta_s & \Delta_t & \Delta_{s+} & \Delta_{s-} & \Delta_{t+} & \Delta_{t-} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_s & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta_t & \Delta_{t-} & \Delta_{t+} & -\Delta_{s-} & -\Delta_{s+} \\ \Delta_t & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & \Delta_s & -\Delta_{s-} & -\Delta_{s+} & -\Delta_{t-} & -\Delta_{t+} \\ \Delta_{s+} & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & -\Delta_{t+} & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 \\ \Delta_{s-} & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & -\Delta_{t-} & 0 & \Delta_t & 0 & -\Delta_s \\ \Delta_{t+} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & 0 & \Delta_{s+} & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t & 0 \\ \Delta_{t-} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & \Delta_{s-} & 0 & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t \\ 0 & -\Delta_t & \Delta_s & -\Delta_{t+} & -\Delta_{t-} & \Delta_{s+} & \Delta_{s-} & \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{t-} & -\Delta_{s-} & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{t+} & -\Delta_{s+} & 0 & \Delta_t & 0 & -\Delta_s & 0 & 0 & \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta_{s-} & -\Delta_{t-} & -\Delta_s & 0 & -\Delta_t & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & -\Delta_{s+} & -\Delta_{t+} & 0 & -\Delta_s & -\Delta_t & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$$

On trouve des équations similaires à celles trouvées par la méthode de Bogoliubov. Cela se comprend puisqu'on a refait une transformation de Fourier $t \rightarrow \omega$. Attention cependant que ce ne sont pas les équations du gap qui posent problème dans la méthode de Bogoliubov, mais les solutions explicites (que cette méthode offre l'avantage de pouvoir calculer) qui sont discontinues à $H = 0$.

γ Résolution des équations couplées avec un terme Zeeman

Il faut expliciter le champ magnétique. J'ai choisi un terme Zeeman, qui est nécessaire pour détruire les paires singulet à haut champ. En imposant des symétries supplémentaires, on obtient une matrice 4 × 4 :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon(k) - \mu H + i\omega & \Delta_s & \Delta_t & 0 \\ \Delta_s & -\varepsilon(k) + \mu H + i\omega & 0 & -\Delta_t \\ \Delta_t & 0 & -\varepsilon(k) - \mu H + i\omega & \Delta_s \\ 0 & -\Delta_t & \Delta_s & \varepsilon(k) + \mu H + i\omega \end{pmatrix}$$

qui donne les deux équations⁴ du gap couplées

$$\frac{1}{g_s} = \sum_{\epsilon=\pm 1} \int_{-T_C/2}^{T_C/2} de \left\{ \frac{\tanh\left(\frac{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, \epsilon \mu_B H)}{2T}\right)}{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, \epsilon \mu_B H)} \left(1 + \epsilon \frac{\mu_B H}{\sqrt{e^2 + \Delta_s^2}}\right) \right\} \quad (4)$$

$$\frac{1}{g_t} = \sum_{\epsilon=\pm 1} \int_{-T_C/2}^{T_C/2} de \left\{ \frac{\tanh\left(\frac{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, \epsilon \mu_B H)}{2T}\right)}{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, \epsilon \mu_B H)} \right\} \quad (5)$$

avec $\Theta(x, y, z, t) = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2 + t^2 + 2xt\sqrt{x^2 + z^2}}$. On notera I_s le terme de droite de (4) et I_t celui de droite de (5). Les fonctions I_s et I_t dépendent uniquement de Δ_s , Δ_t , H et T .

Il existe, pour certaines valeurs de la température T et du champ magnétique H des solutions couplées (Δ_s, Δ_t) , solutions simultanées des deux équations $\frac{1}{g_s} = I_s$ et $\frac{1}{g_t} = I_t$, qui correspondent à une phase de coexistence. Il faut également rechercher les solutions ordinaires, soit singulet, soit triplet, qui sont, soit Δ_s solution de l'équation $\frac{1}{g_s} = I_s$ en posant $\Delta_t = 0$, soit Δ_t solution de $\frac{1}{g_t} = I_t$ en posant $\Delta_s = 0$.

La résolution des équations couplées nécessite un grand soin. On peut en comprendre la difficulté sur la courbe suivante, qui donne le produit de $g_s I_s$ en fonction de Δ_s . Les intersections avec la droite $y = 1$ donnent les solutions de (4). Dans le début de la courbe, on distingue très bien la solution Δ_s issue du cas mixte, qui vérifie $g_s I_s = g_t I_t$ et la solution du cas singulet seul. Il est naturel de prolonger la courbe mixte avec la solution du cas singulet seul mais ce n'est pas nécessaire : tous les points de vue se rejoignent, grâce à l'analyse des énergies libres, présentée à la section suivante).

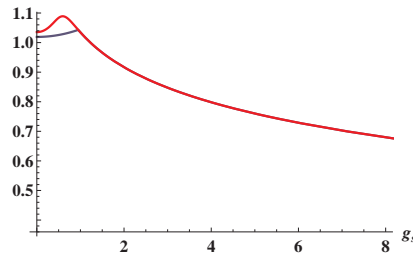


FIGURE 5 – Courbes de I_s en fonction de Δ_s . On distingue pour les petites valeurs de Δ_s la courbe pour les solutions couplées (en bleu) qui rejoint la courbe pour l'appariement singulet pur (en rouge).

4. Dans [34], j'ai utilisé un autre choix, qui donnait les équations

$$\frac{1}{g_s} = \int_{-\frac{T_C}{2}}^{\frac{T_C}{2}} dk \frac{\tanh\left(\frac{\sqrt{\Delta_s^2 + (v_f k)^2} + \mu_B H}{2T}\right) + \tanh\left(\frac{\sqrt{\Delta_s^2 + (v_f k)^2} - \mu_B H}{2T}\right)}{2\sqrt{\Delta_s^2 + (v_f k)^2}}$$

$$\frac{1}{g_t} = \int_{-\frac{T_C}{2}}^{\frac{T_C}{2}} dk \frac{\tanh\left(\frac{\sqrt{\Delta_t^2 + (v_f k - \mu_B H)^2}}{2T}\right)}{\sqrt{\Delta_t^2 + (v_f k - \mu_B H)^2}}$$

mais le diagramme résultant est très proche.

Pour départager ces différentes solutions, il faut calculer leur énergie libre. L'état physique correspond à la plus basse énergie libre.

d Définition de l'énergie libre

Pour une équation du gap ordinaire (comme pour un état singulet ou un état triplet), on peut calculer la différence [209, 210] entre l'énergie libre du système supraconducteur (j'ai choisi ici singulet) et l'état normal :

$$\Delta F = - \int_0^{g_s} dg'_s \left(\frac{\Delta_s(g'_s)}{g'_s} \right)^2 = - \int_0^{g_s} dg'_s I_s^2 \quad (6)$$

où il faut résoudre la dépendance implicite $\Delta_s(g'_s)$ donnée par (4). Cette formule est l'intégrale de $\delta F = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \lambda} \delta \lambda$ [211] où λ décrit une perturbation, ici $\lambda = g_s$. La division par g_s provient de la définition du Hamiltonien ; si le terme supraconducteur s'écrivait avec un facteur $g_s \Delta_s$, il n'y aurait pas de $1/g_s$. On doit modifier (6) lorsqu'il y a deux paramètres.

α Principe d'addition

Pour une solution couplée, on calcule l'énergie libre de façon générique en ajoutant les contributions singulet et triplet :

$$\begin{aligned} \Delta F &= - \int_0^{g_s} dg'_s \left(\frac{\Delta_s}{g'_s} \right)^2 - \int_0^{g_t} dg'_t \left(\frac{\Delta_t}{g'_t} \right)^2 \\ &= - \int_0^{g_s} dg'_s I_s^2 - \int_0^{g_t} dg'_t I_t^2 . \end{aligned}$$

Il n'est pas nécessaire de généraliser la formule intégrale de Landau à deux paramètres, un seul paramètre de perturbation λ convient. On choisit encore $\lambda = g_s$ et on pose :

$$g'_t = \frac{g_t}{g_s} g'_s \approx \frac{10,783}{11,5} g'_s$$

où ce rapport g_s/g_t a été estimé numériquement [33, 34]. En effet, en acceptant que ce rapport a bien cette valeur⁵, la minimisation de la somme des deux intégrales

$$\begin{aligned} \Delta F &= - \int_0^{g_s} dg'_s \frac{1}{g_s'^2} (\Delta_s^2 + \frac{g_s}{g_t} \Delta_t^2) \\ &= - \int_0^{g_s} dg'_s (I_s^2 + \frac{g_s}{g_t} I_t^2) \end{aligned}$$

donne le même résultat que la minimisation à deux paramètres de la somme précédente. Ce raisonnement est valable quelque soit la valeur (non nulle) du rapport.

β Transition du second ordre

La physique est cependant beaucoup plus subtile. On montre sur la figure suivante des courbes de Δ_s et Δ_t en fonction de g'_s .

5. Il dépend peut-être de certains paramètres physiques, mais ceci est au moins valable dans une région localisée du diagramme de phase.

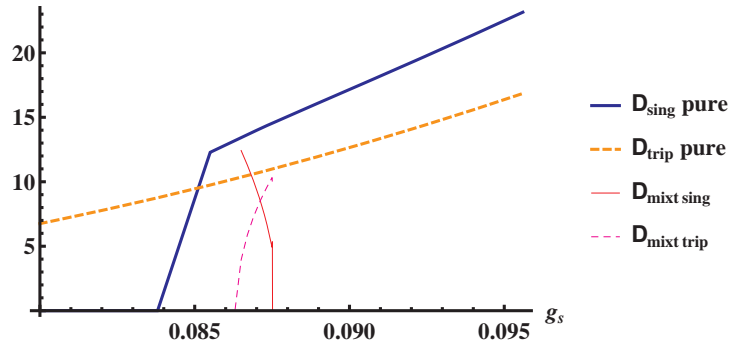


FIGURE 6 – Courbes de Δ_s et Δ_t pour $T \sim 0.1$ K and $H \sim 1.1$ T. La courbe pleine en bleue est celle de Δ_s dans une phase singulet pure, la courbe orange hachurée celle de Δ_t dans une phase triplet pure, la courbe fine rouge celle de Δ_s dans une phase de coexistence et la courbe violette hachurée celle de Δ_t dans la même phase de coexistence.

On constate tout d'abord que les solutions couplées (Δ_s, Δ_t) non triviales, vérifiant $g_s I_s = g_t I_t$, $\Delta_s \neq 0$ et $\Delta_t \neq 0$, n'existent que sur un intervalle très étroit $g'_s \in [0,861 ; 0,875]$. En dehors de cet intervalle, les solutions sont ordinaires (singulet $(\Delta_s, 0)$ ou triplet $(0, \Delta_t)$). Ces solutions correspondent toujours, sur la figure 5, à des points sur la branche des Δ_s calculés pour des paramètres couplés, tandis que les solutions éventuelles situées sur le prolongement singulet pur donnent les énergies libres de ces phases ordinaires.

Aucun problème d'interprétation ne survient pour ce qui concerne une phase ordinaire, il suffit d'intégrer la solution ordinaire correspondante de 0 jusqu'à, soit g_s pour un état singulet, soit $g_t = \frac{10.783}{11.5} g_s$ pour un état triplet. Par contre, il convient de prolonger les courbes obtenues pour les solutions couplées en dehors de l'intervalle $[0,861 ; 0,875]$.

Cela peut se faire de plusieurs façons, ce qui pose un problème conceptuel majeur. On peut cependant le résoudre par l'argument suivant : on observe que les courbes fines correspondent à un effondrement du paramètre d'ordre singulet, d'une part, et à une montée parallèle du paramètre d'ordre triplet. Plus précisément, $\Delta_s(0,861) \approx 13$ K égale la valeur nominale du paramètre dans la phase singulet et tombe à $\Delta_s(0,876) = 0$; tandis que $\Delta_t(0,861) = 0$ et atteint $\Delta_t(0,876) = 11$ K la valeur nominale du paramètre dans la phase triplet. La phase de coexistence rend Δ_s et Δ_t continus, et la transition, si cette phase est la plus stable thermodynamiquement, doit être du second ordre.

Aussi, il faut, pour être cohérent avec cette explication, prolonger Δ_s par la courbe de la phase singulet pure, pour $g_s < 0,861$ (et Δ_t reste nul), tandis qu'il faut prolonger Δ_t par la courbe de la phase triplet pure, pour $g_s > 0,876$ (et Δ_s reste nul). Ces prolongements sont bien ceux qu'on obtient en prolongeant la courbe 5. Un dernier argument conforte cette interprétation, c'est que ce schéma est toujours le même, pour tous les paramètres physiques.

γ Interprétation thermodynamique

L'analyse n'est pas terminée. La nature de la phase thermodynamique dépend également de la valeur de g_s , le couplage effectif, qui est une constante physique (contrairement au paramètre g'_s qui varie de 0 à g_s). Si $g_s \leq 0,861$, on ne trouve tout simplement jamais de solutions couplées, il n'existe que les deux phases ordinaires singulet et triplet, dont les énergies libres se croisent quand H augmente, indiquant une transition singulet/triplet.

Si $g_s \geq 0,876$, la situation est plus complexe. En effet, la phase décrite par une solution couplée a la symétrie triplet, puisque pour $g'_s = g_s$ l'état est triplet. Mais son énergie libre n'est pas celle d'une phase triplet ordinaire. Il s'agit d'une nouvelle phase thermodynamique, qu'il faudrait nommer phase triplet *avec des instabilités singulet sous-jacentes*. Cette phase résulte d'une compétition entre couplage singulet et triplet où les paires singulet sont instables.

Enfin, si $0,861 < g_s < 0,876$, on trouve la phase de coexistence que l'on cherchait. Il ne reste plus qu'à étudier sa stabilité en comparant les énergies libres des diverses configurations.

e Phase de coexistence

α Instabilité thermodynamique

Sur la figure 7, on constate que l'énergie libre de la phase mixte est toujours moins négative que les autres. Ce comportement s'est révélé très robuste.

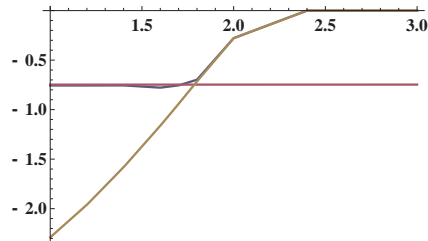


FIGURE 7 – Énergies libres des différentes configurations en fonction du champ magnétique pour une température $T \sim 1$ K : en rouge l'état triplet, qui devient le plus favorable pour $H > 1,8$ T ; en marron l'état singulet, qui est plus favorable pour les champs $H < 1,8$ T ; en bleu l'état mixte, qui n'est jamais le plus favorable, bien qu'il soit presque stable parfois. L'échelle des ordonnées est arbitraire

β Choix des couplages

Changer le paramètre g_s/g_t s'est révélé inefficace, j'ai essayé avec $g_s/g_t = 1,057$ et $g_s/g_t = 1,052$; la plage disponible pour l'existence de la phase mixte est très étroite. Il est remarquable cependant que la valeur 1,057 venait d'un fit plus ancien de M. Héritier pour trouver la bonne valeur critique T_c , et qu'elle donne, non seulement un champ critique compatible avec les valeurs expérimentales, mais aussi qu'elle est dans l'intervalle pourtant très étroit où peut exister la phase de coexistence.

Nous avons également utiliser le groupe de renormalisation (travaux décrits au chapitre B) pour recalculer g_s et g_t . Pour éviter la divergence ultra-violette, on

arrête le flot à $\Lambda = T^*$, la température de transition dimensionnelle définie page 42, car, dès qu'on entre dans le régime tridimensionnel, le système devient un gaz de Fermi qui atteint immédiatement l'équilibre, d'où un gel des couplages à cette température. La faiblesse de cette prescription réside dans le lien entre température et Λ .

C. Bourbonnais a récemment suggéré que ce rapport g_s/g_t dépende du champ magnétique. Cette hypothèse n'est pas pertinente ici, car la phase de coexistence n'existe que sur une plage très étroite en champ magnétique. De plus, elle n'est pas nécessaire pour modéliser une transition singulet/triplet.

γ Diagramme de phase

Le diagramme de phase finalement obtenu [187], quand on prend en compte les énergies libres, est similaire aux diagrammes obtenus sans phase de coexistence :

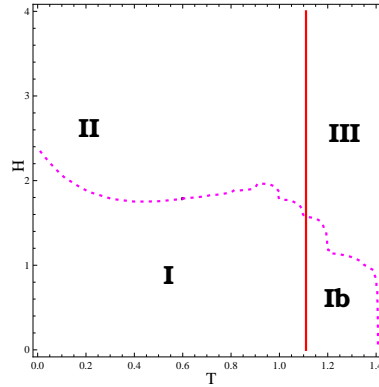


FIGURE 8 – Diagramme de phase pour une échelle fermionique avec un hamiltonien de Hubbard et un terme de Zeeman, en fonction de la température en abscisse et du champ magnétique en ordonnée. La zone I (et Ibis) est la zone singulet (dans la zone Ibis, il n'y a aucune compétition avec l'ordre triplet). La zone II est la zone triplet et la zone III correspond à l'état normal.

Si j'avais représenté la phase de coexistence, elle se situerait, comme attendu, très près de la frontière singulet/triplet, mais elle n'est jamais stable thermodynamiquement et ce n'est donc pas légitime.

δ Résolution des équations couplées avec couplage orbital explicite

Dans les diagrammes présentés ci-avant, le couplage orbital n'est pris en compte qu'implicitement à travers le modèle de bandes de la chaîne fermionique. J'ai fait des calculs en remplaçant le terme Zeeman par le terme orbital explicite, que j'ai

introduit précédemment. Avec des hypothèses simples, on obtient la matrice

$$\begin{pmatrix} \varepsilon(k) - \mu H + i\omega & \Delta_s & \Delta_t & \Delta_{s\pi} & \Delta_{tp} & 0 & 0 & 0 \\ \Delta_s & -\varepsilon(k) - \mu H + i\omega & 0 & 0 & 0 & -\Delta_t & \Delta_{t\pi} & -\Delta_{s\pi} \\ \Delta_t & 0 & -\varepsilon(k) - \mu H + i\omega & 0 & 0 & \Delta_s & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{t\pi} \\ \Delta_{s\pi} & 0 & 0 & -\varepsilon(k) + \mu H + i\omega & 0 & -\Delta_{t\pi} & \Delta_t & -\Delta_s \\ \Delta_{t\pi} & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon(k) + \mu H + i\omega & \Delta_{s\pi} & -\Delta_s & -\Delta_t \\ 0 & -\Delta_t & \Delta_s & -\Delta_{t\pi} & \Delta_{s\pi} & \varepsilon(k) - \mu H + i\omega & 0 & 0 \\ 0 & \Delta_{t\pi} & -\Delta_{s\pi} & \Delta_t & -\Delta_s & 0 & \varepsilon(k) + \mu H + i\omega & 0 \\ 0 & -\Delta_{s\pi} & -\Delta_{t\pi} & -\Delta_s & -\Delta_t & 0 & 0 & \varepsilon(k) + \mu H + i\omega \end{pmatrix}.$$

J'ai appliqué diverses symétries supplémentaires, $\Delta_s = \Delta_{s\pi}$ ou bien $\Delta_{s\pi} = 0$ (et d'autres, analogues, pour les paramètres triplet). On trouve des phases de coexistence instables, qui n'ont de toute façon pas retenu mon attention, parce que, lorsqu'on analyse les résultats, on constate qu'ils ne sont pas acceptables physiquement : soit Δ_s augmente avec H , soit Δ_t décroît trop vite avec H .

Comme les ordres de grandeur des termes orbital et Zeeman sont voisins, il n'est pas justifié de supprimer le terme Zeeman. Après mure réflexion, il m'est apparu que c'est justement l'effet Zeeman qui détruit les paires de symétrie singulet, et permet la transition singulet/triplet, que l'on trouve dans ces systèmes. Autrement dit, le seul espoir de trouver cette phase de coexistence serait d'ajouter un terme Zeeman et un terme orbital simultanément. Mais, si on ne fait aucune hypothèse sur les symétries, cela conduirait à une matrice 24×24 au minimum. Cela m'amène aux perspectives prochaines de ce travail.

D Perspectives

Après le départ de C. Nickel, je n'ai pas voulu poursuivre seul des calculs de renormalisation et j'ai, par contre, développé d'autres approches, de type BCS, qui m'offrent des perspectives très intéressantes.

Une application au départ inattendue de mes travaux est née d'une collaboration avec D. Le Bolloc'h, sur les ondes de densité dans le chrome.

1 Étude théorique des Ondes de Densité dans le chrome

a Contexte expérimental

Des expériences de diffraction cohérente de rayons X, menées par Le Bolloc'h *et al*, ont permis de mettre en évidence certaines propriétés remarquables de ces cristaux. On y retrouve un mécanisme d'emboîtement, assez similaire à celui que j'ai exposé dans les sels de Bechgaard. Il s'agit ici de comprendre la coexistence entre des Ondes de Densité de Spin et de Charge. Ces ondes disparaissent pour une température $T > T_N$, où T_N est appelée température de Néel.

Ces instabilités présentent une structure quasi-unidimensionnelle très marquée : alors que le cristal est tridimensionnel, l'emboîtement de la surface de Fermi se fait selon un axe unique qu'on notera Ox , les vecteurs d'ondes de densité sont parallèles à Ox et se caractérisent par une distorsion de la longueur d'onde de Fermi $2k_f = \frac{2\pi}{a}(1 \pm \delta)$, où a est le paramètre de maille selon la direction Ox .

On trouve deux poches de trous et une poche d'électrons, qu'on représente dans l'espace réciproque :

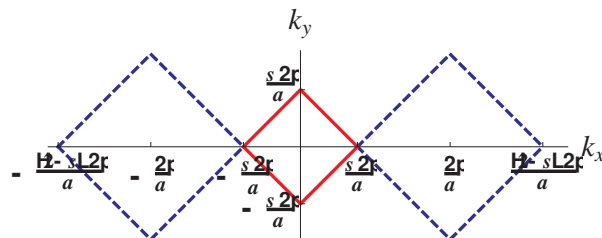


FIGURE 1 – Surface de Fermi du chrome, dans le plan $0xy$. les deux grandes poches carré sont des poches de trous, la plus petite au centre est la poche d'électrons.

L'emboîtement entre les poches d'électrons et de trous est parfait entre le bord de la surface de Fermi des électrons et son image par $2k_f$ dans la surface de Fermi des trous, ainsi qu'entre les poches de trous. Il explique l'apparition des Ondes de Densité de Spin et de Charge. Il est dit incommensurable car $k_f a / \pi \in \mathbb{R} \subset \mathbb{Q}$. Étrangement, les expérimentateurs écrivent que l'emboîtement électron-trou est imparfait, parce qu'il ne couvre pas la totalité de la surface de Fermi des trous, on peut regretter ce vocabulaire pour le moins maladroit.

Les Ondes de Densité de Spin et de Charge sont extrêmement bien corrélées : elles ont exactement la même température de Néel [212] $T_N = 311$ K ; elles coexistent au niveau microscopique, comme l'ont montré des expériences [213] réalisées dans des micro-domaines. Cette cohérence s'explique très bien avec un mécanisme de magnétostriction, qui est généralement cité dans les articles.

Cependant, ce modèle ne peut expliquer certaines différences récemment observées dans le comportement des fluctuations [214] : les tâches de réflexion par diffraction cohérente de rayons X des Ondes de Densité de Charge, qui sont des satellites autour de $4k_f$ alignés selon l'axe Ox , présentent des tavelures très visibles, contrairement aux tâches des Ondes de Densité de Spin, qui sont des satellites autour de $2k_f$ également alignés selon l'axe Ox . De plus, les tâches des Ondes de Densité de Charge présentent des défauts de phase quand on augmente les défauts dans le chrome, tandis que les Ondes de Densité de Spin n'en présentent pas.

Pour essayer de comprendre les différences entre les fluctuations Ondes de Densité de Spin et de Charge, on considère un couplage purement électronique. J'ai repris, sous l'impulsion de Le Bolloc'h, le modèle de Young et Sokolov de 1978 [215], qui explique que les Ondes de Densité de Charge sont créés par des modes harmoniques des Ondes de Densité de Spin. Ces dernières résultent de l'emboîtement électron-trou, tandis que les Ondes de Densité de Charge résultent de l'emboîtement trou-trou. Pour être plus précis, il y a une compétition entre des mécanismes d'emboîtement trou-trou direct et des mécanismes harmoniques, qui correspondent à un emboîtement trou-électron + électron-trou. Si les Ondes de Densité de Charge sont bien des harmoniques des Ondes de Densité de Spin, cela expliquerait qu'elles soient moins stable que ces dernières, dont elles dépendent.

b Modèle en champ moyen

Le hamiltonien de Young et Sokolov [215] s'écrit

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_a + i\omega & \Delta_S & \Delta_S \\ \Delta_S & \varepsilon_b - \delta e + i\omega & \Delta_C \\ \Delta_S & \Delta_C & \varepsilon_b + \delta e + i\omega \end{pmatrix}$$

où Δ_S (resp. Δ_C) désigne le paramètre d'ordre des Ondes de Densité de Spin (resp. de Charge), ε_a est l'énergie de la bande d'électrons et ε_b celle des deux bandes de trous. Leur dégénérescence est levée par le paramètre δe , comme on va l'expliquer plus loin.

J'ai choisi une relation de dispersion linéarisée. Partant de la surface de Fermi Fig. 1, qui est observée expérimentalement, on obtient un modèle de prisme :

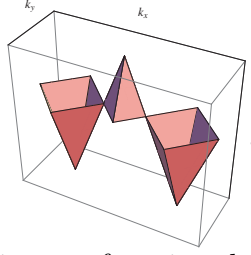


FIGURE 2 – Dispersion linéarisée en fonction de \mathbf{k} , qui est défini dans le plan $0xy$. L'axe $0z$ est ici l'énergie.

Dans ce modèle, l'énergie des électrons s'écrit

$$\frac{\varepsilon_a(k)}{e_a} = 1 - \left| \frac{ka}{\pi s} \right|$$

et celle des trous (on utilise \pm pour la poche situé autour de $\pm \frac{\pi}{a}$)

$$\frac{\varepsilon_b(k)}{e_b} = 1 - \left| \frac{ka \mp \pi}{\pi(1-s)} \right|$$

avec e_a l'énergie minimale des électrons et e_b celle des trous (à la pointe des prismes), $k = k_x + k_y$ sur la face en haut à droite des prismes correspondant à la première bissectrice ($k = -k_x + k_y$ pour la seconde bissectrice, $k = -k_x - k_y$ pour la troisième et $k = k_x - k_y$ pour la dernière), enfin $s \in]0, 1[$ la mesure relative des poches. On trouve $e_a = -se_0$ et $e_b = (1-s)e_0$, où $e_0 = e_b - e_a$ est la différence d'énergie maximale. On a, par la suite, utilisé la valeur mesurée expérimentalement $s \approx 8/21$.

Bien sûr, la pointe des prismes devrait, en toute rigueur, être remplacée par une courbe sinusoïdale bidimensionnelle, mais le nombre d'états diminue fortement lorsqu'on approche la pointe, de sorte qu'on ne commet pas une grosse erreur, si on les intègre. De plus, les états qu'on trouve loin de la surface de Fermi, si on prenait une dispersion plus réaliste, sont très loin de l'emboîtement, et ne participent pas aux mécanismes Onde de Densité de Spin ni de Charge, c'est pourquoi cette dispersion linéarisée est bien légitime.

Le paramètre δe est lié à la distorsion δ du vecteur de Fermi. Si on représente les vecteurs de l'espace réciproque sous la forme $(\varepsilon(k_x, k_y), k_x, k_y)$, à rapprocher des quadri-vecteurs habituels, auxquels j'ai retiré la composante k_z inutile ici, les vecteurs d'emboîtement électron-trou s'écrivent (je choisis les faces correspondant à la première bissectrice et la poche de trous située dans la zone $x > 0$)

$$(\varepsilon(k_f + k_x, k_y), k_f + k_x, k_y) - (\varepsilon(k_x, k_y), k_x, k_y) = (v_f(\frac{\pi}{a}(1-\delta) - 2k), k_f, 0)$$

avec $k_f = (\frac{\pi}{a} - \delta)$, $k = k_x + k_y$ varie de 0 à sa/π et $e_0 = v_f\pi/a$. En égalisant la différence d'énergies obtenue à $\varepsilon_b - \varepsilon_a - \delta e$, où les énergies ε_a et ε_b sont calculées **sans** distorsion (auquel cas on aurait $\delta e = 0$ dans \mathcal{H}), on trouve $\delta e = e_0\delta$.

Si on refait le calcul avec l'emboîtement trou-trou, on trouve bien le même résultat. Dans l'article initial de Young et Sokolov [215], le couplage Onde de Densité de Charge est calculé par perturbation et δe est un paramètre ad hoc, qui assure la non divergence des quantités calculées. Au contraire, j'ai fait des calculs exacts, qui, non seulement ne divergent pas quand $\delta e = 0$, mais se simplifient fortement.

c Équations du gap couplées

On résout, de façon similaire à l'étude des phases supraconductrices,

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_a & \Delta_S & \Delta_S \\ \Delta_S & \varepsilon_b - \delta e & \Delta_C \\ \Delta_S & \Delta_C & \varepsilon_b i + \delta e \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{G}_a & \mathcal{F}_s & \mathcal{F}_s \\ \mathcal{F}_s^\dagger & \mathcal{G}_b & \mathcal{F}_c \\ \mathcal{F}_s^\dagger & \mathcal{F}_c^\dagger & \mathcal{G}_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

puis on moyenne \mathcal{F}_s et \mathcal{F}_c en sommant sur les fréquences de Matsubara, ce qui donne les deux équations du gap couplées :

$$\frac{1}{g_S} = \int dk_x dk_y \left(\frac{(\varepsilon_b - x_0 + e_0 \delta - \Delta_C) \tanh(\frac{x_0}{2T})}{2(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + \frac{(\varepsilon_b - x_1 + e_0 \delta - \Delta_C) \tanh(\frac{x_1}{2T})}{2(x_0 - x_1)(x_2 - x_1)} + \frac{(\varepsilon_b - x_2 + e_0 \delta - \Delta_C) \tanh(\frac{x_2}{2T})}{2(x_0 - x_2)(x_1 - x_2)} \right) \quad (1)$$

$$\frac{1}{g_C} = \int dk_x dk_y \left(\frac{(\varepsilon_a - x_0 - \Delta_S^2/\Delta_C) \tanh(\frac{x_0}{2T})}{2(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + \frac{(\varepsilon_a - x_1 - \Delta_S^2/\Delta_C) \tanh(\frac{x_1}{2T})}{2(x_0 - x_1)(x_2 - x_1)} + \frac{(\varepsilon_a - x_2 - \Delta_S^2/\Delta_C) \tanh(\frac{x_2}{2T})}{2(x_0 - x_2)(x_1 - x_2)} \right) \quad (2)$$

où x_0 , x_1 et x_2 sont les trois zéros de $\det(\mathcal{H})$:

$$\begin{aligned} x_0 &= \frac{2}{3} sq \cos\left(\frac{\text{Arccos}(sm)}{3}\right) + \frac{\varepsilon_a + 2\varepsilon_b}{3} \\ x_1 &= \frac{2}{3} sq \cos\left(\frac{\text{Arccos}(sm) + 2\pi}{3}\right) + \frac{\varepsilon_a + 2\varepsilon_b}{3} \\ x_2 &= \frac{2}{3} sq \cos\left(\frac{\text{Arccos}(sm) + 4\pi}{3}\right) + \frac{\varepsilon_a + 2\varepsilon_b}{3} \end{aligned}$$

$$\text{enfin } sq = \sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 3(\delta^2 e_0^2 + 2\Delta_S^2 + \Delta_C^2)}$$

$$\text{et } sq^3 sm = (\varepsilon_a - \varepsilon_b)((\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 - 9(\delta^2 e_0^2 + \Delta_C^2)) + 9\Delta_S^2(\varepsilon_a - \varepsilon_b + 3\Delta_C).$$

On notera, de façon similaire au cas supraconducteur, I_S le terme de droite de (1) et I_C celui de droite de (2).

Pour intégrer proprement à deux dimensions $\int dk_x dk_y$, il faut calculer la dégénérescence le long des bords de prisme, qui s'écrit $4 \int_{\delta}^{\frac{\pi}{a}} \sqrt{2}(k - \delta) dk$ dans le cas couplé (c'est à dire quand $\Delta_S \neq 0$ et $\Delta_C \neq 0$ simultanément), $4 \int_0^{\frac{\pi}{a}} \sqrt{2} k dk$ pour les Ondes de Densité de Spin (quand $\Delta_C = 0$; dans ce cas, $\varepsilon_b + e_0 \delta$ s'écrit $e_b + e_0 |\delta - k|$ et non $e_b + e_0(\delta - k)$) et $4 \int_{\delta}^{\frac{(1-s)\pi}{a}} \sqrt{2}(k - \delta) dk$ pour les Ondes de Densité de Charge (quand $\Delta_S = 0$). Dans le cas mixte, c'est la poche d'électron, plus petite ($s = 8/21$) qui impose toujours la dégénérescence.

d Calcul des énergies libres

Il y a une grande différence entre la recherche de la phase de coexistence supraconductrice, que j'ai présentée précédemment, et l'étude des ondes de densité dans le chrome. Dans ce dernier système, la coexistence est observée expérimentalement

à toutes les températures. Il faut choisir les constantes de façon à ce que la phase de coexistence soit donc toujours celle d'énergie libre la plus basse.

Une autre différence est que les solutions de $g_S I_S = g_C I_C$ forment ici des courbes le plus souvent ouvertes, alors qu'elles sont toujours fermées pour la supraconductivité. Je présente ici une représentation intégrale, en fonction des paramètres d'ordre et non plus des couplages, que j'ai développée récemment et que je pourrai également utiliser en supraconductivité. Je note $\Delta_C = h(\Delta_S)$; la fonction implicite h n'est une application bijective que lorsqu'on restreint son domaine de définition et son espace d'arrivée sur des segments limités; on l'utilisera toujours sur de tels domaines.

La constante des interactions Onde de Densité de Spin est toujours négative, $g_S < 0$, tandis que pour les interactions Onde de Densité de Charge, $g_C < 0$ pour toutes les familles de solutions, sauf pour une vallée où $g_C > 0$. On écrit

$$\Delta F_{\text{ODS}} = \int_{g_S}^0 \left(\frac{\Delta_S}{g'_S} \right)^2 dg'_S = \int_{g_S}^0 dg'_S I_S^2 .$$

On fait le changement de variable $g'_S \rightarrow \Delta_S$, en notant $f_S(\Delta_S) = g'_S$. Il vient

$$\Delta F_{\text{ODS}} = \int_{f_S^{(-1)}(g_S)}^0 \left(\frac{\Delta_S}{f_S(\Delta_S)} \right)^2 f'_S(\Delta_S) d\Delta_S$$

et la dérivée s'écrit $f'_S = 1/I_S - \Delta_S I'_S / I_S^2$ avec

$$I'_S = \frac{\partial I_S}{\partial \Delta_S} + h'(\Delta_S) \frac{\partial I_S}{\partial \Delta_C} ;$$

les dérivations partielles sont celles des dépendances explicites de $I_S(\Delta_S, \Delta_C)$. De la même façon, on écrit

$$\Delta F_{\text{ODC}} = \int_0^{g_C} \left(\frac{\Delta_C}{g'_C} \right)^2 dg'_C = \int_0^{g_C} dg'_C I_C^2 ;$$

on a choisi la vallée où $g_C > 0$ mais il suffirait d'écrire $\int_{g_C}^0$ pour traiter le cas des autres solutions. On fait le changement de variable $g'_C \rightarrow \Delta_C$, avec $f_C(\Delta_C) = g'_C$. Il vient

$$\Delta F_{\text{ODC}} = \int_0^{f_C^{(-1)}(g_C)} \left(\frac{\Delta_C}{f_C(\Delta_C)} \right)^2 f'_C(\Delta_C) d\Delta_C$$

et la dérivée s'écrit $f'_C = 1/I_C - \Delta_C I'_C / I_C^2$ avec

$$I'_C = \frac{\partial I_C}{\partial \Delta_C} + \frac{1}{h'(\Delta_C)} \frac{\partial I_C}{\partial \Delta_S} ;$$

les dérivations partielles sont celles des dépendances explicites de $I_C(\Delta_S, \Delta_C)$. Les fonctions f_S et f_C sont liées et peuvent s'exprimer l'une en fonction de l'autre, de h et du rapport g_C/g_S assumé comme un paramètre fixe du modèle, mais on n'aura

pas besoin d'explicitier ces expressions. On utilise l'astuce suivante, en commençant par écrire la somme explicitement :

$$\begin{aligned}\Delta F &= \Delta F_{\text{ODS}} + \Delta F_{\text{ODC}} \\ \Delta F &= \int_{f_S^{(-1)}(g_S)}^0 (I_S - \Delta_S (\frac{\partial I_S}{\partial \Delta_S} + \frac{\partial I_S}{\partial \Delta_C} \frac{d\Delta_C}{d\Delta_S})) d\Delta_S + \int_0^{f_C^{(-1)}(g_C)} (I_C - \Delta_C (\frac{\partial I_C}{\partial \Delta_C} + \frac{\partial I_C}{\partial \Delta_S} \frac{d\Delta_S}{d\Delta_C})) d\Delta_C \\ \Delta F &= \int_{f_S^{(-1)}(g_S)}^0 (I_S - \Delta_S \frac{\partial I_S}{\partial \Delta_S} - \Delta_C \frac{\partial I_C}{\partial \Delta_S}) d\Delta_S + \int_0^{f_C^{(-1)}(g_C)} (I_C - \Delta_C \frac{\partial I_C}{\partial \Delta_C} - \Delta_S \frac{\partial I_S}{\partial \Delta_C}) d\Delta_C \quad (3)\end{aligned}$$

où on a échangé les termes contenant h ou $1/h$ de façon à éliminer h .

Il reste une dernière prescription importante : comme on a perdu les variables g'_S et g'_C , on doit les récupérer, à l'aide des formules

$$g_S = \frac{1}{I_S} \quad g_C = \frac{1}{I_C} .$$

Au fur et à mesure qu'on calcule les intégrales (3), on calcule les constantes g_S et g_C associées, de façon à obtenir des cartes $(g_S, \Delta F)$ (on a éliminé g_C à l'aide du rapport g_C/g_S). Les choses s'éclairent alors enfin, si on juxtapose toutes ces cartes sur une figure unique en fonction de g_S : chaque morceau de courbe bijectif de h contribue à un morceau de courbe partielle, et on doit rattacher ces morceaux, de façon à suivre une carte univoque quand $|g_S|$ augmente **à partir de zéro**.

Il viendra peut-être des prescriptions analogues à celle que j'ai démontrée pour l'étude de la phase de coexistence supraconductrice.

2 Phase de coexistence supraconductrice

Comme je l'ai déjà écrit, de nombreuses généralisations sont possibles, pour le calcul de cette phase de coexistence. Une première étape, relativement simple, consisterait à reprendre ces calculs en modifiant les symétries simplificatrices des paramètres d'ordre. En effet, si le groupe de symétrie authentique associé à un paramètre d'ordre est bien déterminé, j'ai dû, pour simplifier la matrice représentant le hamiltonien, rajouter des hypothèses simplificatrices, notamment concernant les relations entre $\Delta_\alpha(0)$ et $\Delta_\alpha(\pi)$ (pour $\alpha = s, t$) les valeurs d'un paramètre calculées sur les bandes 0 et π .

D'ailleurs, les relations que j'ai adoptée et qui ont l'avantage d'être plus simples, ne sont pas cohérentes : par exemple, on a la même symétrie pour les couplages singulet et triplet. Cela dit, rien n'est démontré, tant qu'on n'a pas exploité une hypothèse jusqu'au bout. La méthode revient à un classique essai/erreur, sauf que chaque essai peut nécessiter une ou plusieurs années.

Il est possible d'ailleurs que ces généralisations simples ne donnent rien. Il faudrait, dans ce cas, inclure séparément des paramètres $\Delta_\alpha(0)$ et $\Delta_\alpha(\pi)$, autrement dit quatre paramètres d'ordre indépendants, et inventer une façon de résoudre quatre équations du gap couplées.

Par ailleurs, j'aimerais tester le terme de couplage orbital supplémentaire que j'ai introduit. Les premiers tests que j'ai effectués semblent indiquer qu'on ne peut omettre le terme Zeeman. Les matrices sont deux fois plus grandes, mais le problème est conceptuellement inchangé, et j'ai constaté, sur des essais, qu'il reste soluble.

Deuxième partie

Barrière de Coulomb à une dimension

A Généralités

1 Introduction

Il s'agit d'une équation aux valeurs propres associée au potentiel de Coulomb $V(x) = \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0|x|}$, q et q' étant les charges des particules en interaction. À trois dimensions, ce problème est celui de l'atome d'hydrogène et a été résolu depuis le début du vingtième siècle [216]. À une dimension, la discontinuité à l'origine pose un problème extrêmement difficile et a donné lieu à un nombre assez étonnant de publications erronées, ce qui, d'un point de vue épistémologique, est peut-être l'intérêt majeur de ce problème. J'ai démontré récemment que les solutions définitives de ce problème n'apportent aucun résultat nouveau, contrairement à ce que j'ai cru découvrir tout d'abord [8]. Bien que j'ai mené mes derniers calculs seul, par l'analyse locale des équations différentielles, j'ai profité récemment de l'aide d'un mathématicien, spécialiste des extensions auto-adjointes.

Il ne faut pas confondre ce problème avec le potentiel $V(x) \propto |x|$, auquel je ne m'intéresserai pas. Par contre, mon travail permet de revisiter certains aspects, pas toujours très bien expliqués, du problème à trois dimensions.

2 Notions préalables

a Équation différentielle

L'équation de Schrödinger, ou plutôt l'équation aux valeurs propres $\mathcal{H}\varphi = E\varphi$, s'écrit

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0|x|} \varphi(x) = E\varphi(x)$$

où m est la masse des particules et E l'énergie associée à la fonction d'onde $|\varphi\rangle$. On utilisera plutôt l'équation équivalente

$$-\frac{d^2\varphi}{dx^2}(x) + \frac{\lambda}{|x|} \varphi(x) = e\varphi(x) \tag{1}$$

avec $\lambda = \frac{2mqq'}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}$ et $e = \frac{2mE}{\hbar^2}$. En général, je ne m'intéresserai qu'au cas du potentiel attractif $qq' < 0 \iff \lambda < 0$ mais une partie des résultats est valable dans tous les cas, ce que je m'efforcerai de préciser, le cas échéant.

b Équivalence de l'équation radiale de l'atome d'hydrogène

Il est connu [8] que (1) est équivalente à l'équation radiale à trois dimensions $\mathcal{H}_r\phi = E\phi$ pour un moment $l = 0$, où $\Psi = \phi(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ est la solution à trois dimensions de $\mathcal{H}\Psi = E\Psi$, Y_{lm} sont les harmoniques sphériques et (r, θ, φ) les coordonnées sphériques usuelles. Plus précisément, les solutions sont reliées par l'équation

$$\varphi(r) = r\phi(r) . \quad (2)$$

c Raccordement en $x = 0$

On considère e donné. Si on restreint (1) sur \mathbb{R}_+^* ou sur \mathbb{R}_-^* , on élimine la divergence en 0 et on peut appliquer le théorème de Cauchy, qui assure l'existence des solutions. Plus précisément, comme l'équation différentielle est d'ordre deux, les solutions forment un espace vectoriel d'ordre 2.

On a donc la situation suivante : on peut définir deux solutions indépendantes $\varphi_1^+(x)$ et $\varphi_2^+(x)$ sur \mathbb{R}_+^* , et de même $\varphi_1^-(x)$ et $\varphi_2^-(x)$ sur \mathbb{R}_-^* ; par linéarité de (1) toute solution φ (associé à e) s'écrit

$$\varphi(x) = \begin{cases} A_1\varphi_1^+(x) + A_2\varphi_2^+(x) & \text{si } x > 0 ; \\ a_1\varphi_1^-(x) + a_2\varphi_2^-(x) & \text{si } x < 0 . \end{cases}$$

Il ne reste *plus* qu'à raccorder la solution définie sur \mathbb{R}_+^* et celle définie sur \mathbb{R}_-^* pour résoudre (1), mais toute la difficulté réside ici. (1) est une équation physique, donc valable sur tout \mathbb{R} y compris en $x = 0$. Donc, non seulement les solutions physiques φ doivent être prolongeable par continuité en 0^+ et 0^- de sorte qu'on peut définir

$$\begin{aligned} \varphi(0^+) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \varphi(\epsilon) \\ \text{et} \quad \varphi(0^-) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \varphi(-\epsilon) \end{aligned}$$

ainsi que

$$\begin{aligned} \varphi''(0^+) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\varphi(2\epsilon) - 2\varphi(\epsilon) + \varphi(0^+)}{2\epsilon^2} \\ \text{et} \quad \varphi''(0^-) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\varphi(-2\epsilon) - 2\varphi(-\epsilon) + \varphi(0^-)}{2\epsilon^2} , \end{aligned}$$

mais il faudra établir des équations de raccordement entre ces limites. Le principe qui sous-tend ces calculs est que, connaissant φ sur un intervalle $] - \epsilon, 0[$, on peut la prolonger sur l'intervalle $]0, \epsilon[$, de la même façon qu'on peut prolonger, grâce au théorème de Cauchy, de façon unique, toute solution connue en $]x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon[$, pour tout $x_0 \neq 0$, ce qu'on résume plus couramment par la donnée de $(\varphi(x_0), \varphi'(x_0))$.

Si on postule ce principe de raccordement en $x = 0$, qu'on n'a cependant pas démontré, cela revient à dire qu'il existe une relation linéaire entre les coefficients (A_1, A_2) et (a_1, a_2) , donc une matrice D telle que

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad (3)$$

comme je l'ai fait dans [8]. Ce postulat suppose la perméabilité de la barrière en $x = 0$. Or, il se trouve que la barrière de Coulomb est impénétrable et imperméable à une dimension, comme Loudon l'avait imaginé [217]. La situation est par conséquent exceptionnelle, et les résultats publiés sont souvent en contradiction avec les standards de la physique quantique.

Nous allons commencer par étudier les propriétés de ce système à travers une partie de cette littérature.

B Historique

Il est impossible de retracer tous les articles portant, peu ou prou, sur ce sujet. Mentionons tout d'abord le travail de Fischer, Leschke et Mueller [218], qui donne une méthode mathématique pour résoudre ce problème en toute généralité. Je vais en donner les principales références, en insistant sur les résultats, avérés ou non, les plus importants de ces articles.

1 Article de Loudon

Selon [219], la première référence au problème unidimensionnel est de 1928 [220] mais le premier article historiquement reconnu est celui de Loudon [217] en 1959.

Les solutions intégrables, donc du spectre lié, obtenues par Loudon sont des combinaisons paires ou impaires des fonctions φ_n^\pm définies par

$$\varphi_n^\pm(x) = \begin{cases} x\phi_n(x) & \text{si } \pm x > 0 ; \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1a)$$

où ϕ_n est la partie radiale des solutions tridimensionnelles, n étant le numéro des niveaux de Rydberg. À un facteur de normalisation près [8],

$$\phi_n(r) = r e^{-kr} L'_n(2kr) , \quad (1b)$$

où $k = \sqrt{|e|}$ est le vecteur d'onde et L_n le polynôme de Laguerre d'ordre $n \in \mathbb{N}^*$. Ce sont les solutions que j'appelle régulières.

a Propriété des fonctions d'onde

Rappelons quelques résultats sur les solutions propres d'une équation de Schrödinger, pour situer le travail de Loudon dans son contexte.

α Dégénérescence

On peut démontrer, pour un potentiel ordinaire, que les fonctions d'onde à une dimension sont non dégénérées. Notons d'abord qu'il existe toujours une solution divergente quand $x \rightarrow +\infty$ et une autre divergente quand $x \rightarrow -\infty$.

Si (3) est vérifiée, les solutions (convergentes ou divergentes) définies sur \mathbb{R} forment un espace vectoriel de dimension 2. Notons $\varphi_+ \in L^2(\mathbb{R}_+^*)$ une solution non divergente en $+\infty$ et $\varphi_- \in L^2(\mathbb{R}_-^*)$ une solution non divergente en $-\infty$ (je n'ai pas besoin de supposer leur existence, dans le cas contraire, la discussion suivante devient triviale, mais elles sont toujours uniques à un facteur près, d'après la remarque précédente).

De deux choses l'une, soit φ_+ se raccorde exactement avec φ_- : dans ce cas, cette solution engendre l'espace, de dimension 1, des solutions $\in L^2(\mathbb{R})$; soit, il n'y a aucune solution non divergente définie sur tout \mathbb{R} , l'espace des solutions est de dimension 0. Ceci prouve que la solution est non dégénérée.

Cependant, si la barrière est imperméable, comme on vérifiera que c'est le cas du potentiel de Coulomb, (3) n'est pas valable et il est possible de faire des combinaisons arbitraires de φ_+ et φ_- . C'est également ce qu'affirme Loudon.

β Parité

Loudon considère plus particulièrement les solutions réelles paire et impaire φ_+ et φ_- . En effet, l'équation différentielle est réelle et possède des solutions réelles. De plus, la continuité de la densité de probabilité $\rho(x) = |\varphi(x)|^2$ impose, comme on le verra, $|\varphi_+(0^+)| = |\varphi_+(0^-)|$. Dans ces conditions, $\varphi_+(0^+) = \pm\varphi_+(0^-)$ et les solutions sont effectivement paires ou impaires.

b Solution d'énergie infinie

Une innovation majeure de Loudon est l'introduction d'un état d'énergie $-\infty$, qui serait donc l'état fondamental, et qui serait, à la différence des autres, non dégénéré.

On verra que cet état a pour fonction d'onde non normalisée $e^{-|u|}$ en coordonnée $u = kx$ adimensionnée. Cependant, non seulement cet état n'est pas couplé avec le reste des états, mais sa norme est nulle : il est incorrect de le considérer.

Dans un article ultérieur [221], Loudon reprend cette erreur pour l'analyse d'une particule chargée dans un champ magnétique intense. Ce dernier résultat a été repris dans la version originale [211] du livre de Landau et Lifshitz de physique statistique. D'autres auteurs, y compris dans des publications récentes, ont continué à citer cet état d'énergie $-\infty$, bien qu'il ait été dénoncé relativement tôt par Andrews [43] (voir plus loin).

c Potentiel tronqué

Loudon inaugure également une autre voie : le remplacement du potentiel de Coulomb par un potentiel moins divergent. En l'occurrence, il a utilisé

$$V_\epsilon(x) = \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0(|x| + \epsilon)}$$

(avec mes propres notations). L'idée est de faire tendre $\epsilon \rightarrow 0$ pour calculer le spectre de $V = V_0$. Cependant, on n'est pas assuré de la continuité des valeurs propres. En l'occurrence, comme prouvé ensuite par Gesztesy [222], voir plus loin, le spectre discret évolue de façon continue mais certaines valeurs propres disparaissent à la limite.

Dans [8], nous avons choisi un potentiel identique à $V(x)$ pour $|x| \geq \epsilon$ et nul sinon. La démarche est analogue. Tous ces potentiels apportent cependant une autre complication, car ils sont discontinus, cf. plus loin Gordeyev [223]. C'est pourquoi j'ai choisi dans [224] un potentiel tronqué continu

$$V_\epsilon(x) = \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0\sqrt{x^2 + \epsilon^2}}.$$

2 Article de Haines et Roberts

L'article de Haines *et al* [42] n'apporte pas d'innovation majeure à [216]. Il a le mérite d'étudier le spectre lié continu.

a Le spectre lié continu

Il existe un ensemble continu de solutions convergentes dans le spectre lié calculé dans [216]. Plus précisément, si on se restreint à la demi-droite \mathbb{R}_+ , il existe une solution convergente $\phi_{\text{lié}}(k, \cdot)$ de (1) pour **tout** $k = \sqrt{-e}$ et $e < 0$. Avec mes notations,

$$\phi_{\text{lié}}(k, x) = \sqrt{-\lambda} 2 k x e^{-k x} U\left(1 + \frac{\lambda}{2k}, 2, 2k x\right) / \text{norm}\left(\frac{\lambda}{2k}\right) \quad (2a)$$

avec

$$\text{norm}(u) = \frac{(-1)^{1+\lfloor -u \rfloor}}{\Gamma(1+u)} \sqrt{1 - 2u + 2u^2 \psi'(1+u)} \quad (2b)$$

où $\lfloor \cdot \rfloor$ est la partie entière par valeur inférieure, U la fonction hypergéométrique confluyente logarithmique de Kummer, Γ la fonction gamma usuelle ($\Gamma(n+1) = n!$) et ψ la fonction digamma.

Quand $e = \frac{\lambda^2}{4n^2}$ (le spectre de Rydberg), avec $n \in \mathbb{N}^*$, on trouve les solutions régulières φ_n définies avec un polynôme de Laguerre par (1a).

L'existence de ce spectre continu est non seulement contraire au mécanisme usuel de quantification mais, j'y reviendrai plus loin, la relation de fermeture y est difficile à définir.

b Solutions définies sur \mathbb{R}

Haines a imaginé que le spectre physique était effectivement continu. Malgré les difficultés conceptuelles que j'ai mentionnées, son étude était légitime.

Toutefois, pour raccorder les solutions, Haines a choisi comme conditions initiales définissant la solution complète sur \mathbb{R} les deux conditions définies en $+\infty$ et $-\infty$, qui assurent la non divergence des fonctions d'onde.

Chacune de ces deux conditions assure l'existence d'une solution sur les deux demi-droites \mathbb{R}_+ et \mathbb{R}_- mais les deux solutions ainsi définies ne le sont qu'à un facteur près. Or, cette juxtaposition des deux conditions initiales n'assure absolument pas l'existence d'une solution sur \mathbb{R} , qui est très mal définie puisque le raccordement en $x = 0$ n'est pas défini. Cette maladresse ne doit pas masquer l'intérêt qu'il y a à considérer le spectre continu dans son ensemble, sans toutefois s'affranchir des difficultés que cela comporte.

3 Article de Andrews

Andrews apporte deux éléments majeurs. Tout d'abord, il critique les solutions précédentes, que je viens de décrire. Ensuite, il prétend avoir résolu le calcul de la

transmission par la barrière de Coulomb (problème défini sur le spectre libre, que le potentiel soit attractif ou répulsif).

a Critique de Loudon et Haines

Du travail de Loudon, Haines critique l'état fondamental d'énergie $-\infty$. Il donne des arguments assez différents des miens, mais nos conclusions sont identiques.

Du travail de Haines, Andrews critique sévèrement le spectre continu. Notamment, il pointe la non orthonormalité des solutions, qui n'a pas été relevée par Haines. C'est tout le problème de la non symétrie de \mathcal{H} , sur laquelle je reviendrai abondamment.

b Diffusion par une barrière de Coulomb

À l'époque, plusieurs théoriciens considéraient que la barrière était impénétrable aux ondes (à ne pas confondre avec sa perméabilité éventuelle, qui se définit avec des états liés).

Andrews prétend avoir résolu ce problème et conclut que la transmission T est nulle. D'autres auteurs ont ensuite réexaminé ce problème, en annonçant des résultats moins tranchés, cf. [225] que j'examine plus loin.

Par une analyse locale, dont j'expliquerai les faiblesses et avantages, je suis arrivé dans [8] à la même conclusion qu'Andrews. La comparaison entre ma démonstration, qui s'étend sur seize pages, si on inclut les annexes concernées, et la sienne, qui fait moins d'une demi page, ne doit pas masquer une critique qu'on doit au travail d'Andrews : ce dernier s'appuie sur un théorème inapplicable dans le cas du potentiel de Coulomb ; il ne cache pas cet inconvénient, mais affirme qu'il s'étend « facilement », sans aucune démonstration.

Andrews se place dans le contexte des extensions auto-adjointes d'un hamiltonien, que je vais maintenant examiner.

4 Article de Gesztesy

a Extensions auto-adjointes

L'article de Gesztesy ouvre une toute nouvelle voie, qui sera suivie par les mathématiciens, l'analyse en terme des extensions auto-adjointes du potentiel.

α Le potentiel de Coulomb n'est pas symétrique

D'une part, \mathcal{H} n'est pas symétrique [226], c'est à dire qu'il existe des états $|\phi(k_1, \cdot)\rangle$ et $|\phi(k_2, \cdot)\rangle$ tels que

$$\int dx \overline{\phi(k_1, x)} \phi(k_1, x) \equiv \langle \phi(k_1, \cdot) | \phi(k_2, \cdot) \rangle \neq 0 .$$

Je l'ai prouvé dans [8] pour les solutions anormales. Je présente plus loin une démonstration plus astucieuse.

De tels opérateurs sont très peu étudiés par les mathématiciens car aucun résultat général ne permet d'analyser leur spectre.

β Le potentiel de Coulomb n'est pas auto-adjoint

Même si on restreint \mathcal{H} sur un domaine \mathcal{D} où il est symétrique, il n'est pas auto-adjoint. En effet, le domaine \mathcal{D}^* sur lequel \mathcal{H}^* , son dual, est défini, est plus grand que \mathcal{D} .

Dans une telle situation, il convient de chercher les extensions auto-adjointes de l'opérateur. En pratique, cela revient à définir \mathcal{H} sur un domaine plus large $\tilde{\mathcal{D}}$ tel que $\tilde{\mathcal{D}}^* = \tilde{\mathcal{D}}$. On peut penser à l'espace de Schwartz \mathcal{S}' des distributions tempérées, qui est une extension de $L^2(\mathbb{R})$, valable pour de nombreux opérateurs, pour comprendre ce mécanisme d'extension.

γ Condition de Dirichlet

Gesztesy a restreint le domaine des solutions de (1) en utilisant la condition de Dirichlet :

$$\varphi(x) = 0 . \quad (3)$$

Dans ce domaine, \mathcal{H} est symétrique, et Gesztesy a vérifié que les extensions auto-adjointes redonne exactement les états réguliers, aux énergies de Rydberg.

b Étude du potentiel tronqué

Gesztesy a repris le potentiel V_ϵ utilisé par Loudon. Ce qu'il montre est très intéressant : l'énergie du fondamental tend vers $-\infty$ quand $\epsilon \rightarrow 0$ mais cette solution disparaît à la limite quand $\epsilon = 0$. Gesztesy confirme l'invalidité de la solution d'énergie $-\infty$.

5 Article de Gordeyev

Je ne peux pas citer toutes les méthodes imaginées par les mathématiciens pour aborder ce problème. La méthode intégrale développée dans [223] dépasse mes propres compétences. Les auteurs utilisent une représentation intégrale, définie dans le plan complexe, des solutions. Dans ce cadre, ils montrent que seules subsistent les solutions régulières, dont la même représentation intégrale est par ailleurs connue [227].

Bien qu'ils utilisent, comme moi, l'analyse locale des solutions, et aboutissent aux mêmes conclusions, certains aspects de leur travail me semblent critiquables. En gros, leur méthode consiste à chercher un hamiltonien auto-adjoint en ajoutant un terme local δV (une combinaison de distributions localisées δ , δ' , etc.), dont la détermination se substitue à des conditions aux bords spécifiques.

J'ai personnellement essayé de suivre cette voie, mais certaines déterminations restent toujours ambiguës et arbitraires, qui la disqualifient, malgré l'élégance de certaines écritures, pour la recherche d'une extension auto-adjointe de \mathcal{H} . Elle se compare défavorablement au travail de Gesztesy.

a Non exhaustivité

Les auteurs font plusieurs hypothèses, pour des raisons qu'on pourrait qualifier d'esthétiques, c'est à dire qu'elles sont vraisemblables mais non démontrées.

α Continuité de la dérivée

Dans [223], les auteurs affirment que la dérivée des fonctions d'onde est continue en $x = 0$. Or, bien que très élégante, leur démonstration ne résiste pas à un examen approfondi. Ils passent (comme certains auteurs) sans précautions des fonctions ordinaires de $L^2(\mathbb{R})$ à celui des distributions de $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$.

Il est facile de démasquer l'erreur a posteriori. En effet, leur résultat final prouve, comme on le verra plus tard, que la barrière est imperméable, et en particulier qu'on peut multiplier arbitrairement toute fonction d'onde par Θ , la fonction de Heaviside déjà définie à la partie II, ce qui est contradictoire avec la continuité affirmée.

β Continuité de la fonction

Les auteurs choisissent une fonctions auxiliaire $f(x) = |x|$, qui semble adaptée. Il en résulte cependant une indétermination en $x = 0$, qu'ils passent avec le même formalisme avec lequel ils invoquent la continuité. Ils imposent la condition supplémentaire $\text{sign}(0) = 0$. Cela revient tout simplement à considérer que les fonctions d'ondes sont continues en $x = 0$.

b Calculs semi-classiques

Dans [223], les auteurs traitent des précautions et modalités particulières qu'il faut adopter pour traiter la barrière coulombienne de façon semi-classique.

α Approximation WKB

Dans [8], nous avons, parallèlement au calcul exact, poursuivi un calcul utilisant l'approximation WKB. C'est un travail que Y. Avishai, justement spécialiste de cette approximation, a plus particulièrement mené. Pour le problème de la transmission T , le calcul sans précautions donne :

$$T = \frac{1}{\text{ch}^2(2\pi\eta)} \quad (4)$$

où le paramètre $\eta = \lambda/(2k)$ sera défini plus loin. Nous nous sommes aperçu plus tard que cette solution était incorrecte, parce que les conditions d'application de l'approximation WKB sont violées.

Ceci est bien expliqué dans [8] mais nous aurions eu un grand bénéfice à lire plus tôt l'article de Gordeyev.

β Approximation supplémentaire

Gordeyev montre une relation supplémentaire

$$\int_X^{x_m} p dx \approx -2\sqrt{2me^2x} + \frac{1}{2} \int_{-x_m}^{x_m} p dx$$

qui permet d'utiliser l'approximation WKB et de retrouver les résultats standard. Il faudrait toutefois poursuivre ces calculs, qui ne sont fait que pour le spectre lié. Ce serait une très bonne confirmation du résultat $T = 0$. C'est aussi la raison pour laquelle j'ai distingué ce travail parmi tous ceux qui ont été proposés.

c Potentiel tronqué

Gordeyev *et al* reviennent sur le choix du potentiel tronqué. Comme je l'ai déjà fait remarqué, ils dénoncent le choix de Loudon (ainsi que d'autres) comme pouvant conduire à des anomalies¹ en $x = 0$ à cause de la discontinuité de $|x|$.

6 Article de Mineev

Le travail de Mineev [225] m'a beaucoup inspiré, quoiqu'il ne soit pas réellement connu. L'auteur se préoccupe de trouver une extension auto-adjointe de \mathcal{H} , mais suit la voie de Gordeyev et non celle de Gesztesy. Il utilise une analyse locale fondée notamment sur les comportements à l'origine et à l'infini des solutions. Il a malencontreusement commis une erreur sur leur comportement en $-\infty$, en présupposant qu'il était symétrique² du comportement en $+\infty$.

Comme dans [223], il trouve plusieurs extensions correspondant à différents termes δV . Pour l'une d'entre elles, il trouve³ l'expression (4) de T .

7 Article de Oliveira et Verri

Deux articles [219,226] reprennent et complètent l'analyse de Gesztesy. Je citerai le plus ancien ultérieurement, et m'attache ici à l'article de Oliveira *et al*.

a Extensions auto-adjointes

Les extensions auto-adjointes peuvent être classées par un paramètre, qui définit souvent un groupe, par exemple $SU(1)$, $SU(2)$, etc.

Ces extensions correspondent à des conditions aux bords supplémentaires, qui doivent être choisies afin de rendre l'opérateur auto-adjoint. Ces conditions peuvent avoir leur reflet dans le monde physique et ces recherches un sens physique profond.

α Wronskien

On notera, en mêlant et détournant les notations de [226] et [219],

$$W(\varphi_1, \varphi_2) = \varphi_1(0^+) \overline{\varphi_2'(0^+)} - \varphi_1'(0^+) \overline{\varphi_2(0^+)} - \varphi_1(0^-) \overline{\varphi_2'(0^-)} + \varphi_1'(0^-) \overline{\varphi_2(0^-)} .$$

Comme il a été déjà établi [8,219], ainsi qu'on le montrera plus loin, on a, pour les états du spectre lié,

$$\overline{\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle} - \langle \varphi_2 | \varphi_1 \rangle = W(\varphi_1, \varphi_2) . \quad (5)$$

Bien entendu, il faut modifier l'expression de W pour le cas tridimensionnel.

1. Ils utilisent intensivement le langage des distributions, selon lequel des contributions supplémentaires interviennent quand on dérive le potentiel V_ϵ .

2. Le rapport d'échelle est inversé entre les comportements en $x = 0$ et ceux à l'infini, c'est à dire que $\varphi(0^+)/\varphi(0^-) = \varphi(-\infty)/\varphi(+\infty)$ alors que Mineev a écrit qu'il était identique [8].

3. J'ai mis longtemps à découvrir l'erreur, qui découle du mauvais comportement à l'infini. Il se trouve que j'ai commis la même erreur sur ce comportement et qu'Avishai avait trouvé la même expression par l'approximation WKB.

β Symétrie

Dans [8], il est démontré que $W(\varphi_1, \varphi_2) \neq 0$ pour φ_1 et φ_2 des solutions anormales. Ce résultat est aussi implicitement dans [226], sans démonstration toutefois.

Les mathématiciens imposent donc la condition restrictive $W(\varphi_1, \varphi_2) = 0$, ce qui restreint le domaine \mathcal{D} sur lequel définir \mathcal{H} . On notera $\mathcal{H}_{\mathcal{D}}$ la restriction de \mathcal{H} sur ce domaine. $\mathcal{H}_{\mathcal{D}}$ est donc symétrique.

Pour le problème de Coulomb, Oliveira *et al* définissent préalablement \mathcal{H} dans $\mathcal{E} = L^2(\mathbb{R}_+^*) \cup L^2(\mathbb{R}_-^*) = L^2(\mathbb{R}^*)$. Le domaine \mathcal{D} est le sous-ensemble de \mathcal{E} où $W(\varphi, \phi) = 0 \forall \varphi, \phi \in \mathcal{D}$.

γ Extension auto-adjointe

Il existe toujours des extensions auto-adjointes d'un opérateur symétrique. Il est possible de les déterminer exhaustivement. Plutôt que la théorie de Von Neuman, difficile à appliquer, est apparue une méthode développée par Bruck [228] et Kochubei [229], qui permet facilement leur classification. C'est cette dernière qui est utilisée dans [219]. Les extensions auto-adjointes sont définies par la condition de continuité :

$$(I - U) \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}(0^+) \\ \tilde{\varphi}(0^-) \end{pmatrix} = -i(I + U) \begin{pmatrix} \varphi(0^+) \\ \varphi(0^-) \end{pmatrix}, \quad (6)$$

où

$$\tilde{\varphi}(0^\pm) = \lim_{u \rightarrow 0^\pm} \left(\varphi' \left(\frac{u}{2\eta} \right) \pm 2\eta \varphi \left(\frac{u}{2\eta} \right) \ln u \right)$$

est la régularisation au sens de Hadamard de la dérivée⁴ et U est un opérateur unitaire.

On pourrait en déduire que les extensions auto-adjointes sont classées par l'ensemble des opérateurs U possibles, soit $SU(2)$. Cependant, Gordeyev [223] affirme qu'il est faux de croire que la paramétrisation des extensions se fait dans $SU(2)$. On peut également citer [226], où les auteurs utilisent exactement la même méthode que dans [219] mais ne conservent que les solutions régulières.

b Cas tridimensionnel

Une autre particularité de [219] est l'étude des cas bi- et tridimensionnel. Je reviendrai plus loin sur ce dernier, sur lequel j'ai justement prouvé, d'une façon me semble-t-il plus convaincante que les arguments usuels, la validité des solutions standard.

Les auteurs montrent un résultat passionnant : d'une part, le potentiel de Coulomb ne pose, à trois dimensions, aucune difficulté de résolution globale (en d'autres termes, il est symétrique), mais d'autre part, l'étude des solutions définies sur $L^2(\mathbb{R}^{3*})$ conduit aux mêmes complications qu'à une dimension.

4. Cette détermination du terme divergent en logarithme est un des points forts de [219].

C Solution du problème de Coulomb 1d

Je vais présenter mes propres travaux, que j'ai entièrement réordonné par thème, sans respecter leur chronologie. En particulier, le statut des états anormaux, tel qu'expliqué dans [8] a été entièrement modifié.

1 Équation aux valeurs propres

a Équations adimensionnées

L'équation (1) peut s'écrire avec la variable adimensionnée $u = kx$. On définit, comme dans [8], $\eta = \lambda/(2k)$, qui est négatif si le potentiel est attractif. Dans ce cas, η décrit \mathbb{R}_- pour le spectre libre et s'identifie à $-n$ pour les états quantifiés de Rydberg. Quand $e > 0$, on obtient l'équation des états libres

$$-\frac{d^2\varphi}{du^2}(u) + 2\frac{\eta}{|u|}\varphi(u) = \varphi(u), \quad u \in \mathbb{R}^*; \quad (1)$$

quand $e < 0$, si $\lambda > 0$ (potentiel répulsif), il n'y a pas d'états liés; par contre, si $\lambda < 0$ (potentiel attractif), on obtient l'équation des états liés

$$-\frac{d^2\varphi}{du^2}(u) + 2\frac{\eta}{|u|}\varphi(u) = -\varphi(u), \quad u \in \mathbb{R}^*. \quad (2)$$

b Divergence du potentiel de Coulomb

À trois dimensions, $V(r)$ diverge quand $r \rightarrow 0$ mais $\int_{\mathbb{R}^3} V(r)r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi$ converge. Si on considère les solutions les plus divergentes à l'origine, leur partie radiale se comporte comme

$$\phi(r) \sim \frac{1}{r}$$

de sorte que $\int_{\mathbb{R}^3} |\phi(r)|^2 V(r)r^2 dr \sin\theta d\theta d\varphi$ diverge.

À une dimension, au contraire $\int_{\mathbb{R}} V(x)dx$ diverge. D'après (2), $\varphi(x)$ a une limite finie et $\int_{\mathbb{R}} |\varphi(x)|^2 V(x)dx$ diverge (sauf quand $\varphi(0) = 0$).

c Solutions libres

Il est plus commode d'introduire les solutions analytique sur \mathbb{R}_+^* .

α Solutions libres sur \mathbb{R}_+^*

Les solutions de (1) ont été calculées par Yost *et al* [8, 216]. Si on réduit l'ensemble de départ à \mathbb{R}_+ , on trouve les fonctions d'onde F_η dites de Coulomb et les solutions singulières G_η :

$$\begin{aligned} F_\eta(u) &= C_\eta u e^{-iu} M(1 - i\eta, 2, 2iu) ; \\ G_\eta(u) &= \Re \left(2\eta \frac{u e^{-iu} \Gamma(-i\eta)}{C_\eta} U(1 - i\eta, 2, 2iu) \right) \\ &= 2\eta \frac{u e^{-iu} \Gamma(-i\eta)}{C_\eta} U(1 - i\eta, 2, 2iu) - i(-1 + \pi\eta + 2\iota_\eta) F_\eta(u) / C_\eta^2 , \end{aligned}$$

avec M la fonction hypergéométrique confluyente régulière de Kummer,

$$C_\eta = e^{-\frac{\pi\eta}{2}} \sqrt{\frac{\pi\eta}{\sinh(\pi\eta)}} \quad \text{et} \quad \iota_\eta = \eta \Im(\Gamma(1 - i\eta)) .$$

Les énergies e associées s'écrivent $e = \frac{\lambda^2}{4\eta^2}$. Le spectre est continu et vaut $[0, \infty[$.

β Solutions libres sur \mathbb{R}_-^*

Les solutions sur \mathbb{R}_-^* sont¹ $F_{-\eta}$ et $G_{-\eta}$.

L'équation (1) étant invariante par transposition $u \rightarrow -u$, \check{F}_η et \check{G}_η sont également solutions sur \mathbb{R}_-^* . Il existe donc deux combinaisons linéaires telles que

$$\begin{aligned} F_\eta(-u) &= \alpha F_{-\eta}(u) + \beta G_{-\eta}(u) ; \\ \text{et} \quad G_\eta(-u) &= c F_{-\eta}(u) + d G_{-\eta}(u) . \end{aligned}$$

Dans [8], j'ai choisi la base formée par les fonctions $F_{-\eta}$ et $G_{-\eta}$, comme dans [225]. Le spectre est identique à celui des fonctions définies sur \mathbb{R}_+^* .

γ Solutions libres sur \mathbb{R}

Il suffit de recoller les solutions sur \mathbb{R}_+^* et \mathbb{R}_-^* pour trouver les solutions sur \mathbb{R}^* . Comme dans [8], on peut écrire, en toute généralité

$$\varphi(u, \eta) = \begin{cases} AF_\eta(u) + BG_\eta(u) & \text{pour } u > 0 ; \\ aF_{-\eta}(u) + bG_{-\eta}(u) & \text{pour } u < 0 . \end{cases} \quad (3)$$

où on ne se préoccupe pas, pour l'instant, de la norme des états, car cela nécessite d'examiner leur orthonormalisation au sens large, qui sera étudiée plus loin. Le spectre est continu et vaut $[0, \infty[$.

δ Divergences

On peut distinguer les solutions selon leur comportement, ce qui justifie le choix de la base choisie par Yost [216].

1. Il y a toutefois une petite subtilité : $G_{-\eta}$ n'est pas réelle, il faut ajouter un terme proportionnel à $F_{-\eta}$ pour supprimer sa partie imaginaire. L'équation différentielle (1) étant réelle et admettant des solutions réelles, il est important d'un point de vue théorique de trouver ces solutions mais, en pratique, cette partie imaginaire n'est pas gênante, et nous l'oublierons par la suite. On trouvera les calculs précis dans [8].

Aucune fonction ne diverge en $x = 0$, elles sont toutes bornées, avec un comportement oscillatoire en $\pm\infty$ non pas en e^{ikx} mais $e^{i(kx+\kappa\ln(kx))}$.

Par contre, les fonctions G'_η divergent en $x = 0$ (tangente verticale) contrairement aux fonctions F'_η . On peut noter un certain parallélisme avec le spectre lié, qui est étudié ci-après.

d Solutions liées

On va, de nouveau, introduire les solutions analytique sur \mathbb{R}_+^* .

α Solutions liées sur \mathbb{R}_+^*

La normalisation des états liés $\in L^2(\mathbb{R}_+^*)$ ne pose pas de difficulté spécifique ; c'est l'occasion de préciser qu'il faut normaliser les fonctions d'onde exprimées avec des variables dimensionnées (et non adimensionnées). Si φ est une solution de (2), on pose $\phi_{\text{lié}}(k, x) \propto \varphi(\frac{2\lambda x}{2\eta})$, où $\frac{2\lambda x}{2\eta} = u$ est la variable adimensionnée. Les solutions liées sont données par (2a), avec la bonne normalisation (2b). Elles forment un spectre continu qui vaut $] -\infty, 0[$.

Dans [8], il apparaît un parallélisme entre le spectre libre et le spectre discret, puisque les fonctions régulières sont reliées à la fonction hypergéométrique M régulière selon une formule similaire à (2a), tandis que les fonctions anormales sont reliées à la fonction hypergéométrique logarithmique U . Pourtant, (2a) est correcte, car, pour les valeurs de $\eta = -n$, avec $n \in \mathbb{N}^*$, les solutions correspondantes sont égales (à une normalisation éventuelle et un signe près) et redonnent toutes les solutions régulières de Rydberg φ_n de (1a) s'exprimant avec les polynômes de Laguerre.²

β Solutions liées sur \mathbb{R}

Contrairement aux solutions libres, on choisit comme solution sur \mathbb{R}_+^* les transposées $\check{\varphi}$ des solutions définies sur \mathbb{R}_+^* et on raccorde les solutions définies sur ces deux demi-droites de façon analogue à (3) pour définir une solution sur \mathbb{R} . Cette dernière peut éventuellement ne pas être continue en $x = 0$. Ce choix est fait par simplicité et n'aura aucune conséquence.

γ Divergences

Je ne m'intéresse ici qu'aux solutions non divergentes en $-\infty$ et ∞ . Ces solutions non divergentes à l'infini convergent toutes quand $x \rightarrow \pm\infty$ comme $e^{-|kx|}$.

Elles sont toutes bornées, aucune ne diverge en $x = 0$. Par contre, toutes les dérivées $\varphi'(x, k)$ divergent quand $x \rightarrow 0$ sauf pour les valeurs $k = \lambda/(2n)$ avec $n \in \mathbb{N}^*$ qui correspondent aux solutions régulières de Rydberga

2. Mathématiquement, pour les autres valeurs de η , les solutions J_η et K_η de [8] sont différentes mais ne convergent pas partout. On remarque que la base indiquée dans [8] n'est pas tout à fait complète puisque, pour ces valeurs remarquables $\eta = -n$, les deux fonctions semblent dégénérées. Il y a plusieurs façons de retrouver la fonction divergente manquante. D'une part, la fonction générée par U n'est convergente que pour $u > 0$, autrement dit, la solution $K_{-\eta}(-u)$, écrite selon les notations de [8], convient. On peut également l'écrire en fonction de Ei (fonction exponentielle intégrale), de la fonction de Meijer G , etc.

2 Impénétrabilité

Il s'agit ici d'étudier la transmission par la barrière de Coulomb. Les résultats sont identiques, que l'on choisisse un potentiel attractif ou répulsif, mais le premier cas correspond à une réflexion quantique, ainsi appelée parce que classiquement cette barrière serait invisible, tandis qu'elle réfléchit totalement les ondes, comme on va l'étudier.

a Matrice de diffusion

Quand une onde progresse depuis $-\infty$, une partie est réfléchiée par la barrière et une partie transmise. De même pour une onde qui vient de $+\infty$. On peut décrire les propriétés de réflexion et de transmission, soit à partir d'une matrice de transfert \mathcal{T} , soit à partir d'une matrice de diffusion S [9]. On calcule \mathcal{T} en écrivant :

$$\begin{pmatrix} B - \mathrm{i}A \\ B + \mathrm{i}A \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} b e^{-\pi\eta} - \mathrm{i}a e^{\pi\eta} \\ b e^{-\pi\eta} + \mathrm{i}a e^{\pi\eta} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

où les coefficients A , B , a et b sont ceux définis dans (3). On peut relier \mathcal{T} à la matrice S , définie par

$$S = \begin{pmatrix} r_{\mathrm{R}} & t_{\mathrm{R}} \\ t_{\mathrm{L}} & r_{\mathrm{L}} \end{pmatrix}$$

où les indices font références à l'origine des ondes (par exemple r_{R} est le coefficient de réflexion de l'onde provenant de $+\infty$). Dans [8], je démontre une expression exacte de S uniquement en fonction du coefficient de transmission $T = |t_{\mathrm{R}}|^2 = |t_{\mathrm{L}}|^2$ et de deux signes arbitraires (liés aux symétries des solutions) :

$$S = \begin{pmatrix} T - 1 + \mathrm{i}\epsilon\epsilon'\sqrt{T - T^2} & \epsilon'T + \mathrm{i}\epsilon\sqrt{T - T^2} \\ \epsilon'T + \mathrm{i}\epsilon\sqrt{T - T^2} & T - 1 + \mathrm{i}\epsilon\epsilon'\sqrt{T - T^2} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

L'équation (3) indique que les solutions de l'équation de Schrödinger sont des combinaisons des fonctions F_{η} et G_{η} . Il se trouve que la transmission T est liée à cette décomposition : on va vérifier que seules les fonctions F_{η} interviennent, ce qui correspond à $T = 0$. La relation entre la valeur de T et la décomposition des ondes se propageant dans la barrière de Coulomb suit bien l'intuition, puisque les fonctions F_{η} s'annulent en $x = 0$, contrairement aux fonctions G_{η} .

Cette correspondance donne de façon préalable plusieurs interprétations du résultat $T = 0$, parce que ce sont justement les fonctions G_{η} qui induisent une violation de l'orthonormalité (au sens large) et une brisure du caractère hermitien de \mathcal{H} . On notera par la suite $\mathcal{H}_{\mathrm{lib}}$ le hamiltonien restreint à l'espace des états libres.

b Relations de continuité

On utilise les lois de conservation physique, en particulier la continuité de certaines quantités physiques, pour déduire des relations de passage en $x = 0$, qu'on appelle souvent, de façon abusive, relations de continuité.

α Continuité de la probabilité

La continuité en $x = 0$ de la densité de probabilité $\rho_\eta(u) = |\varphi(u, \eta)|^2$, où φ est donnée par (3), s'écrit [8]

$$B = \epsilon' e^{-\pi\eta b} \quad (6)$$

avec $\epsilon' = \pm 1$.

β Conservation du courant de probabilité

La conservation du courant $j(x) = -\Re\left(\overline{i\phi(x)}\frac{d\phi}{dx}(x)\right)$ est équivalente à l'unitarité de la matrice S , qui a déjà été prise en compte dans l'expression (5).

En fin de compte, ces deux lois physiques ne permettent pas de calculer les relations de passage et donc T . On va utiliser des relations plus fortes.

c Orthonormalisation au sens large

On va d'abord s'attacher à l'orthonormalisation au sens large des états libres.

α Principe d'orthonormalisation

On vérifiera, en fin de compte, l'équivalence entre orthonormalisation des états propres et hermiticité (plutôt appelée symétrie en mathématiques) de \mathcal{H}_{lib} .

Comme je l'explique dans [8], l'orthonormalité des états libres est nécessaire d'un point de vue physique. En effet, si un état d'énergie $e > 0$ donnée créé par une onde venant de l'infini n'est pas orthogonal à des états d'énergie, mettons, $e' < e$ et $e' > 0$, la probabilité que le système réfléchisse ou transmette une onde d'énergie e' n'est pas strictement nulle. Ceci est incompatible avec la conservation de l'énergie totale de l'univers.

Pour être complet, ce raisonnement doit être tenu avec des paquets d'onde, car une onde n'est jamais strictement monochromatique; cela ne change pas ses conclusions, d'où

$$\int_0^\infty \phi(k_1, x)\phi(k_2, x)dx = \delta(k_1 - k_2) . \quad (7)$$

β Condition d'orthonormalisation

On peut calculer le produit scalaire entre deux états libres en suivant les formules de [8]; l'expression (19) de [8] prouve que, soit $T(\eta)$ est une fonction constante, soit $T \in \{0, 1\}$. Ce second cas est un cas particulier du premier, car on ne peut raisonnablement admettre que $T(\eta)$ soit une fonction non mesurable, aussi $T(\eta)$ doit être constante au moins par morceaux.

Il n'est pas possible d'obtenir plus d'information sur la valeur de T si on se contente du comportement à l'infini. Par contre, si on est capable de mieux maîtriser un petit terme constant, qui provient d'une contribution mineure, on peut en déduire $T = 0$. On va pour cela recalculer le produit scalaire par une méthode alternative.

γ **Calcul du produit scalaire**

Soient deux fonctions d'onde définies sur \mathbb{R}_+^* , $|\phi_{\text{lib}+}(k_1, \cdot)\rangle$ et $|\phi_{\text{lib}+}(k_2, \cdot)\rangle$, où on pose³ $\phi_{\text{lib}}(k, x) = \varphi(kx, \frac{\lambda}{k})$ selon (3), on a :

$$\int_0^\infty dx \phi_{\text{lib}}(k_1, x) \frac{\partial^2 \phi_{\text{lib}}}{\partial x^2}(k_2, x) - \phi_{\text{lib}}(k_2, x) \frac{\partial^2 \phi_{\text{lib}}}{\partial x^2}(k_1, x) = \left[\phi_{\text{lib}}(k_1, x) \frac{\partial \phi_{\text{lib}}}{\partial x}(k_2, x) - \phi_{\text{lib}}(k_2, x) \frac{\partial \phi_{\text{lib}}}{\partial x}(k_1, x) \right]_{0^+}^\infty$$

on substitue deux fois (1), d'où

$$= (k_2^2 - k_1^2) \int_0^\infty dx \phi_{\text{lib}}(k_1, x) \phi_{\text{lib}}(k_2, x). \quad (8)$$

La contribution en $x = 0$ du crochet est finie. Celle à l'infini peut être calculée en remplaçant ϕ par son équivalent asymptotique (calculé dans [230] ou Eqs. (9a) et (9b) de [8]), et donne dans le produit scalaire, pour une onde venant de $+\infty$,

$$A_R \frac{\sin((k_1 - k_2)x)}{k_1 - k_2} + A_R \frac{\sin((k_1 + k_2)x)}{k_1 + k_2} + B_R \frac{\cos((k_1 - k_2)x)}{k_1 - k_2} + B_R \frac{\cos((k_1 + k_2)x)}{k_1 + k_2}$$

ce qui donne $\frac{1}{2}\delta(k_1 - k_2) + \frac{1}{2}(\epsilon\epsilon'\sqrt{T(1-T)} + 1 - T)\delta(k_1 + k_2)$ en utilisant la différentielle correcte dk/π dans l'intégrale et les Eqs. (42) de [8]. Le même calcul pour une onde venant de $-\infty$ donne

$$A_L \frac{\sin((k_1 - k_2)x)}{k_1 - k_2} + A_L \frac{\sin((k_1 + k_2)x)}{k_1 + k_2} + B_L \frac{\cos((k_1 - k_2)x)}{k_1 - k_2} + B_L \frac{\cos((k_1 + k_2)x)}{k_1 + k_2}$$

qui s'écrit finalement $\frac{1}{2}(\epsilon\sqrt{T(1-T)} + \epsilon'T)\delta(k_1 + k_2)$ (le terme en $\delta(k_1 - k_2)$ s'élimine). Enfin, le calcul complet inclurait une combinaison des deux précédents. Dans ce cas, on se retrouve dans le cas traité dans [8], qui a été résolu en utilisant un logiciel de calcul formel (Mathematica).

On pourrait naïvement conclure que l'onde venant de $-\infty$ ne s'est pas transmise, puisque l'orthonormalisation au sens large ne donne pas $\delta(k_1 - k_2)$ mais $\delta(k_1 + k_2)$. Cependant, il y a une dégénérescence $k \leftrightarrow -k$ dans la représentation des états, et ces deux fonctions de Dirac sont équivalentes. De plus, on peut vérifier que le poids total attribué à cette onde φ_L dans \mathbb{R}_+^* est exactement

$$\sqrt{T - T^2 + T^2} = \sqrt{T} = |t|$$

comme il se doit.

Ainsi, bien qu'elle soit dominante, la contribution à l'infini du crochet ne permet-elle pas de conclure. Par contre, la contribution du terme en $x = 0$ se révèle plus fructueuse. En effet, cette contribution est nulle pour les fonctions F_η tandis qu'elle vaut, pour les fonctions G_η ,

$$\log\left(\frac{k_1}{k_2}\right) + \Re(H_{-i\frac{\lambda}{2k_1}} - H_{-i\frac{\lambda}{2k_2}})$$

3. Cf. [8] avec des notations différentes. J'ai préféré ici distinguer explicitement état libre et état lié, tandis que dans [8], j'utilise E comme paramètre afin d'avoir une notation unifiée sur l'ensemble du spectre.

où H_n désigne la fonction harmonique d'ordre n . On peut noter que cette quantité $\approx i(k_2 - k_1)/\lambda$ quand k_1 et $k_2 \ll \lambda$. Elle est strictement non nulle pour $k_1 \neq k_2$ et viole donc l'orthonormalisation au sens large, qui a été calculée de façon exacte !

Il faut donc restreindre les états aux seules solutions F_η , ce qui implique que la transmission vaut $T = 0$. Notons que, dans ce cas, l'expression de Yost donne directement des états correctement normalisés au sens large.

d Hermiticité

Je montrerai plus loin qu'on peut généraliser la relation de fermeture dans certains cas. Les mathématiciens ne considèrent que le cas où un hamiltonien est auto-adjoint, parce que, dans ce cas précis le théorème spectral [231] assure que la relation de fermeture est bien vérifiée.

Si on travaille dans l'espace de Hilbert des fonctions $L_2(\mathbb{R})$, alors l'unitarité de l'opérateur d'évolution $e^{-i\mathcal{H}t}$, qui est lié à l'invariance des lois physiques dans le temps, implique que \mathcal{H}_{lib} soit symétrique. Toutefois, l'ensemble des états propres n'est pas défini dans cet espace, et certains auteurs considèrent que l'hermiticité de \mathcal{H} n'est pas obligatoire. Cependant, on ne sait pas généraliser la relation de fermeture pour un spectre continu non orthogonal, et on ne sait donc rien prouver en dehors de cette hypothèse.

Heureusement, \mathcal{H}_{lib} est symétrique si et seulement si $T = 0$, ce qui recouvre exactement les conclusions obtenues quand on impose l'orthonormalisation au sens large. Or, cette dernière contrainte est nécessaire physiquement, ce qui rend, a posteriori, l'hypothèse de l'hermiticité également nécessaire.

La condition de symétrie s'écrit, $\forall k_1, k_2 \in \mathbb{R}_+$,

$$\overline{\langle \phi_{\text{lib}}(k_1, \cdot) | \phi_{\text{lib}}(k_2, \cdot) \rangle} = \langle \phi_{\text{lib}}(k_2, \cdot) | \phi_{\text{lib}}(k_1, \cdot) \rangle .$$

Elle correspond exactement à l'annulation du premier terme dans (8). La comparaison est très instructive. On retrouve directement l'orthogonalité entre états, en écrivant que le dernier terme, qui contient le produit scalaire, est nul, mais pas l'orthonormalisation au sens large car il n'y a plus de fonction de (k_1, k_2) au numérateur qui pourrait compenser le facteur $k_1^2 - k_2^2$.

Mais c'est l'annulation stricte du second terme (le crochet), qui permet de distinguer une combinaison de fonctions indépendantes et de conclure, comme dans [8] que $T = 0$. Je ne reprends pas les calculs de l'article, sauf à préciser qu'il y a deux coquilles, car il faut considérer les fonctions

$$h_1(\eta_1, \eta_2) = \frac{C_{\eta_1}}{\eta_1 C_{\eta_2}} \quad \text{et} \quad h_2(\eta_1, \eta_2) = \frac{C_{\eta_2}}{\eta_2 C_{\eta_1}}$$

qui sont bien indépendantes entre elles et avec h_3 .

En conclusion, les seules solutions valides du spectre libre sont les F_η et donnent une transmission $T = 0$.

3 Imperméabilité

Il s'agit d'établir un résultat équivalent pour le spectre lié : seules sont valables les solutions qui s'annulent en $x = 0$, de sorte que la condition de Dirichlet, choisie par divers auteurs quoique non justifiée, est valide. On appelle cette propriété l'imperméabilité de la barrière.

C'est l'objet de [224]. La démarche est parallèle à celle suivie pour démontrer l'impénétrabilité de la barrière, mais ce parallélisme n'est qu'apparent et les différences profondes.

a Continuité de la probabilité

On n'impose aucune restriction sur les propriétés du hamiltonien ; s'il n'est pas symétrique, le théorème spectral [231] ne s'applique pas, et les calculs suivants sont définis dans un espace général.

On applique la continuité de la probabilité à l'état $|\phi_{\alpha\beta}\rangle$ défini par, $\forall x > 0$,

$$\phi_{\alpha\beta}(x) \equiv \alpha e^{-\frac{e_1 \hbar t}{2m}} \phi_{\text{lié}}(k_1, x) + \beta e^{i\theta} e^{-\frac{e_2 \hbar t}{2m}} \phi_{\text{lié}}(k_2, x) , \quad (9)$$

qui est une combinaison linéaire la plus générale possible de solutions d'énergies $e_1 < 0$ et $e_2 < 0$ définies sur \mathbb{R}_+^* . Sur \mathbb{R}_+^* , $\phi_{\alpha\beta}$ est définie avec la prescription suivante : les fonctions $\phi_{\text{lié}}(k, x)$ sont prolongées sur \mathbb{R} de façon que $|\phi_{\text{lié}}(k, \cdot)\rangle$ soit une solution valable sur \mathbb{R} et $\phi_{\alpha\beta}$ est la même combinaison de ces fonctions. Par linéarité de (1), $|\phi_{\alpha\beta}\rangle$ est une solution définie sur \mathbb{R} . La probabilité quantique associée à $|\phi_{\alpha\beta}\rangle$ est

$$\rho(x) = \alpha^2 |\phi_{\text{lié}}(k_1, x)|^2 + \beta^2 |\phi_{\text{lié}}(k_2, x)|^2 + 2\alpha\beta \phi_{\text{lié}}(k_1, x) \phi_{\text{lié}}(k_2, x) \cos \left(\frac{(e_1 - e_2)\hbar t}{2m} + \theta \right) .$$

ρ doit être continue pour tout α, β, θ , ce qui implique que $|\phi_{\text{lié}}(k_1, x)|^2$, $|\phi_{\text{lié}}(k_2, x)|^2$ et $\phi_{\text{lié}}(k_1, x)\phi_{\text{lié}}(k_2, x)$ sont continues. En conséquence, soit toutes les fonctions $x \mapsto \phi_{\text{lié}}(k, x)$ sont continues, soit toutes changent de signe en $x = 0$.

b Conservation du courant

Le courant associé à l'état $|\phi_{\alpha\beta}\rangle$ défini en (9) s'écrit :

$$j(x) = \frac{\hbar}{m} \alpha\beta \sin \left(\frac{(e_1 - e_2)\hbar t}{2m} + \theta \right) \left(\phi_{\text{lié}}(k_1, x) \frac{\partial \phi_{\text{lié}}}{\partial x}(k_2, x) - \phi_{\text{lié}}(k_2, x) \frac{\partial \phi_{\text{lié}}}{\partial x}(k_1, x) \right)$$

et doit satisfaire à l'équation de conservation de la probabilité

$$\frac{\partial j}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 . \quad (10)$$

Cette équation devient

$$\left(\phi_{\text{lié}}(k_1, x) \frac{\partial^2 \phi_{\text{lié}}}{\partial x^2}(k_2, x) - \phi_{\text{lié}}(k_2, x) \frac{\partial^2 \phi_{\text{lié}}}{\partial x^2}(k_1, x) \right) + (e_j - e_i) \phi_{\text{lié}}(k_1, x) \phi_{\text{lié}}(k_2, x) = 0$$

et est toujours vérifiée (il suffit de substituer (1) deux fois pour le montrer.)

On doit traiter à part la détermination de $\partial j / \partial x(x)$ en $x = 0$. On a

$$\frac{\partial j}{\partial x}(0) = \lim_{\substack{\epsilon_1 \rightarrow 0^+ \\ \epsilon_2 \rightarrow 0^+}} \frac{j(\epsilon_2) - j(-\epsilon_1)}{\epsilon_2 + \epsilon_1}.$$

Considérons uniquement le cas où j est impaire, de sorte que $j(-\epsilon_1) = -j(\epsilon_1)$. Dans ce cas, la précédente limite existe si et seulement si $j(x)/x$ est continue en $x = 0$, d'où

$$\frac{j(\epsilon_1)}{\epsilon_1} = \frac{j(\epsilon_2)}{\epsilon_2} = \frac{j(\epsilon_2) + j(\epsilon_1)}{\epsilon_2 + \epsilon_1};$$

dans ce cas, les calculs fait dans \mathbb{R}_+^* ou \mathbb{R}_-^* donnent le même résultat et (10) est vérifiée sur tout \mathbb{R} .

On va voir qu'on se ramènera toujours à ce seul cas, grâce à un argument de parité.

c Parité

L'équation (1) est invariante par parité. Cela signifie que $\widetilde{\phi_{\alpha\beta}}$ est également solution. Mais, comme expliqué plus tôt, l'espace des solutions convergente, quand on réduit l'analyse sur \mathbb{R}_+^* ou \mathbb{R}_-^* , autrement dit sur $L^2(\mathbb{R}_+^*)$ ou $L^2(\mathbb{R}_-^*)$, est de dimension 1. Ceci implique que, sur \mathbb{R}^* , $\phi_{\alpha\beta} \propto \widetilde{\phi_{\alpha\beta}}$, ce qui s'écrit encore $\forall x < 0$, $\phi_{\alpha\beta}(x) = c \phi_{\alpha\beta}(-x)$, où le second terme s'exprime en fonction de $\phi_{\text{lié}}(k, x)$ selon (2a).

D'après le résultat trouvé ci-dessus après (9) en appliquant la continuité de la densité de probabilité, on trouve

$$|c| = 1 \iff c = \pm 1.$$

Deux cas doivent être discutés.

α Cas d'une solution ne s'annulant pas en $x = 0$

Dans ce cas, la discussion est assez facile. Si $c = 1$, $\phi_{\alpha\beta}$ est paire et, en conséquence, j est impaire. Alors la conservation du courant est vérifiée sur \mathbb{R} .

Si $c = -1$, $\phi_{\alpha\beta}$ est impaire et, en conséquence, j est encore impaire avec la même conclusion.

On peut explicitement calculer les limites $j(0^+)$ et $j(0^-)$:

$$\begin{aligned} j(0^+) &= \frac{\hbar\lambda^2}{m} \left(\frac{k - l + \log(k/l) + \psi(1 + \lambda/(2l)) - \psi(1 + \lambda/(2k))}{\Gamma(1 + \lambda/(2k))\Gamma(1 + \lambda/(2l))} \right) \\ &= (k^2 - l^2) \langle \varphi(k, \cdot) | \varphi(l, \cdot) \rangle. \end{aligned}$$

et $j(0^-) = -j(0^+)$. On notera $j_0 \equiv j(0^+)$. Le courant est discontinu, comme on le constate sur la figure suivante. Ce cas est physiquement exclu. On peut remarquer figure 1 que l'inversion du courant d'une particule qui traverserait la barrière correspondrait à un rebond et serait contradictoire avec le fait que la particule ait traversé.

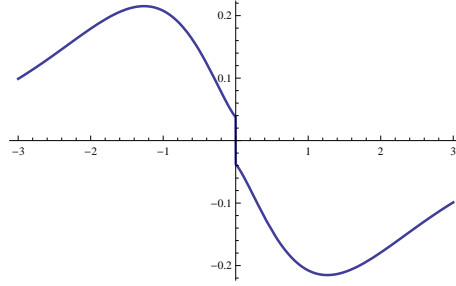


FIGURE 1 – Courant de probabilité j exprimé avec des variables adimensionnées, pour $k = -\lambda$ and $l = -\lambda/3$.

β Cas d'une solution s'annulant en $x = 0$

Dans ce cas, $c = \pm 1$ reste indéterminé. Il n'est pas possible de déduire de $\phi_{\alpha\beta}(0) = 0$ que les solutions $|\phi_{\text{lié}}(k, \cdot)\rangle$ vérifient elles-mêmes cette condition. Toutefois, comme (1) est linéaire, toutes les combinaisons $|\phi_{\alpha\beta}\rangle$ doivent être solutions $\forall \alpha, \beta, \theta$, tandis que seules certaines combinaisons conduisent à $\phi_{\alpha\beta}(0) = 0$ et que les autres sont exclues, comme démontré au paragraphe précédent.

En fin de compte, on ne doit effectivement considérer que les solutions vérifiant $\phi_{\text{lié}}(k, 0) = 0$. Ce sont les états réguliers correspondant au spectre de Rydberg. Les solutions correspondant à $c = 1$ sont paires et les celles correspondant à $c = -1$ sont impaires. On a exactement retrouvé le résultat de Loudon.

d Orthogonalité des solutions

Comme on va l'étudier à la section suivante, les états réguliers sont les seuls états qui sont orthogonaux entre eux. En excluant toutes les autres solutions, pour assurer la continuité du courant, on exclut également toutes les complications résultant d'une base de solutions non orthogonales. On a prouvé la symétrie de $\mathcal{H}_{\text{lié}}$, le hamiltonien restreint aux états liés.

4 Généralisation de la relation de fermeture

On va commencer par étudier en détail le spectre lié.

a États anormaux

Dans [8], j'ai mis en évidence certains états particuliers, correspondant à η demi-entier négatif, que j'ai appelé états anormaux. Dans ce manuscrit, tous les états non réguliers, correspondant à $-\eta \notin \mathbb{N}^*$ sont appelés états anormaux, car j'avais fait une erreur. J'appellerai, par la suite, les états anormaux correspondant à η demi-entier négatif les *états de nombre quantique demi-entier*.

α Spectre continu

L'origine de mon erreur est simple : quand on considère, sur \mathbb{R}_- , les solutions obtenues en remplaçant η par $-\eta$, on obtient, pour tout $\eta \neq -1/2 - n$, avec $n \in \mathbb{N}$, une fonction d'onde divergente. Il semble donc qu'il y a une quantification, non

seulement pour les états réguliers, mais pour ceux de nombre quantique demi-entier, pour lesquelles on trouve une fonction d'onde caractérisée par

$$\Re\left(\varphi\left(\frac{-\lambda}{2n+1}, -x\right)\right) = \varphi\left(-\frac{-\lambda}{2n+1}, x\right) \quad \forall x > 0.$$

Toutefois, on peut en fait généraliser ce résultat de quantification par

$$\Re(\varphi(k, -x)) + \tan\left(\frac{-\lambda\pi}{2k}\right)\Im(\varphi(k, -x)) = \frac{\Gamma(\lambda/(2k))}{\Gamma(-\lambda/(2k))}\varphi(-k, x) \quad (11)$$

$$\forall x > 0, \forall \frac{\lambda}{2k} \notin \mathbb{N}^* .$$

Rien ne semble distinguer finalement les états de nombre quantique demi-entier. J'ai certes obtenu une formule [224] qui montre que ces solutions maximalisent une certaine fonction, intervenant dans la métrique, mais ce résultat reste isolé.

On reviendra cependant sur ces états de nombre quantique demi-entier, quand on examinera les possibilités de généraliser la relation de fermeture pour un opérateur non symétrique. Étudions tout d'abord la non-orthogonalité entre ces états, qui est reliée à la brisure d'hermiticité du hamiltonien $\mathcal{H}_{\text{lié}}$.

β Produit scalaire

Le produit scalaire a été calculé, pour les états de nombre quantique demi-entier, dans [8]. Je présente [224] une démonstration plus astucieuse et valable pour tous les états anormaux; on écrit :

$$\int_0^\infty dx \phi_{\text{lié}}(k_1, x) \frac{\partial^2 \phi_{\text{lié}}}{\partial x^2}(k_2, x) - \phi_{\text{lié}}(k_2, x) \frac{\partial^2 \phi_{\text{lié}}}{\partial x^2}(k_1, x)$$

$$= \left[\phi_{\text{lié}}(k_1, x) \frac{\partial \phi_{\text{lié}}}{\partial x}(k_2, x) - \phi_{\text{lié}}(k_2, x) \frac{\partial \phi_{\text{lié}}}{\partial x}(k_1, x) \right]_{0^+}^\infty$$

puis, en utilisant (1), on obtient

$$= (k_1^2 - k_2^2) \int_0^\infty dx \phi_{\text{lié}}(k_1, x) \phi_{\text{lié}}(k_2, x)$$

d'où

$$\langle \phi_{\text{lié}}(k_1, \cdot) | \phi_{\text{lié}}(k_2, \cdot) \rangle = \lambda^2 \times \frac{k_2 - k_1 + \lambda(\log(\frac{k_2}{k_1}) + \psi(1 + \frac{\lambda}{2k_1}) - \psi(1 + \frac{\lambda}{2k_2}))}{(k_1^2 - k_2^2)\Gamma(1 + \lambda/(2k_1))\Gamma(1 + \lambda/(2k_2))} \quad (12)$$

où Γ et ψ sont les fonctions gamma et digamma. Précisons que ces produits scalaires sont, quand les fonctions sont correctement normalisées, très petits (le plus grand vaut 0,032 et les autres décroissent très rapidement [8]).

Les états anormaux ne sont également pas orthogonaux aux états libres ordinaire :

$$\int_0^\infty dx \phi_{\text{lié}}(k_1, x) \frac{\partial^2 \phi_{\text{lib}}}{\partial x^2}(k_2, x) - \phi_{\text{lib}}(k_2, x) \frac{\partial^2 \phi_{\text{lié}}}{\partial x^2}(k_1, x)$$

$$= \left[\phi_{\text{lié}}(k_1, x) \frac{\partial \phi_{\text{lib}}}{\partial x}(k_2, x) - \phi_{\text{lib}}(k_2, x) \frac{\partial \phi_{\text{lié}}}{\partial x}(k_1, x) \right]_{0^+}^\infty$$

puis on substitue (1)
appliquée à ϕ_{lib} et $\phi_{\text{lié}}$, d'où

$$= (k_1^2 + k_2^2) \int_0^\infty dx \phi_{\text{lié}}(k_1, x) \phi_{\text{lib}}(k_2, x)$$

d'où

$$\langle \phi_{\text{lib}}(k_1, \cdot) | \phi_{\text{lié}}(k_2, \cdot) \rangle = \frac{k_1 |\lambda|^{3/2}}{(k_1^2 + k_2^2) \Gamma(1 + \lambda/(2k_2))}. \quad (13)$$

b État d'énergie $-\infty$

L'état, initialement introduit par Loudon [217], d'énergie $-\infty$, correspond, parmi les solutions $\phi_{\text{lié}}$, à $\eta = 0$. Cette solution correspond à la fonction $e^{-|u|}$, en variable adimensionnée, mais $\phi_{\text{lié}}(-\infty, x) = 0$ car la norme associée dans (2b) à $\eta = 0$ est nulle.

Ce résultat est entièrement cohérent avec le produit scalaire calculé précédemment, qui est toujours nul entre un état de moment k_1 et cet état $k_2 = -\infty$. L'état inventé par Loudon est nul.

c Non hermiticité du hamiltonien

On a déjà rencontré, dans le spectre libre, des états, correspondant aux fonctions d'onde G_η , non orthogonaux entre eux, et on a vu que \mathcal{H}_{lib} ne peut être symétrique que si on exclut ces états non orthogonaux et qu'on impose $T = 0$ et les solutions F_η .

La situation est analogue pour le spectre lié, orthogonalité entre états et hermiticité de $\mathcal{H}_{\text{lié}}$ sont également équivalentes. Cela découle directement de (5).

Aussi, si on garde des états anormaux, le hamiltonien ne peut être symétrique.

d Relation de fermeture ordinaire

Comme je l'ai déjà écrit, la plupart des mathématiciens exclut que \mathcal{H} puisse ne pas être symétrique, parce qu'on n'est pas assuré de prouver la relation de fermeture associée aux états propres. Cette relation est indispensable en mécanique quantique, car elle traduit en terme mathématiques la notion d'E.C.O.C⁴ et de représentation.

Nous sommes dans le cas d'un hamiltonien \mathcal{H} symétrique, comme démontré par ce qui précède. Il nous reste à construire proprement une base de solutions définies sur \mathbb{R} .

α Base d'états propres

Pour les états libres, on profite de ce que les solutions restent confinées dans les deux demi-droites \mathbb{R}_+^* et \mathbb{R}_-^* . On notera $\hat{\phi}(k, x) = F_{\frac{\lambda}{2k}}(kx)$ pour $k > 0$, correspondant aux états libres se propageant dans \mathbb{R}_+^* et $\hat{\phi}(k, x) = \check{F}_{\frac{-\lambda}{2k}}(-kx)$ pour $k < 0$, correspondant aux états libres se propageant dans \mathbb{R}_-^* . Je profite ici de la dégénérescence $k \leftrightarrow -k$ pour identifier artificiellement les états de droite aux $k > 0$ et ceux de gauche aux $k < 0$, ce qui simplifiera plus loin les écritures. On choisit la base $\{|\hat{\phi}(k, \cdot)\rangle, k \in \mathbb{R}\}$. Les fonctions $x \mapsto F_{\frac{\lambda}{2k}}(kx)$ sont prolongées sur \mathbb{R}_- en posant

4. Ensemble Complet d'Observables qui Commutent.

$F_{\frac{\lambda}{2k}}(u) = 0 \forall u < 0$. En conséquence, le support de $F_{\frac{\lambda}{2k}}$ est \mathbb{R}_+ et son domaine de définition \mathbb{R} . Pour la transposée $\tilde{F}_{\frac{\lambda}{2k}}$, le support est \mathbb{R}_- et le domaine de définition \mathbb{R} .

Il n'y a pas à recalculer la normalisation, qui est exacte pour les solutions F_η , puisque le support est toujours une demi-droite.

On choisit la base des états liés $\{|\tilde{\phi}_{n,\epsilon}\rangle, n \in \mathbb{N}^*, \epsilon = \pm\}$ où

$$\tilde{\phi}_{n,\pm}(x) = (\varphi_n(x) \pm \varphi_n(-x))/\sqrt{2}$$

sont les solutions paires ($\pm = +$) ou impaires ($\pm = -$) définies sur \mathbb{R} à l'aide des solutions φ_n définies en (1a) sur \mathbb{R}_+ et leur transposées définies sur \mathbb{R}_- . Les précautions sur les domaines de définition ressemblent à celles du spectre libre, mais les états $|\tilde{\phi}_{n,\epsilon}\rangle$ ont pour support \mathbb{R} et la normalisation est modifiée, par rapport aux solutions déjà définies sur \mathbb{R}_+^* , ce qui est pris en compte par le facteur $1/\sqrt{2}$.

β Énoncé vectoriel

La relation de fermeture s'écrit

$$\frac{1}{|\lambda|} \left(\sum_{\substack{n \in \mathbb{N}^* \\ \epsilon = \pm}} |\tilde{\phi}_{n,\epsilon}\rangle \langle \tilde{\phi}_{n,\epsilon}| + \int_{-\infty}^{\infty} |\hat{\phi}(k, \cdot)\rangle \langle \hat{\phi}(k, \cdot)| \frac{dk}{\pi} \right) = \text{Id}_{\mathcal{E}} \quad (14a)$$

où \mathcal{E} est l'espace vectoriel engendré par l'ensemble \mathcal{B} des solutions $\hat{\phi}$, pour le spectre libre, et $\widetilde{\varphi_{n\pm}}$ régulières pour le spectre lié. \mathcal{E} inclut les fonctions de $L^2(\mathbb{R})$ s'annulant en $x = 0$ mais est nettement plus grand. On va l'étudier plus loin, mais je voudrais donner l'énoncé fonctionnel de la relation de fermeture, qui est plus familier.

γ Énoncé fonctionnel

La formule précédente est mal commode, car on ne distingue pas facilement l'espace sur lequel elle s'applique. Sa traduction fonctionnelle, quand on restreint l'espace de fonctions sur \mathbb{R}_+^* , est [224]

$$\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \varphi_n\left(\frac{-\lambda}{2n}, x\right) \varphi_n\left(\frac{-\lambda}{2n}, y\right) + \int_0^\infty \phi(k, x) \phi(k, y) \frac{dk}{\pi} = |\lambda| \delta(x - y); \quad (14b)$$

pour l'étendre sur \mathbb{R} , on écrit

$$\sum_{n \in \mathbb{N}^*} \frac{1}{2} \left(\varphi_n\left(\frac{-\lambda}{2n}, x\right) \varphi_n\left(\frac{-\lambda}{2n}, y\right) + \varphi_n\left(\frac{-\lambda}{2n}, -x\right) \varphi_n\left(\frac{-\lambda}{2n}, -y\right) \right) + \int_0^\infty \left(F_{\frac{\lambda}{2k}}(x) F_{\frac{\lambda}{2k}}(y) + F_{\frac{\lambda}{2k}}(-x) F_{\frac{\lambda}{2k}}(-y) \right) \frac{dk}{\pi} = |\lambda| \delta(x - y). \quad (14c)$$

e Détermination de \mathcal{E}

Notons tout d'abord que \mathcal{E} ne contient pas les solutions anormales. C'est peut-être rassurant mais cela ne va pas de soi.

α Les solutions anormales sont exclues de \mathcal{E}

La démonstration est générale et ne nécessite pas l'axiome du choix, puisqu'on explicite une décomposition des états. J'en donne une démonstration très générale dans [224] mais je l'ai explicitement adaptée à la base \mathcal{B} ici.

Supposons l'existence d'un vecteur propre de \mathcal{H} (on pourrait se contenter de $\mathcal{H}_{\text{lié}}$ mais cela n'est pas nécessaire) qu'on notera $|\chi\rangle$. On a

$$\mathcal{H}|\chi\rangle = e_0|\chi\rangle$$

où on note e_0 sa valeur propre. Supposons que $|\chi\rangle$ ne fasse pas partie de la base \mathcal{B} définie plus haut. Cela implique que $e_0 \notin \mathbb{R}_+ \cup \{-\frac{\lambda^2}{n^2}, n \in \mathbb{N}^*\}$.

Comme e_0 est dans le spectre lié, on pourra supposer de plus que $\chi \in L^2(\mathbb{R})$.

Supposons par l'absurde que $|\chi\rangle$ peut être décomposé dans \mathcal{B} , soit

$$|\chi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} a(k)|\hat{\phi}(k, \cdot)\rangle dk + \sum_{\substack{n \in \mathbb{N}^* \\ \epsilon = \pm 1}} b_n |\tilde{\varphi}_{n, \epsilon}\rangle \quad (15)$$

où $a(k)$ et b_n sont les coefficients de la décomposition de $|\chi\rangle$. On fait agir \mathcal{H} par la gauche, ce qui donne

$$e_0|\chi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} k^2 a(k)|\hat{\phi}(k, \cdot)\rangle dk + \sum_{\substack{n \in \mathbb{N}^* \\ \epsilon = \pm 1}} \frac{\lambda^2}{4n^2} b_n |\tilde{\varphi}_{n, \epsilon}\rangle ;$$

on substitue (15) à gauche, d'où finalement

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} (k^2 - e_0)a(k)|\hat{\phi}(k, \cdot)\rangle dk + \sum_{\substack{n \in \mathbb{N}^* \\ \epsilon = \pm 1}} \left(\frac{\lambda^2}{4n^2} - e_0\right)b_n |\tilde{\varphi}_{n, \epsilon}\rangle \\ \iff a(k)(e_0 - k^2) &= 0 \quad \forall k \in \mathbb{R} \quad \text{et} \quad c_n(e_0 - \frac{\lambda^2}{4n^2}) = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}^* \end{aligned}$$

ce qui implique que tous les coefficients sont nuls, donc $\chi = 0$, absurde.

Notons que cette démonstration ne s'applique pas aux états G_η . Je n'ai pas cherché à démontrer de résultat équivalent pour les G_η , mais la démarche doit être plus difficile.

β Il y a des états ne s'annulant pas en zéro dans \mathcal{E}

On considère le projecteur (14a). Tous les états sont bien orthonormaux entre eux, d'après (8), (12) et (13), ce qui prouve que ce projecteur est orthogonal.

Dans [224], j'ai calculé, à l'aide de leur expression exacte, la projection de plusieurs états. Plus précisément, j'ai utilisé la projection Π sur l'espace des fonctions définies sur \mathbb{R}_+^* (mais je continuerai abusivement à noter \mathcal{E} l'espace de projection) :

$$\Pi = \frac{1}{|\lambda|} \left(\int_0^\infty dk |\hat{\phi}(k, \cdot)\rangle \langle \hat{\phi}(k, \cdot)| + \sum_{n=1}^\infty |\varphi(\frac{-\lambda}{2n}, \cdot)\rangle \langle \varphi(\frac{-\lambda}{2n}, \cdot)| \right) .$$

Voici les courbes Figs. 2 (a) et (b), des projections de deux fonctions de $L^2(\mathbb{R}_+)$, $x \mapsto e^{-x}$ et $x \mapsto \phi_{\text{lié}}(1/2, x) = 2|\lambda|^{3/2} \sqrt{\frac{2}{8+\pi^2}} x (\mathbf{K}_0(|\lambda|x) + \mathbf{K}_1(|\lambda|x))$ où \mathbf{K}_n sont des

fonctions de Bessel du deuxième type,⁵ cf. Eq. (35) de [8]. Il ne faut pas confondre la fonction exponentielle pure avec $\phi_{\text{lié}}(\infty, x)$, la solution d'énergie $-\infty$ exprimée en variable adimensionnée, qui a été étudiée plus haut.

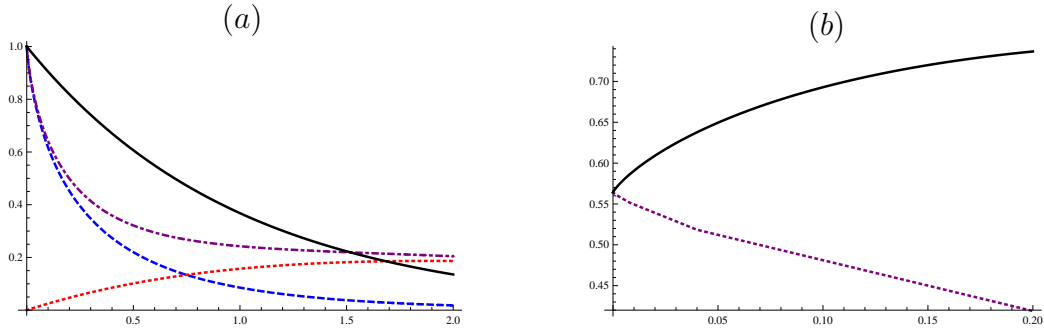


FIGURE 2 – (a) Courbes de e^{-x} (trait noir plein), de sa projection partielle sur les états libres (en tirets bleus), sur les états liés (en pointillés rouges) et sur \mathcal{E} (en tirets-points pourpre), avec des variables adimensionnées. (b) Courbes de $\phi_{\text{lié}}(1/2, x)$ (trait noir plein) et de sa projection sur \mathcal{E} (en pointillés pourpre).

On constate sur la Fig. 2 (a) et (b) que, non seulement les fonctions projetées ne s'annulent pas en $x = 0$, mais que leur limite en ce point est égale avec celle des fonctions non projetées. Sur la Fig. 2 (a) est précisée la projection partielle sur les états libres, qui contribue totalement à cette limite. La précision des calculs est suffisante pour qu'on ne puisse pas attribuer ce résultat à un artefact numérique. Tous les détails se trouvent dans [224]. Voici enfin la figure de la dérivée de la fonction exponentielle et de sa projection sur \mathcal{E} , qui confirme la précédente :

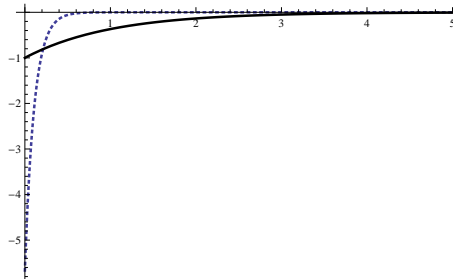


FIGURE 3 – Courbes de $(e^{-x})' = -e^{-x}$ (en trait noir plein) et la dérivée de la projection sur \mathcal{E} de e^{-x} (en tirets bleus).

En conclusion, la détermination de \mathcal{E} est difficile, bien qu'on connaisse la base Hilbertienne de cet espace.

f Relation de fermeture pour une métrique non euclidienne

Comme je l'ai déjà écrit, pour les spectres continus, attachés aux fonctions $x \mapsto \phi_{\text{lib}}(k, x)$ et $x \mapsto \phi_{\text{lié}}(k, x)$, il n'existe aucune technique connue, qui permette de retrouver une relation de fermeture.

⁵. Je corrige une erreur de normalisation dans [8], notamment une erreur de calcul formel due à Mathematica.

Je voudrais néanmoins retracer ici les calculs présentés dans [8], où j'ai ajouté à la base \mathcal{B} les seuls états de nombre quantique demi-entier, correspondant à $\eta = -1/2 - n$, $\forall n \in \mathbb{N}$. On notera $\tilde{\mathcal{B}}$ cette base augmentée. Dans ce cas, on doit seulement gérer un ensemble dénombrable de fonctions non orthogonales et il est possible d'écrire à l'aide de la métrique g la relation de fermeture exacte [101]

$$\sum_{i,j \in \mathcal{J}} |\Psi_i\rangle g_{ij}^{-1} \langle \Psi_j| = \text{Id} . \quad (16)$$

Il est notamment important de comprendre que rien ne permet d'exiger la symétrie de \mathcal{H} , puisqu'on a néanmoins un spectre réel, qui permet une quantification correcte des observables.

Certes, ces états non orthogonaux induisent des propriétés inhabituelles, décrite dans [8]. Je ne préfère pas les reprendre, quoiqu'elles soient très originales ; dans des calculs non publiés, j'ai montré que ces effets peuvent s'interpréter comme une auto-interaction induite par le potentiel de Coulomb. Autrement dit, bien que construits comme solutions propres de \mathcal{H} , les états sont en interaction. Cette interaction induite est directement reliée aux potentiels singuliers en δ , δ' , etc., introduits par Gordeyev [223].

α Métrique complète

On notera R les termes de couplage libre-lié, $R_{k,n} \equiv \langle \hat{\phi}(k, \cdot) | \phi_{\text{lié}}(\frac{\lambda}{n}, \cdot) \rangle / \sqrt{-\lambda}$ de la métrique ; $R_{n,k}^\dagger$ donne les termes $\langle \phi_{\text{lié}}(\lambda/n, \cdot) | \hat{\phi}(k, \cdot) \rangle / \sqrt{-\lambda}$. On notera S la métrique réduite aux états liés, $S_{n_1, n_2} = \langle \phi_{\text{lié}}(\frac{\lambda}{n_1}, \cdot) | e \phi_{\text{lié}}(\frac{\lambda}{n_2}, \cdot) \rangle / |\lambda|$. La métrique complète s'écrit alors

$$g = \begin{pmatrix} I & R \\ R^\dagger & S \end{pmatrix}$$

et son inverse

$$g^{-1} = \begin{pmatrix} I + RBR^\dagger & -RB \\ -BR^\dagger & B \end{pmatrix}$$

où on a défini $B = (S - RR^\dagger)^{-1}$ (je rappelle que les termes non diagonaux de la métrique sont très petits, de sorte que l'existence de B est assurée).

β Relation de fermeture généralisée

En appliquant (16), on trouve

$$\begin{aligned} \text{Id}_{\mathcal{D}} &= \frac{1}{|\lambda|} \left(\int_{\mathbb{R}^{\pi}} \frac{dk}{\pi} |\hat{\phi}(k, \cdot)\rangle \langle \hat{\phi}(k, \cdot)| + \int_{\mathbb{R}^2} \frac{dk_1 dk_2}{|\lambda| \pi^2} |\hat{\phi}(k_1, \cdot)\rangle \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{N}} R_{k_1 n_1} B_{n_1 n_2} R_{n_2 k_2}^\dagger \langle \hat{\phi}(k_2, \cdot)| \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\sqrt{-\lambda}} \sum_{n, n_1 \in \mathbb{N}^*} \int_{\mathbb{R}^{\pi}} \frac{dk}{\pi} \left(|\hat{\phi}(k, \cdot)\rangle R_{k n_1} B_{n_1 n} \langle \phi_{\text{lié}}(\frac{\lambda}{n}, \cdot)| + |\phi_{\text{lié}}(\frac{\lambda}{n}, \cdot)\rangle B_{n n_1} R_{n_1, k}^\dagger \langle \hat{\phi}(k, \cdot)| \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{|\lambda|} \sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{N}^*} |\phi_{\text{lié}}(\frac{\lambda}{n_1}, \cdot)\rangle S_{k_1, k_2} \langle \phi_{\text{lié}}(\frac{\lambda}{n_2}, \cdot)| \right) \quad (17) \end{aligned}$$

où on définit \mathcal{D} de façon analogue à \mathcal{E} .

γ Domaine d'application

La relation (17) est exacte. Elle redonne (14c) si on l'applique à des fonctions de \mathcal{E} , en particulier de \mathcal{B} .

La détermination de \mathcal{D} est encore plus difficile que celle de \mathcal{E} , mais on peut remarquer que $\mathcal{D} \supset \mathcal{E}$ comporte des états non physiques.

5 Analyse locale versus analyse globale

L'analyse locale, qui consiste à considérer l'équation différentielle comme une contrainte qu'on applique de $-\infty$ à $+\infty$, s'appuie sur les solutions analytiques, qu'on trouve sur chaque domaine de définition, en l'occurrence \mathbb{R}_+^* et \mathbb{R}_-^* . J'ai étudié le problème de Coulomb en m'appuyant principalement sur l'analyse locale.

Ce que j'appelle analyse globale est une approche topologique et est bien représenté par la recherche systématique des extensions auto-adjointes.

a Avantages de l'analyse locale

Tant qu'on étudie l'équation aux valeurs propres (1), l'analyse locale est très adaptée. Les solutions définies sur \mathbb{R}_+^* et \mathbb{R}_-^* étant entièrement résolues, la seule ambiguïté concerne le raccordement en $x = 0$.

Or, les études de Gesztesy et similaires imposent la condition d'hermiticité

$$W(\varphi_1, \varphi_2) = 0 .$$

D'une part, cette condition ne permet pas de bien décrire le spectre libre, comme je l'ai montré à travers (8). D'autre part, elle réduit la généralité de l'analyse globale, puisqu'elle ne permettrait pas de décrire, par exemple, le cas de (17).

Certes, il ne faut pas oublier que, lorsqu'on étend un opérateur symétrique, les définitions transcendent les conditions aux bords choisies initialement. Mais, par essence, on restera toujours dans le cadre symétrique de l'opérateur ; en l'occurrence, on ne pourra pas s'abstenir de la condition de Dirichlet (3).

b Avantages de l'analyse globale

Ce qui peut être reproché à l'analyse locale est qu'on ne peut exclure qu'une suite de fonctions ait une limite imprévue. C'est la question de la fermeture de l'espace de fonctions.

Pour ce qui concerne (1), l'ensemble des solutions trouvées par l'analyse locale est fermé. Par contre, si on s'intéresse à la véritable équation de Schrödinger, quand on remplace $E\Psi$ par $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$, la situation change.

Les solutions de cette équation sont les combinaisons linéaires de celles de (1), avec les facteurs de phase temporels usuels, comme indiqués dans (9). La fermeture de l'espace engendré par les états de \mathcal{B} est justement \mathcal{E} et reste indéterminée.

c États physiques

Les états physiques sont les solutions de l'équation de Schrödinger dépendant du temps et correspondent donc aux fonctions de \mathcal{E} .

D Conséquences et perspectives

1 Expériences

Un article théorique de Ando [232] prévoit un spectre d'excitation unidimensionnelle dans un nanotube de carbone. Les électrons sont quantifiés dans des canaux unidimensionnels et l'excitation est due à la présence d'une charge dans le nanotube. Il faut donc rattacher cette étude théorique au problème de Coulomb dans un cylindre que je traite plus loin, qui possède la même symétrie et lui est équivalent.

Les mesures expérimentales sur ces systèmes sont très difficiles, en soi et aussi parce qu'ils sont pleins de défauts [233–236]. Toutefois, la quantification des niveaux d'excitation y est bien observée. Ces mesures sont interprétées à l'aide d'une théorie appelée MQDT (pour Multichannel Quantum Defect Theory) [237, 238] mais il faut bien faire attention qu'elle est développée, notamment dans ces références, pour des systèmes à trois dimensions.

On peut observer un accroissement de l'intérêt que ces systèmes unidimensionnels suscitent en ce moment. On peut notamment citer les expériences de Okano *et al* [239] sur *GaAs*.

2 Généralisation à trois dimensions

Je voudrais examiner l'application des résultats précédents pour le problème à trois dimensions, avec $l = 0$ (moment orbital nul). On va heureusement retrouver le spectre de Rydberg, mais on y gagne une justification vraiment convaincante de la suppression des solutions G_η .

a Équation radiale pour les états de l'atome d'hydrogène

J'ai cité précédemment sans l'écrire l'équation radiale correspondant aux états $l = 0$ de l'atome d'hydrogène. Elle s'écrit

$$-r \frac{\partial^2 r \phi(r)}{\partial r^2} + V(r) \phi(r) = e \phi(r) \quad \forall r > 0 ,$$

et on retrouve (2). Je ne m'intéresserai, par la suite, qu'aux états liés.

b Conservation du courant de probabilité

L'argument physique pour éliminer, dans le spectre lié, les solutions anormales ne peut plus s'appliquer, car il n'y a pas de sens à chercher une discontinuité du courant $j_r(r)$ en $r = 0$.

Notons que, puisque $\phi(r) = \varphi(r)/r$, où φ est solution de (1), la dérivée $\phi'(r) = \varphi'(r)/r - \varphi(r)/r^2$ possède un terme supplémentaire, qui s'annule dans le calcul du courant j associé à $\phi_{\alpha\beta}(r)/r$. Au bout du compte, le courant radial s'écrit $j_r(r) = j(r)/r$, où j est le courant du cas unidimensionnel.

Quand on inclut une solution anormale, le courant radial j_r diverge quand $r \rightarrow 0$ mais on ne peut en tirer de conclusions, parce que $I = \int_0^\infty j_r(r)r^2 dr$ converge simultanément. Par contre, cette intégrale I est non nulle, si on choisit comme contour une sphère centrée sur l'origine et de rayon R suffisamment petit. En effet, elle vaut $J \simeq j_0 2\pi R^2$, où j_0 est la limite calculée en (11). j_0 est nul si et seulement si on se restreint aux solutions régulières de Rydberg. I mesure le courant I qui entre (si $I < 0$) ou sort (si $I > 0$) de l'origine, qui joue donc le rôle d'une fontaine ou d'un trou ponctuel.

Ce courant viole la conservation du nombre de particule et n'est pas acceptable physiquement (cf. l'introduction de [8]).

c Quantification de Rydberg

La conservation du nombre de particule implique que les seules solutions physiques sont les états réguliers de Rydberg, d'où la relation de fermeture s'appliquant aux fonctions radiales [240]

$$\sum_{n \in \mathbb{N}^*} R_{nl}(r)R_{nl}(r') + \int_0^\infty R_{k,l}(r)R_{k,l}(r')dk = \frac{1}{r^2}\delta(r - r') . \quad (1)$$

3 Problème de Coulomb sur un cylindre

J'ai choisi le potentiel régularisé

$$V_\varepsilon = \lambda/\sqrt{x^2 + \varepsilon^2} .$$

Quand $\varepsilon \rightarrow 0$, il redonne le potentiel de Coulomb, $V_\varepsilon \rightarrow V$. Nous ne nous intéressons, encore une fois, qu'à son spectre lié.

Ce spectre peut être calculé numériquement avec une précision aussi grande que l'on veut. Il est discret et non dégénéré $\forall \varepsilon \neq 0$. De plus, toutes les fonctions propres sont analytiques.

a Solutions numériques

On distingue deux familles de fonctions propres, les états impairs, que je noterai χ_{2p}^ε où $p \in \mathbb{N}^*$, et les états pairs, que je noterai χ_{2p+1}^ε où $p \in \mathbb{N}$. Je définis les énergies e_p^ε correspondant aux solutions impaires, et $e_{p+\frac{1}{2}}^\varepsilon$ aux solutions paires. On peut observer sur la Fig. 1 les énergies les plus basses en fonction de $1/\varepsilon$.

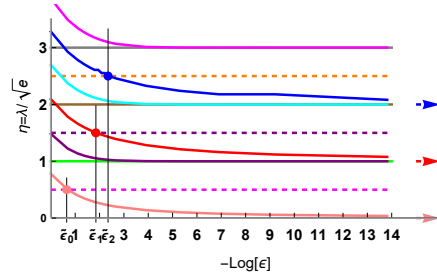


FIGURE 1 – Premiers niveaux d'énergie du hamiltonien $\frac{p^2}{2m} + V_\varepsilon$ versus $1/\varepsilon$ avec une ordonnée adimensionnée.

Quand $\varepsilon \rightarrow 0$, les fonctions d'onde $\chi_{2p}^\varepsilon \rightarrow \chi_{2p}^0 = \tilde{\phi}_{p,-}$ tandis que leur énergie atteint rapidement $-\lambda^2/(4p^2)$, l'énergie de Rydberg. Au contraire, les fonctions d'onde $\chi_{2p+1}^\varepsilon \rightarrow \chi_{2p+1}^0$, une limite bien définie mais différente de $\phi_{\text{lié}}(\frac{-\lambda}{2p+1}, \cdot)$. J'ai vérifié que la fonction $x \mapsto \chi_{2p+1}^0(\frac{-\lambda x}{2p+1})$ n'est pas solution de (1). On peut donc affirmer que les fonctions d'onde sont discontinues quand on varie le paramètre ε et qu'on atteint $\varepsilon = 0$. Par ailleurs, leur énergie, comme on l'observe sur la Fig. 1, atteint également $-\lambda^2/(4p^2)$, l'énergie de Rydberg.

Cette discontinuité des fonctions d'onde selon ε est très banale. Les énergies sont par contre continues et dégénérées à $\varepsilon = 0$. Pour ce paramètre, les fonctions d'onde sont exactement $\tilde{\phi}_{p,-}$ pour le cas impair et $\tilde{\phi}_{p,+}$ pour le cas pair.

b Solution anormale régularisée

Bien que les solutions paires et impaires tendent toutes vers les solutions régulières à $\varepsilon = 0$, ce qui confirme, en passant, le spectre dégénéré que nous avons trouvé, les solutions paires ne sont pas sans lien avec les états anormaux de nombre quantique demi-entier, que j'ai étudié dans [8].

J'ai indiqué, sur la Fig. 1, l'énergie $\tilde{e}_p \equiv -\lambda^2/(4p^2 + 4p + 1)$. Le croisement de la courbe de $e_{p+\frac{1}{2}}^\varepsilon$ (en fonction de ε) avec la valeur constante \tilde{e}_p a lieu pour la valeur $\tilde{\varepsilon}_p$ du paramètre ε .

On représente Fig. 2 les deux fonctions d'onde $\chi_{p+\frac{1}{2}}^{\tilde{\varepsilon}_p}$ et $\phi_{\text{lié}}(\frac{-\lambda}{2p+1}, \cdot)$. Leurs équations aux valeurs propres respectives ne diffèrent sensiblement que dans la région $-\frac{\tilde{\varepsilon}_p}{|\lambda|} < x < \frac{\tilde{\varepsilon}_p}{|\lambda|}$, aussi, il n'est pas étonnant qu'elles soient presque égales : leur différence s'estompe exponentiellement quand on s'éloigne de cette région.

En ce sens, on peut écrire que l'état $|\chi_{p+\frac{1}{2}}^{\tilde{\varepsilon}_p}\rangle$ est une régularisation de l'état anormal $|\phi_{\text{lié}}(k, \cdot)\rangle$ pour $-\lambda/(2k)$ demi-entier. Cette régularisation est orthogonale aux états $|\chi_{2p}^\varepsilon\rangle$, qui sont la continuation de $|\tilde{\phi}_{p,-}\rangle$ quand on varie ε . J'appelle $|\chi_{p+\frac{1}{2}}^{\tilde{\varepsilon}_p}\rangle$ les états anormaux *régularisés* et leur énergie vaut par définition \tilde{e}_p .

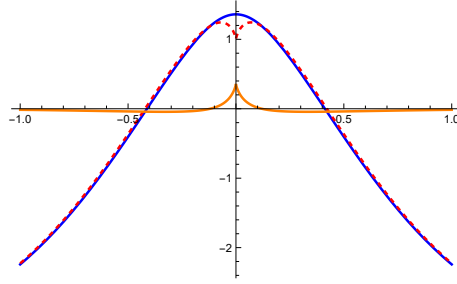


FIGURE 2 – Courbes de $\chi_{p+\frac{1}{2}}^{\tilde{\varepsilon}_p}(u)$ (plate en $u = 0$) et $\varphi(\frac{\lambda}{2p+1}, u)$ (de pente verticale en $u = 0$) ainsi que leur différence, avec des variables adimensionnées. Les fonctions diffèrent pour $-\tilde{\varepsilon}_p < u < \tilde{\varepsilon}_p$.

Ainsi, alors que je n’ai pas réussi à les distinguer dans le spectre de Coulomb, parmi tous les états anormaux, le fantôme des états de nombre quantique demi-entier réapparaît dans le spectre correspondant au potentiel régularisé $V(x) = c/\sqrt{x^2 + \epsilon^2}$. Le hamiltonien correspondant est auto-adjoint et tous les états sont orthogonaux, bien que la différence entre les états anormaux régularisés et les vrais états anormaux $\phi_{\text{lié}}(\frac{-\lambda}{2p+1}, \cdot)$ soit très petite.

4 Autres perspectives

L’élimination de toutes les solutions ne s’annulant pas en $x = 0$ est un pas décisif dans la résolution du problème de Coulomb, qui avait été déjà été prouvé par les approches globales supposant l’hermiticité de \mathcal{H} . Toutefois, la détermination de \mathcal{E} est inachevée. Elle serait intéressante, puisque \mathcal{E} espace décrit les états physiques, appartenant à l’espace de Hilbert $L_2(\mathbb{R})$. Prouver qu’il existe des états physiques hors de \mathcal{E} permettrait notamment de prouver que la mécanique quantique doit être définie dans un cadre plus général que celui des espaces de Hilbert.

Par contre, la recherche des extensions auto-adjointes me paraît achevée. Mes travaux corrobore les travaux de Tsutsui *et al* [226] et de Oliveira *et al* [219], que je compte étudier de façon approfondie avec l’aide d’un mathématicien.

Bibliographie

- [1] K. Popper, *‘Logic of Scientific Discovery’*, trad. anglaise (éd. Hutchinson, Penn, Buckinghamshire, 1944) de *‘Logik der Forschung : zur Erkenntnistheorie der modernen Naturwissenschaft’*, éd. Springer, Vienne (1935) ; la première traduction française éd. Payot (1973).
- [2] T. S. Kuhn, *‘La structure des révolutions scientifiques’*, éd. Champs Flammarion (1983) [1970, 1962].
- [3] Plus précisément, dans les annexes de l’article *‘The discrete Frenkel-Kontorova model and its extensions I’*, par S. Aubry et P. Y. Le Daeron, publié dans *Physica D*, vol. **8**, pp. 381-421, éd. Elsevier (1983), il y expose dans tous leurs détails l’ensemble de ses calculs.
- [4] T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* **14** (1955), p. 351.
- [5] J. L. Cardy, *‘Scaling and Renormalization in Statistical Physics’* éd. Cambridge university, Cambridge (1996).
- [6] J. C. Collins, *‘Renormalization’*, éd. Cambridge university, Cambridge (1994).
- [7] G. Abramovici, *Int. J. of Modern Phys. B* **7** (1993), p. 2339.
- [8] G. Abramovici & Y. Avishai, *‘The One dimension Coulomb problem’*, *J. Phys. A : Math.* **42** (2009), p. 285302.
- [9] Y. Avishai & Y. B. Band, *Phys. Rev. B* **32** (1985), p. 2674.
- [10] K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **4** (1971), p. 3174.
- [11] K. G. Wilson, *Rev. Mod. Phys.* **47** (1975), p. 773.
- [12] S. Dusuel, F. V. de Abreu & B. Douçot, *Phys. Rev. B* **65** (2002), p. 094505.
- [13] D. Zanchi & H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **54** (1996), p. 9509.
- [14] D. Zanchi & H. J. Schulz, *Europhys. Lett.* **44** (1998), p. 235.
- [15] M. Salmhofer, *‘Renormalization. An introduction’*, éd. Springer, Berlin (1999).
- [16] C. Honerkamp, Diss., Naturwissenschaften ETH Zürich, Nr. 13868 (2000), eth :23730.
- [17] M. Salmhofer & C. Honerkamp, *Prog. Theor. Phys.* **105** (2001), p. 1.
- [18] C. Halboth, PhD Thesis, RWTH Aachen (1999).
- [19] G. Benfatto & G. Gallavotti *‘Renormalization group’*, *Physics Notes* **1**, Princeton University, Princeton, NJ (1995), p. 1.
- [20] M. Fabrizio, *Phys. Rev. B* **48** (1993), p. 15838.
- [21] G. Abramovici, J.C. Nickel & M. Héritier, *‘Renormalization-group calculations with k_{\parallel} dependent couplings in a ladder’*, *Phys. Rev. B* **72** (2005), p. 045120.

- [22] G. Abramovici & M. Héritier, '*Functional Renormalization Group calculation of the Fermi surface of a spin-ladder*', Phys. Rev. B **75** (2007), p. 094516.
- [23] M. Fabrizio & A. Parola, Phys. Rev. Lett. **70** (1993), p. 226.
- [24] Voir par exemple A. Xu, G. Wang, S. Chen & B. Hu, Phys. Rev. B **58**, p. 721 (1998).
- [25] Décret n° 2009-460 du 23 avril 2009 (J. O.).
- [26] J. L. Marín & S. Aubry, Nonlinearity **9** (1996), p. 1501.
- [27] S. Aubry, Physica D **103** (1997), p. 201.
- [28] S. Aubry, S. Flach, K. Kladko & E. Olbrich, Phys. Rev. Lett. **76** (1996), p. 1607.
- [29] Émmanuel Sérié, Thèse de doctorat de l'Université Paris 6 (2005).
- [30] H. Fröhlich, Phys. Rev. **79** (1950), p. 845.
- [31] H. Fröhlich, '*Theory of superconductivity*', Proc. Royal Soc. of London A **223** (1954), p. 296.
- [32] « *La vérité, c'est la théorie la plus simple qui explique le plus de fait* », Le Monde (23 octobre 2002).
- [33] N. Belmechri, G. Abramovici & M. Héritier, EPL **80** (2007), p. 37004.
- [34] G. Abramovici, N. Belmechri & M. Héritier, Solid State Sciences **10**, (2008)p. 1790 .
- [35] P. Fulde & R. A. Ferrell, Phys. Rev. **135** (1964), p. A550.
- [36] A. I. Larkin & Y. N. Ovchinnikov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **47** (1964), p. 1136 [Sov. Phys. JETP **20** (1965), p. 762].
- [37] D. Rohe & W. Metzner, Phys. Rev. B **71** (2005), p. 115116.
- [38] A. A. Katanin & A. P. Kampf, Phys. Rev. Lett. **93**, (2004) p. 106406.
- [39] J. Sólyom, Advances in Physics **28** (1979), p. 201.
- [40] J. C. Nickel, Thèse de troisième cycle de l'Université Paris 11 (2004).
- [41] Ce commentaire a été refusé par l'éditeur (par principe). Il a été inclus dans [224].
- [42] L. K. Haines & D. H. Roberts, Am. J. Phys. **37**, (1969) p. 1145.
- [43] M. Andrews, Am. J. Phys. **44**, p. 1064 (1976).
- [44] C. Cohen-Tanouji, B. Diu & F. Laloë, "*Mécanique Quantique*", éd. Hermann, Paris, 1988 (1973).
- [45] J.-M. Levy-Leblond, '*Mettre la science en culture*', éd. Anais (1986).
- [46] Jacques Salomé, '*Heureux qui communique*', éd. Albin Michel (1093) [2003].
- [47] Lire à ce sujet l'excellent et nuancé : '*L'évaluation individuelle des chercheurs et des enseignants-chercheurs en sciences exactes et expérimentales*', J.-F. Bach, D. Jérôme & C. Dumas, Rapport remis à Madame Valérie Pécresse, Ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche, le 8 juillet 2009.

-
- [48] P. Kourilsky, ‘*Santé et développement durable*’, Conférences du Collège de France à Aubervilliers, 8 juin 2009.
- [49] D. J. C. Walker, A. P. Mackenzie & J. R. Cooper, *Phys. Rev. B* **51** (1998), p. 15653.
- [50] A. Damascelli, Z. Hussain & Z.-X. Shen, *Rev. Mod. Phys.* **75** (2003), p. 473.
- [51] M. R. Norman, D. Pines & C. Kallin, *Adv. Phys.* **54** (2005), p. 715.
- [52] G. Sordi, K. Haule & A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010), p. 226402.
- [53] R. H. Liu, G. Wu, T. Wu, D. F. Fang, H. Chen, S. Y. Li, K. Liu, Y. L. Xie, X. F. Wang, R. L. Yang, L. Ding, C. He, D. L. Feng & X. H. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008), p. 087001.
- [54] S. Hufner, M. A. Hossain, A. Damascelli & G. A. Sawatzky, *Rep. Prog. Phys.* **71** (2000), p. 062501.
- [55] J. W. Negele & H. Orland, ‘*Quantum Many-particle system*’, Advanced Books Classics, éd. Westview Press New York (2008).
- [56] H. Lehmann, *Nuovo Cimento* **11** (1954), p. 342.
- [57] B.-J. Schaefer & H. J. Pines, ‘*Renormalization group flow and equation of state of quarks and mesons*’, éd. IKDA (1999).
- [58] L. Schäfer, ‘*Excluded Volume Effects in Polymer Solutions, as Explained by the Renormalization Group*’, éd. Springer, Berlin (1999).
- [59] G. Battle, ‘*Wavelets and renormalization*’, éd. Scientific World (1999).
- [60] D. J. Gross, A. Neveu, J. Scherk & J. H. Schwarz, *Phys. Rev. D* **2** (1970), p. 697.
- [61] D. J. Gross, ‘*Applications of the renormalization group to high-energy physics*’ cours de l’École d’été de Physique Théorique XXVIII, Les Houches, publié par R. Balian & J. Zinn-Justin, éd. North-Holland/World Scientific (1975).
- [62] D. I. Uzunov, ‘*Introduction to the theory of critical phenomena*’, éd. Scientific World, Singapour (1993).
- [63] A. Bassetto, G. Nardelli & R. Soldati, ‘*Yang-Mills theories in algebraic non-convariant gauges*’, éd. World Scientific, Singapour (1991).
- [64] S. Pokorski, ‘*Gauge Field Theories*’, éd. Cambridge Monographs on Mathematics Physics (2000).
- [65] C. Itzykson & J.-B. Zuber, ‘*Quantum field theory*’, éd. McGraw-Hill International Book, New York, Paris (1980) [1985].
- [66] J. Zinn-Justin, ‘*Phase transitions and renormalization group*’, éd. Oxford University, Oxford, New York (2007).
- [67] A. N. Vasil’ev, ‘*The Field Theoretic Renormalization Group in Critical Behavior Theory and Stochastic Dynamics*’, éd. Chapman & Hall/CRC (2004).
- [68] L. E. Reichl, ‘*A Modern Course in Statistical Physics*’, éd. university of Texas, Austin (1980) [rééd. Wiley & son, New York (1998)].

- [69] W. D. McComb, W. Roberts & A. G. Watt, *Phys. Rev. A* **45**, p. 3507 (1992).
- [70] L. T. Adzhemyan, N. V. Antonov, A. N. Vasil'ev, '*Quantum field renormalization group in the theory of fully developed turbulence*', *Phys. Usp.* p. 39 1193 (1996).
- [71] J. Feldman, H. Knörrer & E. Trubowitz, '*Fermionic Functional Integrals and the Renormalization Group*', éd. American Mathematical Society (2002).
- [72] T. W. Burkhardt & J. M. J. Van Leeuwen, '*Real-space renormalization*', éd. Springer, Berlin (1982).
- [73] D. A. Lavis & G. M. Bell, '*Statistical Mechanics of Lattice Systems 2 : Exact, Series and Renormalization Group Methods*' éd. Springer, Berlin, Paris (1999).
- [74] I. Peschel, '*Density-Matrix Renormalization - A New Numerical Method in Physics*', éd. I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke & K. Hallberg, Springer, Berlin, New York (1999).
- [75] V. A. Smirnov, '*Renormalization and asymptotic expansions*', éd. Birkhäuser Verl., Basel, Boston (1991).
- [76] R. S. MacKay, '*Renormalisation in Area-preserving Maps*' éd. Scientific World, Singapour (1993).
- [77] C. T. McMullen, '*Complex Dynamics and Renormalization*' Princeton University, Princeton, New York (1996).
- [78] L. F. Kadanoff, '*Statics, Dynamics and Renormalization*' éd. Scientific World, Singapour (2000).
- [79] V. Rivasseau, '*La renormalisation*', séminaire Poincaré, éd. V. Rivasseau, G. Gallavotti & J. Zinn-Justin, É. Polytechnique (2002).
- [80] V. Mastropietro, '*Renormalization*', éd. World Scientific (2008).
- [81] Y. Jiang, '*Renormalization on one-dimensional folding maps*', International Conference on Dynamical Systems and Chaos, éd. Scientific World (1995).
- [82] O. Piguet & S. P. Sorella, '*Algebraic Renormalization*', éd. Springer Verlag, Berlin, New York (1995).
- [83] J. T. Cox, D. A. Dawson & A. Greven, '*Mutually catalytic super branching random walks : large finite systems and renormalization analysis*', éd. Am. Math. Soc., Providence R. I. (2004).
- [84] D. A. Dawson, A. Greven, F. den Hollander, R. Sun & J. M. Swart, '*The renormalization transformation for two-type branching models*', *Ann. Inst. H. Poincaré : Probab. Statist.* **44**, p. 1038 (2008).
- [85] A. Lesne, '*Méthodes de renormalisation*', éd. P. Collet, Eyrolles, Paris (1996).
- [86] L. F. Kadanoff & G. Baym, '*Quantum Statistical Mechanics*', éd. Benjamin-Cummings Publ. Cie, London (1962).
- [87] R. L. Ingraham, '*Renormalization theory of quantum field theory[sic] with a cut-off*', éd. Gordon, New York (1967).
- [88] K. Hepp, '*Théorie de la Renormalisation*', éd. Springer, Berlin (1969).

-
- [89] E. R. Caianiello, '*Renormalization and invariance in quantum field theory*', éd. Plenum, New York (1974).
- [90] G. Toulouse & P. Pfeuty, '*Introduction au groupe de renormalisation et à ses applications*', éd. Université Paris-Sud, Orsay & Presses Universitaires de Grenoble, Saint-Martin d'Hères (1975) [traduction anglaise : '*Introduction to the renormalization group and to critical phenomena*', éd. Wiley, New York (1977)].
- [91] D. J. Amit, '*Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*', éd. McGraw-Hill, London, New York (1978) [éd. Scientific World depuis 1984].
- [92] J. Zinn-Justin, '*Quantum field theory and critical phenomena*', éd. Clarendon, Oxford [Oxford University Press, New York] (1989).
- [93] J. I. Kapusta, '*Finite-temperature Field Theory*', éd. Cambridge University, Cambridge (1989).
- [94] J. Binney, A. J. Fisher & M. E. Newman, '*The Theory of Critical Phenomena : An Introduction to the Renormalization Group*', éd. Clarendon, Oxford (1992).
- [95] J. Polchinski, hep-th/9210046.
- [96] R. Shankar, Rev. Mod. Phys. **66** (1993), p. 129.
- [97] R. J. Creswick, M. A. Farach & C. P. Poole, '*Introduction to Renormalization Group Methods in Physics*', éd. Wiley, New York (1992).
- [98] I. Herbut, '*Scaling and Renormalization in Statistical Physics*', éd. J. Cardy, Cambridge University, Cambridge (2007).
- [99] C. Bourbonnais & L. G. Caron, Int. J. Mod. Phys. B **05**, p. 1033 (1991). Disponible dans '*The Hubbard model, recent results*', Series on Advances in Statistical Mechanics **7**, éd. M. Raseti, World Scientific Singapour (1991).
- [100] Article D123-13 du Code de l'éducation.
- [101] G. Abramovici, '*Non-orthogonal tight-binding new method for alloys, including Slater-Friedel screening corrections*', Solid State Commun. **109** (1998), p. 253.
- [102] G. Abramovici, '*Charge transfers in complex transition metal alloys (Ti₂Fe)*', Eur. Phys. J. B **6** (1998), p. 39.
- [103] R. Haydock, Solid State Phys. **35** (1980), p. 215.
- [104] F. London, J. Chem. Phys. **5** (1937), p. 837.
- [105] W. A. Little, Phys. Rev. **134** (1964), p. A1416.
- [106] J. S. Langer & W. Ambegaokar, Phys. Rev. **164** (1967), p. 498.
- [107] D. E. Mc Cumber & B. I. Halperin, Phys. Rev. B **1** (1970), p. 1054.
- [108] L. Kramer & A. Baratoff, Phys. Rev. Lett. **38** (1977), p. 518.
- [109] A. A. Abrikosov, J. Low Temp. Phys. **53** (1983), p. 359.
- [110] H. Akamatu, H. Inokuchi & Y. Matsunaga, Nature **173** (1954), p. 168.
- [111] J. R. Gavaler, Appl. Phys. Lett. **23** (1973), p. 480.

- [112] L. R. Testardi, J. H. Wernick & W. A. Royer, *Solid State Commun.* **15** (1974), p. 1.
- [113] G. F. Hardy & J. K. Hulm, *Phys. Rev.* **93** (1954), p. 1004.
- [114] Découverte de *TCNQ* : D. S. Acker, R. J. Harder, W. R. Hertler, W. Malher, L. R. Melby, R. E. Benson & W. E. Mochel, *J. Am. Chem. Soc.* **82** (1960), p. 6408.
- [115] Découverte de *TTF* : F. Wudl, G. M. Smith & E. J. Hufnagel, *J. Chem. Soc. D : Chem. Commun.* **1** (1970), p. 1453.
- [116] L. B. Coleman, M. J. Cohen, D. J. Sandman, F. G. Yamagishi, A. F. Garito & A. J. Heeger, *Solid State Commun.* **12** (1973), p. 1125.
- [117] J. Ferraris, D. O. Cowan, W. Walatka & J. H. Perlstein, *J. Am. Chem. Soc.* **95** (1973), p. 948.
- [118] G. A. Thomas, D. E. Schafer, F. Wudl, P. M. Horn, D. Rimai, J. W. Cook, D. A. Glocker, M. J. Skove, C. W. Chu, R. P. Groff, J. L. Gillson, R. C. Wheland, L. R. Melby, M. B. Salamon, R. A. Craven, G. De Pasquali, A. N. Bloch, D. O. Cowan, V. V. Walatka, R. E. Pyle, R. Gemmer, T. O. Poehler, G. R. Johnson, M. G. Miles, J. D. Wilson, J. P. Ferraris, T. F. Finnegan, R. J. Warmack V. F. Raaen & D. Jérôme, *Phys. Rev. B* **13** (1976), p. 5105.
- [119] A. Andrieux, P. M. Chaikin, C. Duroure, D. Jérôme, C. Weyl, K. Bechgaard & J. R. Andersen, *J. Phys. France* **40** (1979), p. 1199.
- [120] S. Bouffard, M. Ribault, R. Brusetti, D. Jérôme & K. Bechgaard, *J. Phys. C : Solid State Phys.* **15** (1982), p. 2951.
- [121] R. Chevrel, M. Sergent & J. Prigent, *J. Solid State Chem.* **3** (1971), p. 515.
- [122] M. Sergent & R. Chevrel, *J. Solid State Chem.* **6** (1973), p. 433.
- [123] Ø. Fischer, A. Treyvaud, R. Chevrel & M. Sergent, *Solid State Commun.* **17** (1975), p. 721.
- [124] voir par exemple *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984), p. 1563.
- [125] A. Andrieux, D. Jérôme & K. Bechgaard, *J. Physique Lett.* **42** (1982), p. L87.
- [126] D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault et K. Bechgaard, *J. Physique Lett. (Paris)* **41** (1980), p. L95.
- [127] K. Bechgaard, K. Carneiro, M. Olsen, F. Rasmussen et C.S. Jacobsen, *Phys. Rev. Lett.* **46** (1981), p. 852.
- [128] S. S. Parkin, M. Ribault, D. Jérôme & K. Bechgaard, *J. Phys. C* **14** (1981), p. L445.
- [129] C. Colin, C. R. Pasquier & K. Bechgaard, *J. Phys. IV France* **131** (2005), p. 313.
- [130] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Lieke, D. Meschede, W. Franz & H. Schäfer, *Phys. Rev. Lett.* **43** (1979), p. 1892.
- [131] G. R. Stewart, Z. Fisk, J. O. Willis, & J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984), p. 679.

-
- [132] A. de Visser, J. J. M. Frank, A. Menovsky, T. T. M. Palstra, *J. Phys. F : Met. Phys.* **14** (1984), p. L191.
- [133] H. R. Ott, H. Rudigier, Z. Fisk & J. L. Smith, *Phys. Rev. Lett.* **50** (1983), p. 1595.
- [134] J. G. Bednorz & K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64** (1986), p. 189.
- [135] C. W. Chu, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang & Y. Q. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58** (1987), p. 405.
- [136] S. Uchida, H. Takagi, K. Kitazawa & S. Tanaka, *Jpn. J. Appl. Phys.* **26** (1987), p. L1.
- [137] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang & C. W. Chu, *Phys. Rev. Lett.* **58** (1987), p. 908.
- [138] R. J. Cava, R. B. van Dover, B. Batlogg & E. A. Rietman, *Phys. Rev. Lett.* **58** (1987), p. 408.
- [139] R. J. Cava, B. Batlogg, J. J. Krajewski, R. Farrow, L. W. Rupp Jr., A. E. White, K. Short, W. F. Peck, K. Kometani, *Nature* **332** (1988), p. 814.
- [140] Z. K. Tang, Lingyun Zhang, N. Wang, X. X. Zhang, G. H. Wen, G. D. Li, J. N. Wang, C. T. Chan, *Science* **29** (2001), p. 2462.
- [141] A. F. Hebard, M. J. Rosseinsky, R. C. Haddon, D. W. Murphy, S. H. Glarum, T. T. Palstra, A. P. Ramirez & A. R. Kortan, *Nature (London)* **350** (1991), p. 600.
- [142] R. C. Haddon, A. F. Hebard, M. J. Rosseinsky, D. W. Murphy, S. J. Duclos, K. B. Lyons, B. Miller, J. M. Rosamilia, R. M. Fleming, A. R. Kortan, S. H. Glarum, A. V. Makhija, A. J. Muller, R. H. Eick, S. M. Zahurak, R. Tycko, G. Dabbagh & F. A. Thiel, *Nature (London)* **347** (1991), p. 354.
- [143] Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, J. G. Bednorz, & F. Lichtenberg, *Nature* **372** (1994), p. 532.
- [144] H. Maeda, Y. Tanaka, M. Fukutomi & T. Asano, *Jpn. J. Appl. Phys.* **27** (1988), p. L209.
- [145] M. Takano, J. Takada, K. Oda, H. Kitaguchi, Y. Miura, Y. Ikeda, Y. Tomii & H. Mazaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **27** (1988), p. L1041.
- [146] H. Urayama, H. Yamochi, G. Saito, K. Nozawa, T. Sugano, M. Kinoshita, S. Sato, K. Oshima, A. Kawamoto & J. Tanaka, *Chem. Lett.* **17** (1988), p. 55.
- [147] K. Bechgaard, C. S. Jacobsen, K. Mortensen, H. J. Pedersen & N. Thorup, *Solid State Commun.* **33** (1980), p. 1119.
- [148] L. Balicas, K. Behnia, W. Kang, E. Canadell, P. Auban-Senzier, D. Jérôme & J. Fabre, *J. Phys. I (France)* **4** (1994), p. 1539.
- [149] C. S. Jacobsen, K. Mortensen, M. Weger, K. Bechgaard, *Solid State Commun.* **38** (1981), p. 423.
- [150] R. L. Greene & E. M. Engler, *Phys. Rev. Lett.* **45** (1980), p. 1587.
- [151] L. P. Gor'kov & D. Jérôme, *J. Physique Lett.* **46** (1985), p. L643.

- [152] R. Peierls, '*Quantum theory of solids*', Oxford University Press, Oxford (1955).
- [153] G. Abramovici, '*Structures chaotiques dans les phases incommensurables et ondes de densité de charge*', thèse de troisième cycle de l'Université Paris 6 (1990).
- [154] J. Bardeen, L. N. Cooper & J. R. Schrieffer. *Phys. Rev.*, **106**, p. 163, 1957.
- [155] D. Jérôme & H. J. Schulz, *Adv. Phys* **31** (1982), p. 299.
- [156] W. A. Little, *Sci. Am.* **212** (1965), v. 2, p. 216.
- [157] A. A. Abrikosov & E. A. Dorotheyev, *J. Low Temp. Phys.* **46** (1982), p. 53.
- [158] A. G. Lebed, *Sov. Phys. JETP* **62** (1985), p. 595.
- [159] L. P. Gorkov & A. G. Lebed, *J. Physique Lett.*, **45** (1984), p. L433.
- [160] A. G. Lebed, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **43** (1986), p. 137 [*JETP Lett.* **43** (1986), p. 174].
- [161] M. Héritier, G. Montambaux & P. Lederer *J. Physique Lett.* **45** (1984), p. L943.
- [162] P. M. Chaikin, *J. Phys. I (France)* **6** (1996), p. 1875.
- [163] J. O. Indekeu, M. P. Nightingale & W. V. Wang, *Phys. Rev. B* **34** (1986), p. 330.
- [164] M. Kosterlitz, *J. Phys. C* **7** (1974), p. 1046.
- [165] D. R. Nelson & B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* **19** (1979), p. 2457.
- [166] T. Giamarchi & H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **37** (1988), p. 325.
- [167] T. Giamarchi & H. J. Schulz, *Europhys. Lett.* **3** (1987), p. 1287.
- [168] T. Giamarchi & H. J. Schulz, *J. Phys. France* **49** (1988), p. 819.
- [169] J. Polchinski, *Nucl.Phys. B* **231** (1984), p. 269.
- [170] D. Zanchi & H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **61** (2000), p. 13609.
- [171] D. Zanchi, *Europhys. Lett.* **55** (2001), p. 376.
- [172] C. Wetterich, *Phys. Lett. B* **301**, (1993), p. 90.
- [173] C. Honerkamp & M. Salmhofer, *Phys. Rev. B* **63** (2001), p. 035109.
- [174] B. Binz, D. Baeriswyl & B. Douçot, *Ann. Phys.* **12** (2003), p. 704.
- [175] Y. Fuseya & Y. Suzumura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74** (2005), p. 1263.
- [176] N. Dupuis, *Eur. Phys. J. B* **48** (2005), p. 319.
- [177] W. Kohn & J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **118** (1960), p. 41.
- [178] A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **48**, (1993), p 1097.
- [179] H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **53**, (1996), p R2959.
- [180] Communication privé de C. Nickel. Ce calcul n'a apparamment jamais été publié.
- [181] A. G. Lebed & K. Yamaji, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998), p. 2697.
- [182] A. G. Lebed, *Phys. Rev. B* **59** (1999), p. R721.

-
- [183] A. G. Lebed, K. Machida & M. Ozaki : Phys Rev. B **62** (2000), p. R795.
- [184] C.A.R. Sà de Melo, J. Superconductivity **12** (1999), p. 459.
- [185] C. D. Valcarrella & C.A.R. Sà de Melo, Physica C **341-348** (2000), p. 293.
- [186] H. Shimahara, J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000), p. 1966.
- [187] G. Abramovici, T. Vinatier & M. Héritier, ‘*Coexistent symmetries in a two-band organic superconductor*’, Solid State Commun. **169** (2013), p. 42.
- [188] L. P. Gor’kov & E. I. Rashba, Int. J. Mod. Phys. B **16** (2002), p. 3184.
- [189] A. G. Lebed, J. Low Temp. Phys. **142** (2006), p. 173.
- [190] P. Dhakal, H. Yoshino, J. I. Oh, K. Kikuchi & M. J. Naughton, Phys. Rev. B **83** (2011), p. 014505.
- [191] I. J. Lee, P. M. Chaikin & M. J. Naughton, Phys. Rev. B. **62**, (2000), p R14669.
- [192] I. J. Lee, S. E. Brown, W. G. Clark, M. J. Strouse, M. J. Naughton, W. Kang & P. M. Chaikin, Phys. Rev. Lett. **88** (2001), p. 017004.
- [193] I. J. Lee, D. S. Chow, W. G. Clark, M. J. Strouse, M. J. Naughton, P. M. Chaikin & S. E. Brown, Phys. Rev. B **68** (2003), p. 092510.
- [194] J. Shinagawa, Y. Kurosaki, F. Zhang, C. Parker, S. E. Brown, D. Jérôme, K. Bechgaard & J. B. Christensen, Phys. Rev. Lett. **98** (2007), p. 147002.
- [195] A. G. Lebed, Phys. Rev. Lett. **107** (2011), p. 087004.
- [196] A. G. Lebed & S. Wu, in *The Physics of organic superconductors conductors* **110**, Springer Series in Material Sciences éd. A. Lebed (2008), p. 643.
- [197] M. Takigawa, H. Yasuoka & G. Saito, J. Phys. Soc. Jpn **56** (1987), p. 873.
- [198] L. I. Burlachkov, L. P. Gor’kov & A. G. Lebed, Europhys. Lett. **4** (1987), p. 941.
- [199] B. J. Powell, J. Phys. : condens. Matter **20** (2008), p. 345234.
- [200] N. Joo, P. Auban-Senzier, C. R. Pasquier, S. Yonezawa, R. Higashinaka, Y. Maeno, S. Haddad, S. Charfi-Kaddour, M. Héritier, K. Bechgaard & D. Jérôme, Eur. Phys. J. B **52** (2006), p. 337.
- [201] K. Machida, J. Phys. Soc. Jpn. **50** (1981), p. 2195.
- [202] R. Balian & N. R. Werthamer, Phys. Rev. **131** (1963), p. 1553.
- [203] M. Sigrist, AIP Conf. Proc. 789, *Lectures on the physics of highly correlated electron systems IX*, éd. A. Avella & F. Mancini (2005), p. 165.
- [204] G. Abramovici & P. Kalugin, Int. J. Geom. Methods Mod. Phys. **9** (2012), p. 1250023.
- [205] G. Roux, S. R. White, S. Capponi & D. PoilBlanc, Phys. Rev. Lett. **97** (2006), p. 087207.
- [206] I. J. Lee, A. P. Hope, M. J. Leone & M. J. Naughton, Synthetic Metals **70** (1995), p. 747.
- [207] N. Dupuis, Phys. Rev. B **50** (1994), p. 9607.
- [208] J’ai pu en discuter avec P. Lecheminant, qui m’a dit avoir rencontré une pathologie analogue avec la méthode de Bogoliubov.

- [209] A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov & I. Ye. Dzyaloshinskii, '*Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics*', Pergamon Press éd. D. Haar, Oxford (1965).
- [210] L. P. Pitaevskii & E. M. Lifshitz, '*Statistical Physics ; Part 2*', Butterworth-Heinemann (1980).
- [211] L. D. Landau & E. M. Lifshitz, '*Statistical Physics*', Butterworth-Heinemann (1968).
- [212] E. Fawcett, Rev. Mod. Phys. **60** (1988), p. 209.
- [213] P.G. Evans, E.D. Isaacs, G. Aeppli, Z. Cai & B. Lai, Science **295** (2002), p. 1042.
- [214] E. Pinsolle, V. L. R. Jacques, S. Ravy, G. Abramovici & D. Le Bolloc'h, Phys. Rev. B **89** (2014), p. 245127.
- [215] C. Y. Young & J.B. Sokoloff, J. Phys. F : Metal Phys. **4** (1974), p. 1304.
- [216] F. L. Yost, J. A. Wheeler & G. Breit, Phys. Rev. **49** (1936), p 174 .
- [217] R. Loudon, Am. J. Phys. **27**, 649 (1959).
- [218] W. Fischer, H. Leschke & P. Mueller, J. Math. Phys. **36** (1995), p. 2313.
- [219] C. R. de Oliveira & A. A. Verri, Ann. Phys. **324** (2009), p. 251.
- [220] V. S. Vrkljan., Z. Phys. **52** (1929), p. 735 ; *ibidem* **54** (1929), p. 133.
- [221] R. J. Elliott & R. Loudon, J. Phys. Chem. Solids **15** (1960), p. 196.
- [222] F. Gesztesy, J. Phys. A : Math. Gen. **13** (1980), p. 867.
- [223] A. N. Gordeyev & S. C. Chhajlany, J. Phy.A : Math. Gen. **30** (1997), p. 6893.
- [224] G. Abramovici, '*Incompatible Coulomb hamiltonian extensions*', Sci. Rep. **10** (2020), p. 7280.
- [225] V. S. Mineev, Theor. Math. Phys. **140** (2004), p. 1157.
- [226] I. Tsutsui, T. Fülöp & T. Cheon, J. Phys. A : Math. Gen. **36** (2003), p. 275.
- [227] H. M. Srivastava & J. P. Singhal, Ann. Mat. Pura Appl. **90** (1971), p. 75.
- [228] V. M. Bruk, Math. USSR Sb. **29** (1976), p. 186.
- [229] A. N. Kochubei, Math. Notes **17** (1975), p. 25.
- [230] M. Abramowitz & I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, éd. Dover, New York (1965).
- [231] M. Reed & B. Simon, *Functional analysis*, Vol 1 de *Methods of Modern Mathematical Physics*, Academic Press, New York (1972).
- [232] T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **66** (1997), p. 1066.
- [233] S. M. Bachilo, M. S. Strano, C. Kittrell, R. H. Hauge, R. E. Smalley & R. B. Weisman, Science **298** (2002), p. 2361.
- [234] G. D. Scholes, ACS Nano **2** (2008), p. 523.
- [235] M. Y. Sfeir, T. Beetz, F. Wang, L. Huang, X. M. H. Huang, M. Huang, J. Hone, S. O'Brien, J. A. Misewich, T. F. Heinz, L. Wu, Y. Zhu & L. E. Brus, Science **312** (2006), p. 554.

- [236] F. Wang, G. Dukovic, L. E. Brus & T. F. Heinz, *Science* **308** (2005), p. 838.
- [237] W. Hogervorst, E. A. J. M. Bente, R. J. de Graaff, C. R. W. Kawaije & W. Wassen, *Phys. Scripta* **T26** (1989), p. 9.
- [238] K. Harth, M. Raab & H. Hotop, *Z. Phys.D : Atoms, Molecules and Clusters* **7** (1987), p. 213.
- [239] M. Okano, Y. Kanemitsu, S. Chen, T. Mochizuki, M. Yoshita, H. Akiyama, L. N. Pfeiffer & K. W. West, *Phys. Rev. B* **86** (2012), p. 085312.
- [240] Voir Eq. 19.171 in C. Aslangul, *Mécanique quantique 2*, éd. de Boeck, mais j'ai normalisé par rapport à k plutôt que à E .

Bibliographie alphabétique

- [7] G. Abramovici. *Int. J. of Modern Phys. B*, **7** (1993), p. 2339.
- [8] G. Abramovici & Y. Avishai. *J. Phys. A : Math.*, **42**, p. 285302, 2009.
- [21] G. Abramovici, J.C. Nickel & M. Héritier. *Phys. Rev. B*, **72**, p. 045120, 2005.
- [22] G. Abramovici & M. Héritier. *Phys. Rev. B*, **75**, p. 094516, 2007.
- [34] G. Abramovici, N. Belmechri & M. Héritier. *Solid State Sciences*, **10**, p. 1790, 2008.
- [101] G. Abramovici. ‘*Non-orthogonal tight-binding new method for alloys, including Slater-Friedel screening corrections*’, *Solid State Commun.*, **109** (1998), p. 253.
- [102] G. Abramovici. ‘*Charge transfers in complex transition metal alloys (Ti₂Fe)*’, *EPJ B*, **6** (1998), p. 39.
- [153] G. Abramovici. Thèse de troisième cycle de l’Université Paris 6 (1990).
- [187] G. Abramovici, T. Vinatier & M. Héritier. *Solid State Commun.*, **169**, p. 42, 2013.
- [204] G. Abramovici & P. Kalugin. *Int. J. Geom. Methods Mod. Phys.*, **9**, p. 1250023, 2012.
- [224] G. Abramovici. ‘*Incompatible Coulomb hamiltonian extensions*’, *Sci. Rep.*, **10** (2020), p. 7280.
- [230] M. Abramowitz & I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, New York, 1965.
- [109] A. A. Abrikosov. *J. Low Temp. Phys.*, **53**, p. 359, 1983.
- [157] A. A. Abrikosov & E. A. Dorotheyev. *J. Low Temp. Phys.*, **46**, p. 53, 1982.
- [209] A. A. Abrikosov, L. P. Gor’kov & I. Ye. Dzyaloshinskii. *Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics*. Pergamon Press, Oxford, 1965.
- [114] D. S. Acker, R. J. Harder, W. R. Hertler, W. Malher, L. R. Melby, R. E. Benson & W. E. Mochel. *J. Am. Chem. Soc.*, **82**, p. 6408, 1960.
- [70] L. T. Adzhemyan, N. V. Antonov & A. N. Vasil’ev. *Phys. Usp.*, **39**, p. 1193, 1996.
- [110] H. Akamatu, H. Inokuchi & Y. Matsunaga. *Nature*, **173**, p. 168, 1954.

- [91] D. J. Amit. *Field Theory, the Renormalization Group & Critical Phenomena*. McGraw-Hill, New York, 1978. Scientific World depuis [1984].
- [232] T. Ando. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **66**, p. 1066, 1997.
- [43] M. Andrews. *Am. J. Phys.*, **44**, p. 1064, 1976.
- [119] A. Andrieux, P. M. Chaikin, C. Durore, D. Jérôme, C. Weyl, K. Bechgaard & J. R. Andersen. *J. Phys. France*, **40**, p. 1199, 1979.
- [125] A. Andrieux, D. Jérôme & K. Bechgaard. *J. Physique Lett.*, **42**, p. L87, 1982.
- [240] Voir Eq. 19.171 in C. Aslangul. *Mécanique quantique 2*, éd. de Boeck, mais j'ai normalisé par rapport à k plutôt que à E .
- [3] S. Aubry & P. Y. Le Daeron. *Physica D*, **8**, p. 381, 1983.
- [?] Lire à ce sujet l'excellent et nuancé : 'L'évaluation individuelle des chercheurs et des enseignants-chercheurs en sciences exactes et expérimentales', J.-F. Bach, D. Jérôme & C. Dumas. Rapport remis à Madame Valérie Pécresse, Ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche, le 8 juillet 2009.
- [27] S. Aubry. *Physica D*, **103**, p. 201, 1997.
- [28] S. Aubry, S. Flach, K. Kladko & E. Olbrich. *Phys. Rev. Lett.*, **76**, p. 1607, 1996.
- [9] Y. Avishai & Y. B. Band. *Phys. Rev. B*, **32** (1985), p. 2674.
- [233] S. M. Bachilo, M. S. Strano, C. Kittrell, R. H. Hauge, R. E. Smalley & R. B. Weisman. *Science*, **298**, p. 2361, 2002.
- [202] R. Balian & N. R. Werthamer. *Phys. Rev.*, **131**, p. 1553, 1963.
- [148] L. Balicas, K. Behnia, W. Kang, E. Canadell, P. Auban-Senzier, D. Jérôme & J. Fabre. *J. Phys. I France*, **4**, p. 1539, 1994.
- [154] J. Bardeen, L. N. Cooper & J. R. Schrieffer. *Phys. Rev.*, **106**, p. 163, 1957.
- [63] A. Bassetto, G. Nardelli & R. Soldati. *Yang-Mills theories in algebraic non-convariant gauges*. World Scientific, Singapour, 1991.
- [59] G. Battle. *Wavelets and renormalization*. Scientific World, 1999.
- [127] K. Bechgaard, K. Carneiro, M. Olsen, F. Rasmussen & C.S. Jacobsen. *Phys. Rev. Lett.*, **46**, p. 852, 1981.
- [147] K. Bechgaard, C. S. Jacobsen, K. Mortensen, H. J. Pedersen & N. Thorup. *Solid State Commun.* **33**, p. 1119, 1980.
- [134] J. G. Bednorz & K. A. Müller. *Z. Phys. B*, **64**, p. 189, 1986.
- [33] N. Belmechri, G. Abramovici & M. Héritier. *EPL*, **80**, p. 37004, 2007.
- [19] G. Benfatto & G. Gallavotti. *Renormalization group*, Physics Notes **1**, Princeton University, Princeton, NJ (1995), p. 1.

-
- [94] J. Binney, A. J. Fisher & M. E. Newman. *The Theory of Critical Phenomena : An Introduction to the Renormalization Group*. Clarence, Oxford, 1992.
- [174] B. Binz, D. Baeriswyl & B. Douçot. *Ann. Phys.*, **12**, p. 704, 2003.
- [120] S. Bouffard, M. Ribault, R. Brusetti, D. Jérôme & K. Bechgaard. *J. Phys. C : Solid State Phys.*, **15**, p. 2951, 1982.
- [99] C. Bourbonnais & L. G. Caron. *Int. J. Mod. Phys. B*, **5**, p. 1033, 1991. Disponible dans “The Hubbard model, recent results”, Series on Advances in Statistical Mechanics **7**, ed. M. Raseti, World Scientific Singapour, 1991.
- [228] V. M. Bruk. *Math. USSR Sb.* **29**, p. 186, 1976.
- [72] T. W. Burkhardt & J. M. J. Van Leeuwen. *Real-space renormalization*, éd. Springer, Berlin (1982).
- [198] L. I. Burlachkov, L. P. Gor’kov & A. G. Lebed. *Europhys. Lett.*, **4**, p. 941, 1987.
- [89] E. R. Caianiello. *Renormalization and invariance in quantum field theory*. Plenum, New York, 1974.
- [5] J. L. Cardy. Cambridge university, Cambridge, 1996.
- [139] R. J. Cava, B. Batlogg, J. J. Krajewski, R. Farrow, L. W. Rupp Jr., A. E. White, K. Short, W. F. Peck & K. Kometani. *Nature*, **332**, p. 814, 1988.
- [138] R. J. Cava, R. B. van Dover, B. Batlogg & E. A. Rietman. *Phys. Rev. Lett.*, **58**, p. 408, 1987.
- [162] P. M. Chaikin. *J. Phys. I France*, **6**, p. 1875, 1996.
- [121] R. Chevrel, M. Sergent & J. Prigent. *J. Solid State Chem.*, **3**, p. 515, 1971.
- [135] C. W. Chu, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang & Y. Q. Wang. *Phys. Rev. Lett.* **58**, p. 405, 1987.
- [178] A. V. Chubukov. *Phys. Rev. B* **48**, p 1097, 1993.
- [44] C. Cohen-Tanouji, B. Diu & F. Laloë. *Mécanique Quantique*. Hermann, Paris, 1988. première éd. [1973].
- [116] L. B. Coleman, M. J. Cohen, D. J. Sandman, F. G. Yamagishi, A. F. Garito & A. J. Heeger. *Solid State Commun.* **12**, p. 1125, 1973.
- [129] C. Colin, C. R. Pasquier & K. Bechgaard. *J. Phys. IV France*, **131**, p. 313, 2005.
- [6] J. C. Collins. Ed. Cambridge university, Cambridge, 1994.
- [83] J. T. Cox, D. A. Dawson & A. Greven. *Mutually catalytic super branching random walks : large finite systems and renormalization analysis*, Am. Math. Soc. Providence R. I., 2004.

- [97] R. J. Creswick, M. A. Farach & C. P. Poole. *Introduction to Renormalization Group Methods in Physics*. Wiley, New York, 1992.
- [107] D. E. Mc Cumber & B. I. Halperin. *Phys. Rev. B*, **1**, p. 1054, 1970.
- [50] A. Damascelli, Z. Hussain & Z.-X. Shen. *Rev. Mod. Phys.*, **75**, p. 473, 2003.
- [84] D. A. Dawson, A. Greven, F. den Hollander, R. Sun & J. M. Swart. *The renormalization transformation for two-type branching models*, In *Probab. Statist.*, **44**, Ann. Inst. H.a Poincaré, p. 1038, 2008.
- [184] C.A.R Sà de Melo. *J. Superconductivity*, **12**, p. 459, 1999.
- [219] C. R. de Oliveira & A. A. Verri. *Ann. Phys.*, **324**, p. 251, 2009.
- [132] A. de Visser, J. J. M. Frank, A. Menovsky & T. T. M. Palstra. *J. Phys. F : Met. Phys.*, **14**, p. L191, 1984.
- [124] M. Decroux, S. E. Lambert, M. S. Torikachvili, M. B. Maple, R. P. Guertin, L. D. Woolf & R. Baillif. *Phys. Rev. Lett.*, **52**, p. 1563, 1984.
- [190] P. Dhakal, H. Yoshino, J. I. Oh, K. Kikuchi & M. J. Naughton. *Phys. Rev. B*, **83**, p. 014505, 2011.
- [207] N. Dupuis. *Phys. Rev. B*, **50**, p. 9607, 1994.
- [176] N. Dupuis. *Eur. Phys. J. B*, **48**, p. 319., 2005.
- [12] S. Dusuel, F. V. de Abreu & B. Douçot. *Phys. Rev. B*, **65**, p. 094505, 2002.
- [221] R. J. Elliott & R. Loudon. *J. Phys. Chem. Solids*, **15**, p. 196, 1960.
- [213] P.G. Evans, E.D. Isaacs, G. Aeppli, Z. Cai & B. Lai. *Science*, **295**, p. 1042, 2002.
- [20] M. Fabrizio. *Phys. Rev. B*, **48**, p. 15838, 1993.
- [23] M. Fabrizio & A. Parola. *Phys. Rev. Lett.*, **70**, p. 226, 1993.
- [212] E. Fawcett. *Rev. Mod. Phys.*, **60**, p. 209, 1988.
- [71] J. Feldman, H. Knörrer & E. Trubowitz. *Fermionic Functional Integrals and the Renormalization Group*. American Mathematical Society, 2002.
- [117] J. Ferraris, D. O. Cowan, W. Walatka & J. H. Perlstein. *J. Am. Chem. Soc.*, **95**, p. 948, 1973.
- [218] W. Fischer, H. Leschke & P. Mueller. *J. Math. Phys.*, **36**, p. 2313, 1995.
- [123] O. Fischer, A. Treyvaud, R. Chevrel & M. Sergent. *Solid State Commun.*, **17**, p. 721, 1975.
- [30] H. Fröhlich. *Phys. Rev.*, **79**, p. 845, 1950.
- [31] Fröhlich. Theory of superconductivity. *Proc. Royal Soc. of London A*, **223**, p. 296, 1954.
- [35] P. Fulde & R. A. Ferrell. *Phys. Rev.*, **135**, p. A550, 1964.

- [175] Y. Fuseya & Y. Suzumura. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **74**, p. 1263, 2005.
- [111] J. R. Gavaler. *Appl. Phys. Lett.*, **23**, p. 480, 1973.
- [222] F. Gesztesy. *J. Phys. A : Math. Gen.*, **13**, p. 867, 1980.
- [166] T. Giamarchi & H. J. Schulz. *Phys. Rev. B*, **37**, p. 325, 1988.
- [167] T. Giamarchi & H. J. Schulz. *Europhys. Lett.*, **3**, p. 1287, 1987.
- [168] T. Giamarchi & H. J. Schulz. *J. Phys. France*, **49**, p. 819, 1988.
- [223] A. N. Gordeyev & S. C. Chhajlany. *J. Phys. A : Math. Gen.*, **30**, p. 6893, 1997.
- [151] L. P. Gor'kov & D. Jérôme. *J. Physique Lett.*, **46**, p. L643, 1985.
- [159] L. P. Gorkov & A. G. Lebed. *J. Physique Lett.*, **45**, p. L433, 1984.
- [188] L. P. Gor'kov & E. I. Rashba. *Int. J. Mod. Phys. B*, **16**, p. 3184, 2002.
- [150] R. L. Greene & E. M. Engler. *Phys. Rev. Lett.*, **45**, p. 1587, 1980.
- [60] D. J. Gross, A. Neveu, J. Scherk & J. H. Schwarz. *Phys. Rev. D*, **2** (1970), p. 697.
- [61] D. J. Gross. *Applications of the renormalization group to high-energy physics*, cours de l'École d'été de Physique Théorique XX-VIII, Les Houches, publié par R. Balian & J. Zinn-Justin, éd. North-Holland/World Scientific (1975).
- [142] R. C. Haddon, A. F. Hebard, M. J. Rosseinsky, D. W. Murphy, S. J. Duclos, K. B. Lyons, B. Miller, J. M. Rosamilia, R. M. Fleming, A. R. Kortan, S. H. Glarum, A. V. Makhija, A. J. Muller, R. H. Eick, S. M. Zahurak, R. Tycko, G. Dabbagh & F. A. Thiel. *Nature*, **347**, p. 354, 1991.
- [42] L. K. Haines & D. H. Roberts. *Am. J. Phys.*, **37**, p. 1145, 1969.
- [18] C. Halboth. PhD thesis, RWTH Aachen, 1999.
- [113] G. F. Hardy & J. K. Hulm. *Phys. Rev.*, **93**, p. 1004, 1954.
- [238] K. Harth, M. Raab & H. Hotop. *Z. Phys. D : Atoms, Molecules and Clusters*, **7**, p. 213, 1987.
- [103] R. Haydock. *Solid State Phys.*, **35**, p. 215, 1980.
- [141] A. F. Hebard, M. J. Rosseinsky, R. C. Haddon, D. W. Murphy, S. H. Glarum, T. T. Palstra, A. P. Ramirez & A. R. Kortan. *Nature*, **350**, p. 600, 1991.
- [88] K. Hepp. *Théorie de la Renormalisation*. Springer, Berlin, 1969.
- [98] I. Herbut. *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, éd. J. Cardy, Cambridge university, Cambridge, 2007.
- [237] W. Hogervorst, E. A. J. M. Bente, R. J. de Graaff, C. R. W. Kahaije & W. Wassen. *Phys. Scripta*, **T26**, p. 9, 1989.
- [173] C. Honerkamp & M. Salmhofer. *Phys. Rev. B*, **63**, p. 035109, 2001.

- [16] C. Honerkamp. Diss., *Naturwissenschaften* ETH Zürich, Nr. 13868 (2000), eth :23730.
- [161] M. Héritier, G. Montambaux & P. Lederer. *J. Physique Lett.*, **45**, p. L943.
- [54] S. Hufner, M. A. Hossain, A. Damascelli & G. A. Sawatzky. *Rep. Prog. Phys.*, **71**, p. 062501, 2000.
- [163] J. O. Indekeu, M. P. Nightingale & W. V. Wang. *Phys. Rev. B*, **34**, p. 330, 1986.
- [87] R. L. Ingraham. *Renormalization theory of quantum field theory[sic] with a cut-off*. Gordon, New York, 1967.
- [65] C. Itzykson & J.-B. Zuber. *Quantum field theory*. McGraw-Hill International Book, Paris, 1980. New York [1985].
- [149] C. S. Jacobsen, K. Mortensen, M. Weger & K. Bechgaard. *Solid State Commun.*, **38**, p. 423, 1981.
- [81] Y. Jiang. *Renormalization on one-dimensional folding maps*, International Conference on Dynamical Systems and Chaos, éd. Scientific World (1995).
- [200] N. Joo, P. Auban-Senzier, C. R. Pasquier, S. Yonezawa, R. Higashinaka, Y. Maeno, S. Haddad, S. Charfi-Kaddour, M. Héritier, K. Bechgaard & D. Jérôme. *Eur. Phys. J. B*, **52**, p. 337, 2006.
- [126] D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault & K. Bechgaard. *J. Physique Lett.*, **41**, p. L95, 1980.
- [155] D. Jérôme & H. J. Schulz. *Adv. Phys.*, **31**, p. 299, 1982.
- [78] L. F. Kadanoff. *Statics, Dynamics and Renormalization*. Statistical Physics. Scientific World, Singapour, 2000.
- [86] L. F. Kadanoff & G. Baym. *Quantum Statistical Mechanics*. Benjamin-Cummings Publ. Cie, Londres, 1962.
- [93] J. I. Kapusta. *Finite-temperature Field Theory*. Cambridge University, Cambridge, 1989.
- [38] A. A. Katanin & A. P. Kampf. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, p. 106406, 2004.
- [229] A. N. Kochubei. *Math. Notes*, **17**, p. 25, 1975.
- [177] W. Kohn & J. M. Luttinger. *Phys. Rev.*, **118**, p. 41, 1960.
- [164] M. Kosterlitz. *J. Phys. C*, **7**, p. 1046, 1974.
- [48] P. Kourilsky. *Santé et développement durable*, Conférences du Collège de France à Aubervilliers, 8 juin 2009.
- [108] L. Kramer & A. Baratoff. *Phys. Rev. Lett.*, **38**, p. 518, 1977.
- [2] T. S. Kuhn. *La structure des révolutions scientifiques*. Champs Flammarion, 1983. [1970, 1962].
- [211] L. D. Landau & E. M. Lifshitz. *Statistical Physics*, Butterworth-Heinemann, 1968.

- [106] J. S. Langer & W. Ambegaokar. *Phys. Rev.*, **164**, p. 498, 1967.
- [36] A. I. Larkin & Y. N. Ovchinnikov. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **47**, p. 1136.
- [73] D. A. Lavis & G. M. Bell. *Statistical Mechanics of Lattice Systems 2 : Exact, Series and Renormalization Group Methods*, éd. Springer, Berlin, Paris, 1999.
- [158] A. G. Lebed. *Sov. Phys. JETP*, **62**, p. 595, 1985.
- [160] A. G. Lebed. *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **43**, p. 137, 1986. *JETP Lett.* **43** [1986], p. 174.
- [182] A. G. Lebed. *Phys. Rev. B*, **59**, p. R721, 1999.
- [189] A. G. Lebed. *J. Low Temp. Phys.*, **142**, p. 173, 2006.
- [195] A. G. Lebed. *Phys. Rev. Lett.*, **107**, p. 087004, 2011.
- [183] A. G. Lebed, K. Machida & M. Ozaki. *Phys Rev. B*, **62**, p. R795, 2000.
- [196] A. G. Lebed & S. Wu. *Series in Material Sciences* **110**, p. 643. Springer, 2008.
- [181] A. G. Lebed & K. Yamaji. *Phys. Rev. Lett.*, **80**, p. 2697, 1998.
- [208] J'ai pu en discuter avec P. Lecheminant, qui m'a dit avoir rencontré une pathologie analogue avec la méthode de Bogoliubov.
- [192] I. J. Lee, S. E. Brown, W. G. Clark, M. J. Strouse, M. J. Naughton, W. Kang & P. M. Chaikin. *Phys. Rev. Lett.* **88**, p. 017004, 2001.
- [191] I. J. Lee, P. M. Chaikin & M. J. Naughton. *Phys. Rev. B*, **62**, p. R14669, 2000.
- [193] I. J. Lee, D. S. Chow, W. G. Clark, M. J. Strouse, M. J. Naughton, P. M. Chaikin & S. E. Brown. *Phys. Rev. B*, **68**, p. 092510.
- [206] I. J. Lee, A. P. Hope, M. J. Leone & M. J. Naughton. *Synthetic Metals*, **70**, p. 747, 1995.
- [56] H. Lehmann. *Nuovo Cimento*, **11**, p. 342, 1954.
- [85] A. Lesne. *Méthodes de renormalisation*, éd. P. Collet, Eyrolles, Paris, 1996.
- [45] J.-M. Levy-Leblond. *Mettre la science en culture*. Anais, 1986.
- [105] W. A. Little. *Phys. Rev.*, **134**, p. A1416, 1964.
- [156] W. A. Little. *Sci. Am.*, **212**, v. 2, p. 216, 1965.
- [53] R. H. Liu, G. Wu, T. Wu, D. F. Fang, H. Chen, S. Y. Li, K. Liu, Y. L. Xie, X. F. Wang, R. L. Yang, L. Ding, C. He, D. L. Feng & X. H. Chen. *Phys. Rev. Lett.*, **101**, p. 087001, 2008.
- [104] F. London. *J. Chem. Phys.*, **5**, p. 837, 1937.
- [217] R. Loudon. *Am. J. Phys.* **27**, p. 649, 1959.
- [201] K. Machida. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **50**, p. 2195, 1981.
- [69] W. D. McComb, W. Roberts & A. G. Watt. *Phys. Rev. A*, **45**, p. 3507, 1992.

- [76] R. S. MacKay. *Renormalisation in Area-preserving Maps*. Scientific World, Singapour, 1993.
- [77] C. T. McMullen. *Complex Dynamics and Renormalization*. Princeton University, New York, 1996.
- [144] H. Maeda, Y. Tanaka, M. Fukutomi & T. Asano. *Jpn. J. Appl. Phys.* **27**, p. L209, 1988.
- [143] Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, J. G. Bednorz & F. Lichtenberg. *Nature*, **372**, p. 532, 1994.
- [26] J. L. Marín & S. Aubry. *Nonlinearity*, **9**, p. 1501, 1996.
- [80] V. Mastropietro. *Renormalization*. World Scientific, Singapour, 2008.
- [4] T. Matsubara. *Prog. Theor. Phys.*, **14**, p. 351, 1955.
- [225] V. S. Mineev. *Theor. Math. Phys.*, **140**, p. 1157, 2004.
- [55] J. W. Negele & H. Orland. *Quantum Many-particle system*. Advanced Books Classics. Westview Press, New York.
- [165] D. R. Nelson & B. I. Halperin. *Phys. Rev. B*, **19**, p. 2457, 1979.
- [40] J. C. Nickel. Thèse de troisième cycle de l'Université Paris 11 (2004).
- [180] Communication privé de C. Nickel. Ce calcul n'a apparamment jamais été publié.
- [51] M. R. Norman, D. Pines & C. Kallin. *Adv. Phys.*, **54**, p. 715, 2005.
- [239] M. Okano, Y. Kanemitsu¹, S. Chen, T. Mochizuki, M. Yoshita, H. Akiyama, L. N. Pfeiffer & K. W. West. *Phys. Rev. B*, **86**, p. 085312, 2012.
- [133] H. R. Ott, H. Rudigier, Z. Fisk & J. L. Smith. *Phys. Rev. Lett.*, **50**, p. 1595, 1983.
- [128] S. S. Parkin, M. Ribault, D. Jérôme & K. Bechgaard. *J. Phys. C*, **14**, p. L445, 1981.
- [152] R. Peierls. *Quantum theory of solids*. Oxford University Press, Oxford, 1955.
- [74] I. Peschel. *Density-matrix renormalization - a new numerical method in physics.*, Springer, New York, 1999.
- [82] O. Piguet & S. P. Sorella. *Algebraic Renormalization*. Springer Verlag, New York, 1995.
- [214] E. Pinsolle, V. L. R. Jacques, S. Ravy, G. Abramovici & D. Le Bolloc'h. *Phys. Rev. B*, **89**, p. 245127, 2014.
- [210] L. P. Pitaevskii & E. M. Lifshitz. *Statistical Physics ; Part 2*. Butterworth-Heinemann, 1980.
- [64] S. Pokorski. *Gauge Field Theories*. Monographs on Mathematical Physics. Cambridge, 2000.
- [95] J. Polchinski. hep-th/9210046.

- [169] J. Polchinski. *Nucl.Phys. B*, **231**, p. 269, 1984.
- [1] K. Popper. *Logic of Scientific Discovery*, trad. anglaise, éd. Hutchinson, Penn, Buckinghamshire, 1944, de '*Logik der Forschung : zur Erkenntnistheorie der modernen Naturwissenschaft*', éd. Springer, Vienne, 1935 ; la première traduction française éd. Payot, 1973.
- [199] B. J. Powell. *J. Phys. : condens. Matter*, **20**, p. 345234, 2008.
- [231] M. Reed & B. Simon. *Functional analysis*, Vol 1 de *Methods of Modern Mathematical Physics*, Academic Press, New York, 1972.
- [68] L. E. Reichl. *A Modern Course in Statistical Physics*. University of Texas, Austin, 1980. rééd. Wiley & son, New York [1998].
- [79] V. Rivasseau. *La renormalisation*. Séminaire Poincaré, éd. V. Rivasseau, G. Gallavotti & J. Zinn-Justin, É. Polytechnique, 2002.
- [37] D. Rohe & W. Metzner. *Phys. Rev. B*, **71**, p. 115116, 2005.
- [205] G. Roux, S. R. White, S. Capponi & D. PoilBlanc. *Phys. Rev. Lett.*, **97**, p. 087207, 2006.
- [15] M. Salmhofer. *Renormalization. An introduction*. Springer, Berlin, 1999.
- [17] M. Salmhofer & C. Honerkamp. *Prog. Theor. Phys.*, **105**, p. 1, 2001.
- [46] Jacques Salomé. *Heureux qui communique*. Albin Michel, 2003.
- [57] B.-J. Schaefer & H. J. Pirner. *Renormalization group flow and equation of state of quarks and mesons*. IKDA, 1999.
- [58] L. Schäfer. *Excluded Volume Effects in Polymer Solutions, as Explained by the Renormalization Group*. Springer, Berlin, 1999.
- [234] G. D. Scholes. *ACS Nano*, **2**, p. 523, 2008.
- [179] H. J. Schulz. *Phys. Rev. B*, **53**, p. R2959, 1996.
- [122] M. Sergent & R. Chevrel. *J. Solid State Chem.*, **6**, p. 433, 1973.
- [29] Émmanuel Sérié. Thèse de troisième cycle, Université Pierre & Marie Curie.
- [235] M. Y. Sfeir, T. Beetz, F. Wang, L. Huang, X. M. H. Huang, M. Huang, J. Hone, S. O'Brien, J. A. Misewich, T. F. Heinz, L. Wu, Y. Zhu & L. E. Brus. *Science*, **312**, p. 554, 2006.
- [96] R. Shankar. *Rev. Mod. Phys.*, **66**, p. 129, 1993.
- [186] H. Shimahara. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **69**, p. 1966, 2000.
- [194] J. Shinagawa, Y. Kurosaki, F. Zhang, C. Parker, S. E. Brown, D. Jérôme, K. Bechgaard & J. B. Christensen. *Phys. Rev. Lett.*, **98**, p. 147002, 2007.
- [203] M. Sigrist. Lectures on the physics of highly correlated electron systems **IX**. volume 789 of *AIP Conf. Proc.*, p. 165, 2005.

- [75] V. A. Smirnov. *Renormalization and asymptotic expansions*. Birkhäuser Verl., Basel, 1991.
- [39] J. Sólyom. *Advances in Physics*, **28** (1979), p. 201.
- [52] G. Sordi, K. Haule & A.-M. S. Tremblay. *Phys. Rev. Lett.*, **104**, p. 226402., 2010.
- [130] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Lieke, D. Meschede, W. Franz & H. Schäfer. *Phys. Rev. Lett.* **43**, p. 1892, 1979.
- [131] G. R. Stewart, Z. Fisk, J. O. Willis & J. L. Smith. *Phys. Rev. Lett.* **52**, p. 679, 1984.
- [145] M. Takano, J. Takada, K. Oda, H. Kitaguchi, Y. Miura, Y. Ikeda, Y. Tomii & H. Mazaki. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **27**, p. L1041, 1988.
- [197] M. Takigawa, H. Yasuoka & G. Saito. *J. Phys. Soc. Jpn*, **56**, p. 873, 1987.
- [140] Z. K. Tang, L. Zhang, N. Wang, X. X. Zhang and G. H. Wen, G. D. Li, J. N. Wang & C. T. Chan. *Science*, **29**, p. 2462, 2001.
- [112] L. R. Testardi, J. H. Wernick & W. A. Royer. *Solid State Commun.* **15**, p. 1, 1974.
- [118] G. A. Thomas, D. E. Schafer, F. Wudl, P. M. Horn, D. Rimai, J. W. Cook, D. A. Glocker, M. J. Skove, C. W. Chu, R. P. Groff, R. C. Wheland J. L. Gillson, L. R. Melby, M. B. Salamon, R. A. Craven, G. De Pasquali, A. N. Bloch, D. O. Cowan, V. V. Walatka, R. E. Pyle, R. Gemmer, T. O. Poehler, G. R. Johnson, M. G. Miles, J. D. Wilson, J. P. Ferraris, T. F. Finnegan, R. J. Warmack, V. F. Raaen & D. Jérôme. *Phys. Rev. B*, **13**, p. 5105, 1976.
- [90] G. Toulouse & P. Pfeuty. *Introduction au groupe de renormalisation et à ses applications*, éd. Université Paris-Sud, Orsay & Presses Universitaires de Grenoble, Saint-Martin d'Hères, 1975 [traduction anglaise : *'Introduction to the renormalization group and to critical phenomena'*, éd. Wiley, New York, 1977].
- [226] I. Tsutsui, T. Fülöp & T. Cheon. *J. Phys. A : Math. Gen.*, **36**, p. 275, 2003.
- [136] S. Uchida, H. Takagi, K. Kitazawa & S. Tanaka. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **26**, p. L1, 1987.
- [146] H. Urayama, H. Yamochi, G. Saito, K. Nozawa, T. Sugano, M. Kinoshita, S. Sato, K. Oshima, A. Kawamoto & J. Tanaka. *Chem. Lett.*, **17**, p. 55, 1988.
- [62] D. I. Uzunov. *Introduction to the theory of critical phenomena*. Scientific World, Singapour, 1993.
- [185] C. D. Valcarrella & C.A.R. Sà de Melo. *Physica C*, **341-348**, p. 293, 2000.

-
- [67] A. N. Vasil'ev. *The Field Theoretic Renormalization Group in Critical Behavior Theory and Stochastic Dynamics*. Chapman & Hall/CRC, 2004.
- [220] V. S. Vrkljan. *Z. Phys.*, **52**, p. 735, 1929.
- [49] D. J. C. Walker, A. P. Mackenzie & J. R. Cooper. *Phys. Rev. B*, **51**, p. 15653, 1998.
- [236] F. Wang, G. Dukovic, L. E. Brus & T. F. Heinz. *Science*, **308**, p. 838, 838.
- [172] C. Wetterich. *Phys. Lett. B*, **301**, p. 90, 1993.
- [10] K. G. Wilson. *Phys. Rev. B*, **4**, p. 3174, 1971.
- [11] K. G. Wilson. *Rev. Mod. Phys.*, **47**, p. 773, 1975.
- [137] M. K. Wu, J. R. Ashburn, C. J. Torng, P. H. Hor, R. L. Meng, L. Gao, Z. J. Huang, Y. Q. Wang & C. W. Chu. *Phys. Rev. Lett.*, **58**, p. 908, 1987.
- [115] F. Wudl, G. M. Smith & E. J. Hufnagel. *J. Chem. Soc. D : Chem. Commun.*, **1**, p. 1453, 1970.
- [24] A. Xu, G. Wang, S. Chen & B. Hu. *Phys. Rev. B*, **58**, p. 721, 1998.
- [216] F. L. Yost, J. A. Wheeler & G. Breit. *Phys. Rev.*, **49**, p. 174, 1936.
- [215] C. Y. Young & J.B. Sokoloff. *J. Phys. F : Metal Phys.*, **4**, p. 1304, 1974.
- [171] D. Zanchi. *Europhys. Lett.*, **55**, p. 376, 2001.
- [13] D. Zanchi & H. J. Schulz. *Phys. Rev. B*, **54**, p. 9509, 1996.
- [170] D. Zanchi & H. J. Schulz. *Phys. Rev. B*, **61**, p. 13609, 2000.
- [14] D. Zanchi & H. J. Schulz. *Europhys. Lett.*, **44**, p. 235, 1998.
- [92] J. Zinn-justin. *Quantum field theory and critical phenomena*. Clarence, Oxford, 1989. Oxford university Press, New York.
- [66] J. Zinn-justin. *Phase transitions and renormalization group*. Oxford University, New York, 2007.

Annexe

Liste des articles

- Renormalization Group calculations with k_{\parallel} dependent couplings in a ladder
174
- Erratum du précédent 194
- Functional Renormalization Group calculation of the Fermi surface of a spin-
ladder 196
- Magnetic-fieldinduced singlet-triplet phase transition in quasideimensional
organic superconductors 203
- Singlet/triplet transition in a two-band organic superconductor 209
- Coexistent symmetries in a two-band organic superconductor 213
- The One dimension Coulomb problem 217
- Incompatible Coulomb hamiltonian extensions 246

Renormalization-group calculations with k_{\parallel} -dependent couplings in a ladder

G. Abramovici, J. C. Nickel, and M. Héritier

Laboratoire de Physique des Solides, associé, au C.N.R.S., Université de Paris Sud, Centre d'Orsay, 91405 Orsay, France

(Received 28 February 2005; published 14 July 2005)

We calculate the phase diagram of a ladder system, with a Hubbard interaction and an interchain coupling t_{\perp} . We use a renormalization-group method, in a one loop expansion, introducing an original method to include k_{\parallel} dependence of couplings. We also classify the order parameters corresponding to ladder instabilities. We obtain different results, depending on whether we include k_{\parallel} dependence or not. When we do so, we observe a region with large antiferromagnetic fluctuations, in the vicinity of small t_{\perp} , followed by a superconducting region with a simultaneous divergence of the spin density waves channel. We also investigate the effect of a nonlocal backward interchain scattering: we observe, on one hand, the suppression of singlet superconductivity and of spin density waves, and, on the other hand, the increase of charge density waves and, for some values of t_{\perp} , of triplet superconductivity. Our results eventually show that k_{\parallel} is an influential variable in the renormalization-group flow, for this kind of system.

DOI: 10.1103/PhysRevB.72.045120

PACS number(s): 71.10.Li, 71.10.Pm, 71.10.Fd, 74.20.-z

I. INTRODUCTION

The physics of ladder systems remains a source of considerable interest. In the past decades, many conductors were found, with anisotropic two-leg electronic structure, such as SrCu_2O_3 (Ref. 1) or $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_2\text{O}_{41}$ (Ref. 2) compounds. The structure of $\text{La}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$ (Ref. 3) can also be analyzed as weakly coupled ladders, and is therefore very similar. The phase diagram of these compounds is very rich; it is now well established that these systems behave like Luttinger liquids at high temperature, while they can behave like Fermi liquids when T decreases; they exhibit superconducting (SC) phases of type II, which can also be mixed with antiferromagnetic fluctuations. In some case, the SC phase is found to be spin-gapped, while spinless phases are also reported.⁴

From a theoretical point of view, the ladder (or two-coupled chain) model is the simplest quasi-one-dimensional one. Although all its properties are not entirely elucidated, it has been used by many authors as a toy model, to build and explore new approaches (two-leaf dispersion models calculated by a Kadanoff-Wilson renormalization method⁵ or by a bosonization method;⁶ transition between commensurate and incommensurate filling,⁷ in particular close to the half-filling case;^{8,9} dimensional transition,¹⁰ etc.). These systems have been intensively used to investigate nonconventional SC process (with singlet¹¹⁻¹³ or triplet¹⁴ pairing).

This paper is devoted to the study of a ladder model, with a Hubbard interaction (U is the Hubbard constant) and an interband coupling (t_{\perp} is the interaction factor), at zero temperature. We investigate the phase diagram in the range of parameter $0 \leq U \leq 8\pi t_{\parallel} \eta$ and suppose that the electronic filling η is incommensurate. Although there is yet no evidence for the existence of compounds lying in this range of parameter, we have hopes that some of these will indeed be found and confirm the theoretical predictions that we present here.

The phase diagram of this system has been partially studied by several authors. In particular, Fabrizio has used a renormalization group (RG) method, in a two-loop expansion from the Fermi liquid solution.¹² He includes interband backward scattering g_b , and, within the range of parameter

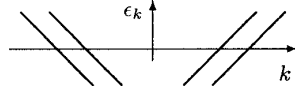
that we have investigated, finds a SC phase, named “phase I,” which he clearly points out not to be singlet s , although he did not elucidate the symmetry of the condensate. In his calculations, the RG flow of susceptibilities shows several divergences: the spin density wave (SDW) channel coexists with the superconducting one. This author did alternatively cut the flow before the divergences and bosonize the effective Hamiltonian; then, SDW modes disappear and are replaced by charge density wave (CDW) instabilities.

These results are more or less compatible with that of other methods, using a one-loop expansion,^{15,16} or bosonizing the Hamiltonian of the bare system¹⁷⁻²⁰ (see also Ref. 13), or using quantum Monte Carlo method.²¹ These authors generally find a singlet superconducting condensate of symmetry d , which coexists with SDW or CDW instabilities. This complicated phase has also been related to the RVB phase.²² One of the central questions is whether the SC modes are spin-gapped or not, and receives various and even contradictory answers. Using a two-loop expansion, Kishine²³ observes a spin gap, which is suppressed when $t_{\perp} \rightarrow 0$. This is also the result found with a density matrix RG method by Park.²⁴

We give a new insight into these questions, using a RG method, in a perturbative expansion in U . This kind of method has been used in many recent and very complete works.²⁵⁻²⁷ Here, we calculate RG equations with one loop diagrams, including g_b couplings, as in Ref. 12, as well as all parallel momentum dependence.

Let us emphasize that, although we begin from the Fermi liquid solution, we find a phase with only SDW fluctuations, for small enough interband interaction $t_{\perp} \leq t_{\perp c}(U)$, contrary to all previous results obtained by RG methods, which always indicate SC instabilities as soon as $t_{\perp} \neq 0$ (see for instance Lin *et al.*¹⁵). However, this phase is different from the one-dimension limit. This is a very remarkable result, since k_{\parallel} is known to be an irrelevant variable of the RG flow.²⁸ However, we will prove in this paper that it is indeed influential in the very case of a ladder.

When t_{\perp} is increased, we observe a transition at $t_{\perp c}$ to a superconducting phase, where singlet SC instabilities of

FIG. 1. The 2-band dispersion in \parallel direction.

symmetry d coexist with SDW ones. This phase is found by many authors (see Refs. 12, 15, and 16 and other articles already quoted).

Recently, Bourbonnais *et al.*^{29,30} have examined the effect of interchain Coulomb interactions for an infinite number of coupled chains, using RG method. Interchain backward scattering was found to enhance CDW fluctuations and favor triplet instead of singlet SC. Here we investigated the effect of a Coulomb interchain backward interaction C_{back} for the ladder problem. We find that this interaction favors triplet SC instabilities instead of singlet ones and CDW instabilities instead of SDW ones in a ladder system too. Indeed, both the singlet SC and SDW instabilities (if any) are suppressed when C_{back} is increased, and we observe triplet SC as well as CDW instabilities. The triplet SC existence region is however very narrow and lies inside the region $t_{\perp} \geq t_{\perp c}(U)$. For large values of C_{back} ($C_{\text{back}} \sim U$), CDW is always dominant; this is consistent with what Lin *et al.* find.¹⁵

On the contrary, when a Coulombian interchain forward interaction C_{for} is added, all SC instabilities are depressed, and we only observe SDW and CDW fluctuations.

We also present a detailed classification of the pair operators in a ladder, which are connected to the order parameters. It proves a very powerful tool in these sophisticated RG methods.

So, we will first give a short description of the model (in Sec. II), then present the classification of the pair operators (in Sec. III, the symmetries are explained in Appendix C), then we explain the RG formulation and techniques that are used here (in Sec. IV). Results concerning only initially local interactions are presented in Sec. V, while those concerning the influence of additional interchain interactions are given in Sec. VI. In Sec. VII we conclude.

II. MODEL

The Hubbard model of a ladder has been studied in various articles. We give here a brief presentation of this model (see Refs. 12 or 31 with similar notations).

A. Kinetic Hamiltonian

1. The model in a 1D representation

The dispersion curve separates into two bands (0 and π), so the Fermi surface splits into four points ($-k_{f0}$, $-k_{f\pi}$, $k_{f\pi}$, k_{f0} in the \parallel direction, + corresponds to right moving particles and - to left moving ones). The bands are linearized around the Fermi vectors³² with a single Fermi velocity v_f (cf. Fig. 1). We write R the right moving particles and L the left moving ones. Then, the kinetic Hamiltonian writes

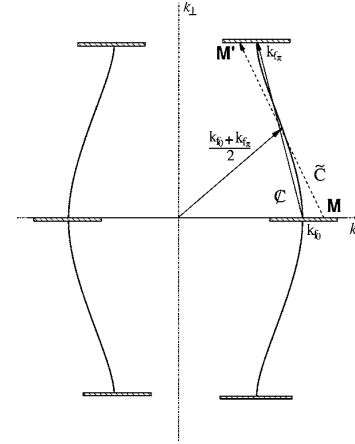


FIG. 2. Two-dimensional representation of the states. The physical space, for a ladder, is restricted to the hatched bands at $k_{\perp} = 0$ and $k_{\perp} = \pm\pi/b$. The curves correspond to the Fermi surface of a 2D system, with an infinite number of chains. The four Fermi points, in the ladder system, are the intersections of these curves with the physical bands. The symmetry \tilde{C} that maps point M onto M' is the point symmetry around the affine point, corresponding to $(k_{f0} + k_{f\pi})/2$. The symmetry \mathcal{C} is the translation by the vector $k_{f0} - k_{f\pi}$, which is also represented by a plain arrow.

$$\begin{aligned}
 H_{\text{cin}} = & \sum_{\sigma} v_f \left(\sum_K (K - k_{f0}) R_{0\sigma}^{\dagger}(K) R_{0\sigma}(K) \right. \\
 & + \sum_K (K - k_{f\pi}) R_{\pi\sigma}^{\dagger}(K) R_{\pi\sigma}(K) \\
 & + \sum_K (K + k_{f0}) L_{0\sigma}^{\dagger}(K) L_{0\sigma}(K) \\
 & \left. + \sum_K (K + k_{f\pi}) L_{\pi\sigma}^{\dagger}(K) L_{\pi\sigma}(K) \right). \quad (1)
 \end{aligned}$$

We define the Fermi surface gap $\Delta k_f = k_{f0} - k_{f\pi}$. One then gets $\Delta k_f = 2t_{\perp}/v_f$. The discretization step in \parallel direction is a , and the reciprocal vector in this direction is defined modulo $2\pi/a$. The distance between the chains in \perp direction is b .

In order to give a clear representation of all instability processes that will be discussed afterwards, it is worth showing how this model can be embedded in a 2D representation, which we present now.

2. The model in a 2D representation

The general 2D dispersion law writes

$$\epsilon(\mathbf{k}) = -2t_{\parallel} \cos(k_{\parallel}a) - 2t_{\perp} \cos(k_{\perp}b)$$

as represented in Fig. 2; if one writes approximately $k_f \approx k_{f0} \approx k_{f\pi}$, one gets $v_f \approx 2at_{\parallel} \sin(k_f a)$. In real space, y_{\parallel} corresponds to the axis along the chains, and y_{\perp} takes only two values, $y_{\perp} = \pm 1$, corresponding to which chain one refers to. The \parallel axis is then discretized, $y_{\parallel} = 1 \dots N$, where $4N$ is the total number of states. The Fourier transformation from real space functions to reciprocal space ones is detailed in Appendix D.

From $y_{\perp} = \pm 1$, one gets $k_{\perp} = 0$ or $\pm\pi/b$ ($k_{\perp} = \pi/b$ and $k_{\perp} = -\pi/b$ are identified). Therefore, the physical states are limited to the four horizontal bands, shown in Fig. 2, which are centered on each of the four Fermi points. The two bands centered on $(\pm k_{f0}, 0)$ are the left and right bands 0 (L_0 or R_0), the two bands centered on $(\pm k_{f\pi}, \pi/b)$ are the left and right bands π (L_{π} or R_{π}).

B. Interaction Hamiltonian

The most general interaction Hamiltonian can be written, with $L_{\mathbf{k}\sigma} = L_{0\sigma}(K)$ for $\mathbf{k} = (K, 0)$, $L_{\mathbf{k}\sigma} = L_{\pi\sigma}(K)$ for $\mathbf{k} = (K, \pi)$ and idem for R ,

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} = & \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \mathcal{G}_1(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2) \\ & \times R_{\mathbf{k}'_1 \sigma_1}^{\dagger} L_{\mathbf{k}'_2 \sigma_2}^{\dagger} R_{\mathbf{k}_1 \sigma_1} L_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} + \mathcal{G}_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2) \\ & \times R_{\mathbf{k}'_1 \sigma_1}^{\dagger} L_{\mathbf{k}'_2 \sigma_2}^{\dagger} L_{\mathbf{k}_2 \sigma_2} R_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}, \end{aligned} \quad (2)$$

where \mathcal{G}_{α} is the two-particle coupling, and we have used the g -ology representation. We do not include umklapp interactions \mathcal{G}_3 ($LLRR$ or $RRLL$) nor \mathcal{G}_4 terms ($LLLL$ or $RRRR$). We will alternatively use the singlet-triplet representation, where α takes values $\alpha = s, t$, or the Charge-Spin representation, where $\alpha = C, S$. If not necessary, we will omit the spin dependence α . Equations (A1) and (A2) give, in Appendix A 1, the usual relations between these different representations.

We distinguish, following Fabrizio,¹² g_0 , which corresponds to $R_0^{\dagger} L_0^{\dagger} L_0 R_0$ process, $g_{\pi} (\leftrightarrow R_{\pi}^{\dagger} L_{\pi}^{\dagger} L_{\pi} R_{\pi})$, $g_{f0} (\leftrightarrow R_0^{\dagger} L_{\pi}^{\dagger} L_{\pi} R_0)$, $g_{f\pi} (\leftrightarrow R_{\pi}^{\dagger} L_0^{\dagger} L_0 R_{\pi})$, $g_{i0} (\leftrightarrow R_0^{\dagger} L_0^{\dagger} L_{\pi} R_0)$, $g_{i\pi} (\leftrightarrow R_{\pi}^{\dagger} L_{\pi}^{\dagger} L_0 R_{\pi})$, $g_{b0} (\leftrightarrow R_0^{\dagger} L_{\pi}^{\dagger} L_0 R_{\pi})$ and $g_{b\pi} (\leftrightarrow R_{\pi}^{\dagger} L_0^{\dagger} L_{\pi} R_0)$. The definitions of these couplings, including the k_{\parallel} dependence are detailed in Appendix A 1 and Fig. 18; from symmetry considerations, one only needs g_0 , g_{π} , g_{f0} , g_{i0} and g_{b0} ; in fact, we will see that even g_{π} can be deduced from g_0 in the very case of a ladder, so that we only deal with four couplings.

Bare couplings. Of course, in the initial Hubbard model, the two-particle couplings do not depend on the momenta. We will define $\tilde{U} = Ua/(\pi v_f)$ and $\tilde{g} = ga/(\pi v_f)$, to get rid of the physical dimensions. Then, the bare couplings values are simply $\tilde{g}_i = \tilde{U}$.

Additional Coulombian interchain interactions. The above Hamiltonian H_{int} corresponds to local interactions. We have also studied the effect of additional Coulombian interchain interactions.

In order to implement a backward interchain interaction, we need to modulate the bare parameters, which simply writes, in this case, $\tilde{g}_{01} = \tilde{U} + \tilde{C}_{\text{back}}$, $\tilde{g}_{f01} = \tilde{U} - \tilde{C}_{\text{back}}$, $\tilde{g}_{i01} = \tilde{U} - \tilde{C}_{\text{back}}$ and $\tilde{g}_{b01} = \tilde{U} + \tilde{C}_{\text{back}}$, where $\tilde{C}_{\text{back}} = C_{\text{back}} a/(\pi v_f)$ is the corresponding interaction factor.

When we include instead a forward interchain interaction, of parameter $\tilde{C}_{\text{for}} = C_{\text{for}} a/(\pi v_f)$, the modulation of the bare parameters writes $\tilde{g}_{02} = \tilde{U} + \tilde{C}_{\text{for}}$, $\tilde{g}_{f02} = \tilde{U} + \tilde{C}_{\text{for}}$, $\tilde{g}_{i02} = \tilde{U} - \tilde{C}_{\text{for}}$ and $\tilde{g}_{b02} = \tilde{U} - \tilde{C}_{\text{for}}$.

Eventually, if we include both interactions, we only need to add the two modulations.

C. External excitation fields

We note \mathcal{Z} the three-legged couplings to external excitation fields. We will write $\mathcal{Z}_{\alpha}^{\text{DW}}$, ($\alpha = C, S$) for Charge or spin density waves, and $\mathcal{Z}_{\alpha}^{\text{SC}(\Gamma)}$, ($\alpha = s, t$) for singlet or triplet superconducting states of symmetry $\Gamma = s, p, d, f, g$. Again, we will omit index α as soon as it is not necessary, and distinguish z_0^{DW} , which corresponds to $L_0^{\dagger} R_0$ process, $z_{\pi}^{\text{DW}} (\leftrightarrow L_{\pi}^{\dagger} R_{\pi})$, $z_{+}^{\text{DW}} (\leftrightarrow L_{\pi}^{\dagger} R_0)$ and $z_{-}^{\text{DW}} (\leftrightarrow L_0^{\dagger} R_{\pi})$. The first process corresponds to an intraband mapping that relates 0-band states (horizontally in the 2D representation of Fig. 2), idem for the second one with π -band ones, while the last ones are interband mappings (biased in Fig. 2); the same applies to \mathcal{Z}^{SC} , except that the processes now write $L_0 R_0$, $L_{\pi} R_{\pi}$, $L_0 R_{\pi}$, and $L_{\pi} R_0$. The definitions of all these couplings are detailed in Appendix A 2 and Fig. 19; from symmetry considerations, one only needs z_0 , z_{π} and z_{\pm} ; again, in the very case of a ladder, we will see that z_{π} can also be deduced from z_0 , so we only deal with two couplings per instability.

With our specific choice, the initial values of the couplings to external fields are all $z_i = 1$.

After this brief presentation of the model, we will now expound the classification of the different instabilities, according to their symmetries, which we will study afterwards.

III. RESPONSE FUNCTIONS

To each external excitation field corresponds a susceptibility, which is the response function of a pair operator. The corresponding order parameter is the mean value of this operator. In order to classify the different instabilities, one just needs to classify the pair operators. Their symmetries are detailed in Appendix C.

We will first begin with SC instabilities.

A. Superconducting instabilities

1. SC Hamiltonian

Let us define the superconducting order parameters $\Delta_{\alpha}^{(\Gamma)}(\mathbf{X}) = \langle O_{\alpha}^{(\Gamma)}(\mathbf{X}) \rangle$, where the electron-electron pair operator writes $O_{\alpha}^{(\Gamma)} = \sum_{\mathbf{X}' \sigma \sigma'} \psi_{\mathbf{X}, \sigma} \Gamma(\mathbf{X}, \mathbf{X}') \psi_{\mathbf{X}', \sigma'} \tau_{\sigma \sigma'}^{\alpha}$, with $\tau^s = i \sigma_y$ for singlet states, $\tau^x = i \sigma_x \sigma_y = -\sigma_z$, $\tau^y = i \sigma_y \sigma_x = iI$ and $\tau^z = i \sigma_z \sigma_y = \sigma_x$ for triplet states (σ_i are the Pauli matrix, I is the 2×2 identity matrix and i is the imaginary number). $\psi_{\mathbf{X}, \sigma}$ is a real space wave function; since electrons occupy discrete positions $\mathbf{X} = (ia, bj/2)$ ($i = 1 \dots N$, $j = \pm 1$), we will rather write $\psi_{ij\sigma}$. The corresponding Hamiltonian writes, in reciprocal space variables,

$$\begin{aligned} H_{\text{SC}} = & \sum_{\substack{\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2 \\ \sigma_1, \sigma_2}} \bar{\mathcal{Z}}^{\text{SC}}(\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \mathbf{Q}) \tau^{(a)} \phi_{\mathbf{Q}} \Psi_{\mathbf{P}_1 \sigma_1} \Psi_{\mathbf{P}_2 \sigma_2} \\ & + \mathcal{Z}^{\text{SC}}(\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \mathbf{Q}) \tau^{(a)} \phi_{\mathbf{Q}}^{\dagger} \Psi_{\mathbf{P}_2 \sigma_2}^{\dagger} \Psi_{\mathbf{P}_1 \sigma_1}^{\dagger}, \end{aligned} \quad (3)$$

where $\mathbf{Q} = (Q_{\parallel}, Q_{\perp}) = \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2$ is the interaction momentum.

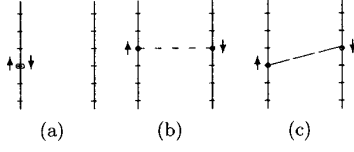


FIG. 3. Real space representation of SC condensate of singlet s symmetry (a), d (b), and g (c).

In order to simplify our expressions in this section, we write $L_{p,\theta,\sigma} = L_{\theta,\sigma}(p - k_{f\theta})$ and $R_{p,\theta,\sigma} = L_{\theta,\sigma}(p + k_{f\theta})$, where $\theta = 0, \pi$. Notation \int_L stands for the half band integration $\int_{k_{f0}-\pi/a}^{k_{f0}}$ or $\int_{k_{f\pi}-\pi/a}^{k_{f\pi}}$, in which case we will not need to be precise, since what takes place at the band limit is not physically relevant, in this system.

To each order parameter $\Delta(\mathbf{X})$ corresponds to an infinite number of Fourier components, depending on the reciprocal space variable \mathbf{Q} . We will only keep components $\mathbf{Q}=(0,0)$ and $\mathbf{Q}=(\pm\Delta k_f, \pi/b)$, so that $\epsilon(\mathbf{k})$ and $\epsilon(\mathbf{Q}-\mathbf{k})$ both lie in the physical band, close to the Fermi points. We will write, in short, $O(0)$ and $O(\pi_{\pm})$ as the corresponding pair operators.

Let us now classify the different operators, according to their symmetry, by choosing the adequate Γ . The principles of the calculation and some details are given in Appendix D.

2. Singlet s condensates

The local pairing $\Gamma(\mathbf{X}, \mathbf{X}') = \delta_{i,i'} \delta_{j,j'}$ gives singlet condensates of s symmetry. The pair operator reduces to

$$O_s^{(s)}(\mathbf{X}) = 2 \psi_{\mathbf{X}\uparrow} \psi_{\mathbf{X}\downarrow} = 2 \psi_{ij\uparrow} \psi_{ij\downarrow}.$$

$O(0)$ component corresponds to an intraband pairing, named 0-condensate ($\mathbf{Q}=\mathbf{0}$, corresponding to z_0^{SC} , see Appendix A 2 and writes

$$\begin{aligned} O_s^{(s)}(0) &= 2 \sum_i \psi_{i,1\uparrow} \psi_{i,1\downarrow} + \psi_{i,-1\uparrow} \psi_{i,-1\downarrow} \\ &= \int_L \frac{adp}{2\pi} L_{p,0\uparrow} R_{-p,0\downarrow} + L_{p,\pi\uparrow} R_{-p,\pi\downarrow} + R_{-p,0\uparrow} L_{p,0\downarrow} \\ &\quad + R_{-p,\pi\uparrow} L_{p,\pi\downarrow}. \end{aligned}$$

$O(\pi_{\pm})$ component corresponds to an interband pairing, named π condensate [$\mathbf{Q}=(\pm\Delta k_f, \pi/b)$, corresponding to z_{\pm}^{SC} , see Appendix A 2] and writes

$$\begin{aligned} O_s^{(s)}(\pi_{\pm}) &= -2i \sum_i e^{\mp i\Delta k_f a} (\psi_{i,1\uparrow} \psi_{i,1\downarrow} - \psi_{i,-1\uparrow} \psi_{i,-1\downarrow}) \\ &= -i \int_L \frac{adp}{2\pi} L_{p,0\uparrow} R_{\Delta k_f(1\pm 1)-p,\pi\downarrow} + L_{p,\pi\uparrow} R_{\Delta k_f(-1\pm 1)-p,0\downarrow} \\ &\quad + R_{\Delta k_f(-1\pm 1)-p,0\uparrow} L_{p,\pi\downarrow} + R_{\Delta k_f(1\pm 1)-p,\pi\uparrow} L_{p,0\downarrow}. \end{aligned}$$

It is however antisymmetric with parity [$PO_s^{(s)}(\pi/b) = -O_s^{(s)}(\pi/b)$]; this comes from the $e^{-iQ_{\perp} j b/2}$ factor in the Fourier calculation; see details in Appendix D.

The s condensates are local in real space; see Fig. 3(a).

If Γ is replaced by $\delta_{i,i' \mp m} \delta_{j,j'}$, one gets extended s states (in reciprocal space variables, the components are multiplied

by $\cos(mPa)$ or some similar factor; see some examples in Appendix D). However, we did not include these in our calculations.

3. Singlet d and g condensates

There are also two singlet condensates of d and g symmetry.

With $\Gamma = \delta_{i,i'} \delta_{j,-j'}$ (interchain pairing, with equal positions on each chain), one gets another pair operator. $O_s(\pi)$ component is zero for singlet condensate, while $O(0)$ component corresponds to an intraband pairing (0 condensate) of d symmetry, and writes

$$\begin{aligned} O_s^{(d)}(0) &= 2 \sum_i \psi_{i,1\uparrow} \psi_{i,-1\downarrow} + \psi_{i,-1\uparrow} \psi_{i,1\downarrow} \\ &= \int_L \frac{adp}{2\pi} L_{p,0\uparrow} R_{-p,0\downarrow} - L_{p,\pi\uparrow} R_{-p,\pi\downarrow} + R_{-p,0\uparrow} L_{p,0\downarrow} \\ &\quad - R_{-p,\pi\uparrow} L_{p,\pi\downarrow}. \end{aligned}$$

With $\Gamma = \delta_{i,i' \mp 1} \delta_{j,-j'}$, one gets a more complicated pair operator. $O(\pi)$ component corresponds to an interband pairing (π condensate) of g symmetry, and writes

$$\begin{aligned} O_s^{(g)}(\pi_{\pm}) &= -2i \sum_i e^{\mp i\Delta k_f a} (\psi_{i,1\uparrow} \psi_{i+1,-1\downarrow} - \psi_{i,-1\uparrow} \psi_{i+1,1\downarrow}) \\ &= -e^{\pm i(\Delta k_f a/2)} \int_L \frac{adp}{2\pi} \sin\left(a\left(p - k_{f0} \mp \frac{\Delta k_f}{2}\right)\right) \\ &\quad \times (L_{p-\Delta k_f, \pi\uparrow} R_{\pm\Delta k_f - p, 0\downarrow} + R_{\pm\Delta k_f - p, 0\uparrow} L_{p-\Delta k_f, \pi\downarrow} \\ &\quad - L_{p,0\uparrow} R_{\Delta k_f(1\pm 1)-p,\pi\downarrow} - R_{\Delta k_f(1\pm 1)-p,\pi\uparrow} L_{p,0\downarrow}). \end{aligned}$$

Be careful that the symmetry of the 0 condensate is $d_{x^2-y^2}$ (i.e., it changes sign with \tilde{C} ; see the definition afterwards), while that of the π condensate is both d_{xy} (i.e., it changes sign with p_x and p_y) and $d_{x^2-y^2}$; moreover, $d_{x^2-y^2}$ is imperfect on the π condensate [for instance, it maps a factor $\sin(a(p - k_{f0} + \Delta k_f/2))$ onto $\sin(a(-p - k_{f0} + \Delta k_f/2))$, which slightly differs]; however, the signs change according to g symmetry. A real space representation of the different condensate of singlet symmetry is given in Fig. 3.

If the components, in reciprocal variables, are multiplied by $\cos(mPa)$ (or some similar factor), one gets extended d condensates (this corresponds to the harmonic classification).

4. Triplet condensates

One also finds triplet instabilities.

$\Gamma = \delta_{i,i' \mp 1} \delta_{j,j'}$ corresponds to the p_x symmetry; $O_i^{(p_x)}(0)$ corresponds to an intraband pairing (0 condensate), and writes

$$\begin{aligned} O_i^{(p_x)}(0) &= \sum_i (\psi_{i,1\sigma} \psi_{i+1,1\sigma'} + \psi_{i,-1\sigma} \psi_{i+1,-1\sigma'}) \tau_{\sigma\sigma'}^{\alpha} \\ &= -i \int_L \frac{adp}{2\pi} \sum_{\sigma\sigma'} (L_{p,0\sigma} R_{-p,0\sigma'} \\ &\quad + L_{p-\Delta k_f, \pi\sigma} R_{\Delta k_f - p, \pi\sigma'}) \sin(a(p - k_{f0})) \tau_{\sigma\sigma'}^{\alpha}. \end{aligned}$$

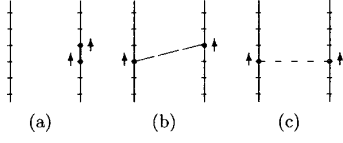


FIG. 4. Real space representation of SC condensate of triplet symmetry p_x (a), f_x (b), and f_y (c).

$O_i^{(p_x)}(\pi_{\pm})$ corresponds to an interband pairing (π condensate), and writes

$$\begin{aligned} O_i^{(p_x)}(\pi_{\pm}) &= -i \sum_{\sigma\sigma'} e^{\mp i\Delta k_f a} (\psi_{i,1\sigma} \psi_{i+1,1\sigma'} - \psi_{i,-1\sigma} \psi_{i+1,-1\sigma'}) \tau_{\sigma\sigma'}^{\alpha} \\ &= -e^{\pm i(\Delta k_f a/2)} \int_L \frac{adp}{2\pi} \sum_{\sigma\sigma'} (L_{p,0\sigma} R_{\Delta k_f(1\pm)-p,\pi\sigma'} \\ &\quad + L_{p-\Delta k_f,\pi\sigma} R_{\pm\Delta k_f-p,0\sigma'}) \sin(a(p \\ &\quad - k_{f0} \mp \Delta k_f/2)) \tau_{\sigma\sigma'}^{\alpha}. \end{aligned}$$

Be careful that, because of the factor $e^{-iQ_{\perp} b/2}$ in the Fourier transform, this condensate is invariant under P .

With $\Gamma = \delta_{i,i'} \delta_{j,-j'}$, one gets an intraband pairing (0 condensate) of symmetry f_x , given by the $O_i^{(f_x)}(0)$ component

$$\begin{aligned} O_i^{(f_x)}(0) &= \sum_{\sigma\sigma'} (\psi_{i,1\sigma} \psi_{i+1,-1\sigma'} + \psi_{i,-1\sigma} \psi_{i+1,1\sigma'}) \tau_{\sigma\sigma'}^{\alpha} \\ &= i \int_L \frac{adp}{2\pi} \sum_{\sigma\sigma'} (L_{p-\Delta k_f,\pi\sigma} R_{\Delta k_f-p,\pi\sigma'} \\ &\quad - L_{p,0\sigma} R_{-p,0\sigma'}) \sin(a(p - k_{f0})) \tau_{\sigma\sigma'}^{\alpha}. \end{aligned}$$

Note that $d_x^2 - y^2$ is again imperfect.

With $\Gamma = \delta_{i,i'} \delta_{j,-j'}$, one gets an interband pairing (π condensate) of symmetry f_y , given by the $O_i^{(f_y)}(\pi_{\pm})$ component

$$\begin{aligned} O_i^{(f_y)}(\pi_{\pm}) &= -i \sum_{\sigma\sigma'} e^{\mp i\Delta k_f a} (\psi_{i,1\sigma} \psi_{i,-1\sigma'} - \psi_{i,-1\sigma} \psi_{i,1\sigma'}) \tau_{\sigma\sigma'} \\ &= i \int_L \frac{adp}{2\pi} \sum_{\sigma\sigma'} (L_{p,0\sigma} R_{\Delta k_f(1\pm)-p,\pi\sigma'} \\ &\quad - L_{p,\pi\sigma} R_{\Delta k_f(-1\pm)-p,0\sigma'}) \tau_{\sigma\sigma'}. \end{aligned}$$

Note that p_y antisymmetry is an internal one and does not account on the exponential factor, in the Fourier transform. A real space representation of the different condensate of triplet symmetry is given in Fig. 4.

Extended states of the same symmetries can be obtained exactly the same way as for singlet superconducting operators.

B. Density wave instabilities

1. DW Hamiltonian

We have also investigated site density wave instabilities, defined by the order parameter $\Delta_{\text{site}}^{\text{DW}}(\mathbf{X}) = \sum_{\sigma\sigma'} \langle \psi_{\mathbf{X},\sigma}^{\dagger} \psi_{\mathbf{X},\sigma'} \rangle \tau_{\sigma\sigma'}^{\alpha}$, with $\tau^C = I$ for CDW, and $\tau^{S_x} = \sigma_x$, $\tau^{S_y} = \sigma_y$ and $\tau^{S_z} = \sigma_z$, for SDW, as well as bond density wave instabilities, defined by the order parameter $\Delta_{\text{bond}}^{\text{DW}}(\mathbf{X}) = \sum_{\sigma\sigma'} \langle \psi_{\mathbf{X},\sigma}^{\dagger} \psi_{\mathbf{X}+\mathbf{1}_{\parallel},\sigma'} \rangle \tau_{\sigma\sigma'}^{\alpha}$, where $\mathbf{1}_{\parallel} = (1, 0)$. These couplings are intrachain, we distinguish intraband and interband ones. We also investigated interchain couplings, defined by the order parameters $\Delta_{\text{site}}^{\text{DW}}(\mathbf{X}) = \sum_{\sigma\sigma'} \langle \psi_{\mathbf{X},\sigma}^{\dagger} \psi_{\mathbf{X}+\mathbf{G},\sigma'} \rangle \tau_{\sigma\sigma'}^{\alpha}$ and $\Delta_{\text{bond}}^{\text{DW}}(\mathbf{X}) = \sum_{\sigma\sigma'} \langle \psi_{\mathbf{X},\sigma}^{\dagger} \psi_{\mathbf{X}+\mathbf{G}',\sigma'} \rangle \tau_{\sigma\sigma'}^{\alpha}$, where \mathbf{G} or $\mathbf{G}' \in \{\mathbf{1}_{\perp}, \mathbf{1}_{\parallel} + \mathbf{1}_{\perp}\}$ and $\mathbf{1}_{\perp} = (0, 1)$.

The corresponding Hamiltonian writes, in reciprocal space variables,

$$\begin{aligned} H_{\text{DW}} &= \sum_{\substack{\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2 \\ \sigma_1, \sigma_2}} \bar{\mathcal{Z}}^{\text{DW}}(\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \mathbf{Q}) \tau^{(\alpha)} \phi_{\mathbf{Q}}^{\dagger} \Psi_{\mathbf{P}_1 \sigma_1}^{\dagger} \Psi_{\mathbf{P}_2 \sigma_2} \\ &\quad + \mathcal{Z}^{\text{DW}}(\mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \mathbf{Q}) \tau^{(\alpha)} \phi_{\mathbf{Q}} \Psi_{\mathbf{P}_2 \sigma_2}^{\dagger} \Psi_{\mathbf{P}_1 \sigma_1}. \end{aligned} \quad (4)$$

The construction of the response functions for these instabilities is very similar to that of the superconducting instabilities. So, we will only give the Fourier components of the electron-hole pair operator for $\mathbf{Q} = (-2k_{f0}, 0)$, $\mathbf{Q} = (-2k_{f\pi}, 0)$, and $\mathbf{Q} = (-k_{f0} - k_{f\pi}, \pi/b)$.

SDW and CDW operators only differ by the spin factor (matrix σ or I), so we will also omit this factor.

2. DW response function

The intraband response functions write then

$$O_{\text{site}}(-2k_{f0}, 0) = \int_L \frac{adp}{2\pi} R_{p,0\sigma}^{\dagger} L_{p,0\sigma'} + R_{p+\Delta k_f,\pi\sigma}^{\dagger} L_{p-\Delta k_f,\pi\sigma'},$$

$$\begin{aligned} O_{\text{bond}}(-2k_{f0}, 0) &= i \int_L \frac{adp}{2\pi} \sin(ap) e^{-ik_{f0}a} (R_{p,0\sigma}^{\dagger} L_{p,0\sigma'} \\ &\quad + R_{p+\Delta k_f,\pi\sigma}^{\dagger} L_{p-\Delta k_f,\pi\sigma'}) \end{aligned}$$

and

$$O_{\text{site}}(-2k_{f\pi}, 0) = \int_L \frac{adp}{2\pi} R_{p-\Delta k_f,0\sigma}^{\dagger} L_{p+\Delta k_f,0\sigma'} + R_{p,\pi\sigma}^{\dagger} L_{p,\pi\sigma'},$$

$$\begin{aligned} O_{\text{bond}}(-2k_{f\pi}, 0) &= i \int_L \frac{adp}{2\pi} \sin(ap) e^{-ik_{f\pi}a} (R_{p-\Delta k_f,0\sigma}^{\dagger} L_{p+\Delta k_f,0\sigma'} \\ &\quad + R_{p,\pi\sigma}^{\dagger} L_{p,\pi\sigma'}). \end{aligned}$$

The interband response function writes

$$O_{\text{site}}\left(-k_{f0} - k_{f\pi}, \frac{\pi}{b}\right) = i \int_L \frac{adp}{2\pi} R_{p,0\sigma}^{\dagger} L_{p,\pi\sigma'} + R_{p,\pi\sigma}^{\dagger} L_{p,0\sigma'},$$

$$O_{\text{bond}}\left(-k_{f0} - k_{f\pi}, \frac{\pi}{b}\right) = - \int_L \frac{adp}{2\pi} e^{ak_{f0} + k_{f\pi} p^2} \sin(a(p - \Delta k_f/2)) \\ \times (R_{p,\pi\sigma}^{\dagger} L_{p,0\sigma'} + R_{p+\Delta k_f,0\sigma}^{\dagger} L_{p+\Delta k_f,\pi\sigma'}).$$

The above response functions are intrachain ones. The way we have written them one just needs to add a minus sign before the first (or second) term of all intrachain operators, to obtain all interchain ones.

IV. RENORMALIZATION GROUP EQUATIONS

A. Choice of the RG scheme

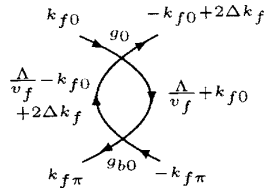
We have used the one particle irreducible (OPI) scheme (Refs. 26, 33, and 34), to calculate all diagrams, in a one-loop expansion. We use the flow parameter $\Lambda = \Lambda_0 e^{-\ell}$. We do not renormalize v_f nor k_{f0} or $k_{f\pi}$.

B. k_{\parallel} -dependent equations

1. k_{\parallel} dependence of the couplings

In this system, the interband backward scattering g_b plays a particular role. Due to momentum conservation, it is not possible to put all its arguments onto the Fermi points. This indicates that g_b is not a low energy process. However, it *intervenes* in the renormalization of low energy processes. For instance, in the renormalization of g_0 , $dg_0/d\ell$ gives a contribution containing a g_{b0} scattering, with a factor $\Lambda/(\Lambda + v_f \Delta k_f)$. This contribution is exponentially suppressed, as $\Lambda \ll v_f \Delta k_f = 2t_{\perp}$. It can thus be neglected as soon as $v_f \Delta k_f$ is of the order or bigger than the initial bandwidth $2\Lambda_0$. On the other hand, as shown by Fabrizio,¹² the g_b process has to be taken into account if $v_f \Delta k_f$ is much smaller than Λ_0 .

Thereupon, in order to calculate the renormalization of g_{b0} properly, couplings g_0 , g_f or g_t with specific k_{\parallel} dependence are needed. For instance, $dg_{b0}/d\ell$ gives a Peierls diagram:



including coupling $g_0(k_{f0}, -k_{f0} + 2\Delta k_f, -k_{f0} + 2\Delta k_f, k_{f0})$, with arguments that remain separated from the Fermi points, even in the limit $\Lambda \rightarrow 0$, let us write it g_{01} . This coupling separates from coupling $g_0(k_{f0}, -k_{f0}, -k_{f0}, k_{f0})$, with all arguments at the Fermi points, which we will write g_{00} ; therefore k_{\parallel} dependence is influential. This can be proved by comparing their renormalization, in the Cooper channel. For instance, $dg_{00}/d\ell$ gives, in the Cooper channel, a term proportional to $g_0^2 + g_t^2$ with a *constant* factor, which is present all the way down to $\Lambda \rightarrow 0$. On the contrary, $dg_{01}/d\ell$ gives, in the Cooper channel, a term with a factor $2\Lambda/(2\Lambda + v_f |P_1 + P_2|) = \Lambda/(\Lambda + v_f \Delta k_f)$; the renormalization of g_{01} in the Cooper channel is thus exponentially suppressed, when $\Lambda \rightarrow 0$ (for

g_{00} , the total incoming momentum is $P_1 + P_2 = 0$).

We have proved that different g_0 couplings separate during the flow, so the k_{\parallel} dependence is hence capable to have an effect during the flow, when it is taken into account. This generalizes for g_f , g_t and even g_b couplings.

All this differs completely from the one-dimensional case, where the renormalization of the coupling with all momenta on the Fermi points is only governed by processes with momenta $\pm k_f \pm \Lambda/v_f$, which always fall on the Fermi points when $\Lambda \rightarrow 0$. In our case, it is not possible to apply the same argument as soon as $t_{\perp} \ll \Lambda_0$. Indeed, we will see, in the following, that one gets different results, depending on whether we take the k_{\parallel} dependence of the couplings into account or not.

The k_{\parallel} dependence can be observed, when Λ is large (and until $\Lambda > v_f \Delta k_f$), by the separation of the different scattering couplings g_0 , g_{f0} and g_{t0} . On the contrary, if one puts $g_b = 0$ at $\ell = 0$, this dependence is suppressed, and the system becomes purely one dimensional for small values of t_{\perp} (in that case, g_b remains 0 for all Λ and the RG equations simplify drastically, although they differ from the one-dimension case).

2. k_{\parallel} representation of the couplings g

In order to write explicit k_{\parallel} -dependent RG equations, one needs to define a consistent and detailed k_{\parallel} representation of the couplings g .

Let us first note that $\mathcal{G}(P_1, P_2, P'_2, P'_1)$ corresponds to $R^{\dagger}(P_1)L^{\dagger}(P_2)L(P'_2)R(P'_1)$, where P_i are the absolute momenta in the \parallel direction. We then define the relative momenta $p_1 = P_1 - k_{f\theta_1}$, $p_2 = P_2 + k_{f\theta_2}$, $p_3 = P_3 + k_{f\theta_3}$, and $p_4 = P_4 - k_{f\theta_4}$, and write, correspondingly, $g(p_1, p_2, p'_2, p'_1)$. We also introduce variables $c = p_1 + p_2 = p'_1 + p'_2 + d$, $l = p_1 - p'_1 = p'_2 - p_2 + d$, and $p = p_1 - p'_2 = p'_1 - p_2 + d$, where $d = -2\Delta k_f$ for g_{b0} , $d = 2\Delta k_f$ for $g_{b\pi}$, and d is zero otherwise, and then write, correspondingly, $g(c, l, p)$ (d is implicit).

At the beginning of this section, we have found in a diagram a particular coupling $g_0(\Lambda/v_f, 2\Delta k_f, 0, 2\Delta k_f + \Lambda/v_f)$. When $\Lambda \rightarrow 0$, we get $g_0(0, 2\Delta k_f, 0, 2\Delta k_f)$ [which also writes $g_0(2\Delta k_f, -2\Delta k_f, 0)$ in (c, l, p) notation]. Note that some arguments are shifted by $\pm 2\Delta k_f$, compared to the coupling $g_0(0, 0, 0, 0)$ with all momenta on the Fermi points.

This could easily be generalized for all couplings g . So, in order to get a reasonable number of couplings, we have done the following approximation: all terms $\pm \Lambda/v_f$, in all diagrams, are replaced by their $2\Delta k_f$ part (i.e., by $2\Delta k_f [\Lambda/2\Delta k_f v_f]$, where $[x]$ is the biggest integer $\leq x$). Then, it follows that we only get couplings $g(p_1, p_2, p'_2, p'_1)$ [or $g(c, l, p)$], where all variables p_i (or c, l, p) are multiples of $2\Delta k_f$.

3. k_{\parallel} representation of the couplings z

All the preceding procedures generalize to the couplings z as well. We first introduce a (k, c, p) representation, similarly, with $c = p_1 + p_2$, $p = p_2 - p_1$, and $k = p_1$, where p_1 and p_2 are defined in Fig. 19 and write, correspondingly, $z^{\text{SC}}(c, k)$ or $z^{\text{DW}}(p, k)$.

Then, we apply the same approximation in order to get couplings, where all variables (k, c, p) are multiples of $2\Delta k_f$.

The same conclusion applies to these couplings, proving that their k_{\parallel} dependence is also influential.

4. RG equations

Finally, we calculate the RG flow of the separated following couplings: $g_0(0,0,0,0)$, $g_0(-2\Delta k_f,0,0,-2\Delta k_f)$, $g_0(0,2\Delta k_f,0,2\Delta k_f)$, etc. as well as $z(0,0)$, $z(2\Delta k_f,0)$, etc. The exact RG equations, including all \parallel components, are given in Appendix B 1, for the $g(c,l,p)$, and in Appendix B 2, for the $z^{\text{SC}}(c,k)$ and $z^{\text{DW}}(p,k)$. In order not to solve an infinite number of equations, we have reduced the effective bandwidth of the renormalized couplings to $4n_{\text{max}}\Delta k_f$, where n_{max} is an integer, by projecting all momenta lying out of the permitted band, back into it, according to a specific truncation procedure that will be explained after.

We have performed our calculations with $n_{\text{max}}=2, 3$ or 4 , and the results rapidly converge as n_{max} is increased.

5. Susceptibility equations

To each instability corresponds a susceptibility. We will write $\chi_{\alpha}^{\text{SC}(\Gamma)}$ the different SC ones and $\chi_{\alpha}^{\text{DW}}$ the different SDW or CDW ones. The susceptibilities have no k_{\parallel} dependence. However, couplings z with different k_{\parallel} variables appear in their RG equations, which we give in Appendix B 3.

Referring to the transverse component of the interaction vectors, we will write $\chi(0)$ the instabilities corresponding to intraband processes, and $\chi(\pi/b)$ those corresponding to interband ones. We use several symmetries, to reduce the number of couplings. Because of the k_{\parallel} dependence, it is not as easy to apply them as in ordinary cases. We give here some indications, which are completed in the Appendixes.

C. Symmetries

1. Ordinary symmetries

We apply C the conjugation symmetry ($C:\mathbf{r}\rightarrow\mathbf{r}$, $\mathbf{p}\rightarrow-\mathbf{p}$, $\sigma\rightarrow-\sigma$), A the (antisymmetrical) exchange between incoming particles, A' the exchange between outgoing particles, P the space parity ($P:\mathbf{r}\rightarrow-\mathbf{r}$, $\mathbf{p}\rightarrow-\mathbf{p}$, $\sigma\rightarrow\sigma$), and S the spin rotation ($S:\sigma\rightarrow-\sigma$). We will also use p_x , p_y (the mirror symmetries in the \parallel and \perp directions), f_x and f_y . Note that $P=p_x p_y$.

H_{cin} [Eq. (1)] and H_{int} [Eq. (2)] satisfy all these symmetries, whereas SC instabilities, governed by H_{SC} [Eq. (3)], are not invariant under S or C , which allows a natural classification of the states, and DW instabilities, governed by H_{DW} [Eq. (4)], do satisfy CS , AS or $A'S$, but not C , A , A' , nor S symmetries.

All the relations satisfied by \mathcal{G} or \mathcal{Z} couplings are detailed in Appendix C 1. From what precedes, one will not be surprised that those for \mathcal{G} couplings are simpler and less sophisticated than those for \mathcal{Z} ones.

Relations of couplings g . We are not interested here in the symmetries that relate, for instance, a $LRLR$ coupling to a $RLLR$ one. Instead, we only keep $RLLR$ couplings and deduce all the symmetries that keep this order.

We then apply them to every coupling g_0 , g_{π} etc., and find, altogether, exactly two independent relations for each one, which write, in (c,l,p) notation,

$$\begin{aligned} g_i(c,l,p) &= g_i(-c,l,p) \quad i=0,\pi,t0,t\pi, \\ g_{f\pi}(c,l,p) &= g_{f0}(-c,l,p), \\ g_{b\pi}(c,l,p) &= g_{b0}(-c,l-2\Delta k_f,p-2\Delta k_f), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} g_i(c,l,p) &= g_i(c,-l,p) \quad i=0,\pi,f0,f\pi, \\ g_{t\pi}(c,l,p) &= g_{t0}(c,-l,p), \\ g_{b\pi}(c,l,p) &= g_{b0}(c-2\Delta k_f,-l,p-2\Delta k_f). \end{aligned} \quad (6)$$

One observes that (5) relates g_{f0} to $g_{f\pi}$ and g_{b0} to $g_{b\pi}$, while (6) relates g_{t0} to $g_{t\pi}$ and g_{b0} to $g_{b\pi}$. The combination of (5) and (6) thus relates g_{f0} to $g_{f\pi}$ and g_{t0} to $g_{t\pi}$.

Relations of couplings z . We similarly deduce all symmetries that keep the LR order; we apply them to every coupling z_0 , z_{π} , etc., and find only one relation for each one, which writes, in (k,c,p) notation,

$$\begin{aligned} z_{s\theta}^{\text{SC}}(c,k) &= z_{s\theta}^{\text{SC}}(-c,k-c) \quad \theta=0,\pi, \\ z_{t0}^{\text{SC}}(c,k) &= z_{t\pi}^{\text{SC}}(-c,k-c), \\ z_{s-}^{\text{SC}}(c,k) &= \pm z_{s+}^{\text{SC}}(-c,k-c), \\ z_{t-}^{\text{SC}}(c,k) &= \pm z_{t+}^{\text{SC}}(-c,k-c), \end{aligned} \quad (7)$$

where \pm reads $+$ for $\Gamma=s$ or $\Gamma=p_x$ and $-$ for $\Gamma=g$ or $\Gamma=f_y$. Note that z_0^{SC} or s_{π}^{SC} correspond to intraband condensates, while z_{+}^{SC} or s_{-}^{SC} correspond to interband ones.

$$\begin{aligned} z_{\theta}^{\text{DW}}(p,k) &= \pm z_{\theta}^{\text{DW}}(p,-p-c) \quad \theta=0,\pi, \\ z_{-}^{\text{DW}}(p,k) &= \pm z_{+}^{\text{DW}}(p,-p-c), \end{aligned} \quad (8)$$

where \pm reads $+$ for site ordering and $-$ for bond ordering.

One observes that (7) and (8) relate z_{+} to z_{-} .

2. Supplementary symmetry

As we already noted, ordinary symmetries do not relate g_0 to g_{π} , nor z_0 to z_{π} . However, since we choose identical bare values at $\ell=0$, and since the RG equations are symmetrical, we observe an effective symmetry between these couplings: we will show here that this does not occur by chance, but that it follows a specific symmetry \tilde{C} , which only applies to the ladder system.

\tilde{C} is a kind of conjugation: it generalizes the electron-hole symmetry as follows.

Let us first consider the case of a single band one-dimensional system; we find an electron-hole symmetry, described in Fig. 5(a).

For R particles, it conjugates an electron with momentum k_f+p and a hole with momentum k_f-p . In the momentum space, it is a symmetry around k_f . One can write $\tilde{C}\psi_p = \psi_{2k_f-p}^{\dagger}$ and $\tilde{C}\psi_p^{\dagger} = \psi_{2k_f-p}$. For L particles, the same relation applies if one simply changes k_f into $-k_f$.

Let us now return to the two-band system. This symmetry generalizes by turning the momenta around the isobarycenter

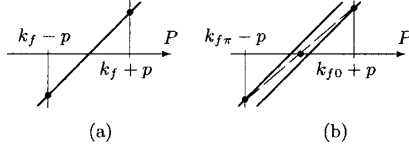


FIG. 5. Symmetry around the Fermi points: (a) in a 1-band system; (b) in a 2-band system

of the Fermi points, as shown in \parallel space in Fig. 5(b). For R particles, $(k_{f0} + k_{f\pi})/2$ points to the isobarycenter and you now get $\tilde{\mathcal{C}}\psi_p = \psi_{k_{f0} + k_{f\pi} - p}$ etc.

In the two-dimensional representation, $\tilde{\mathcal{C}}$ -symmetry is a point symmetry around $(\pm(k_{f0} + k_{f\pi})/2, \pi/2b)$, as shown in Fig. 2 (the sign depends on whether it is a R or L momentum).

Actually, there is an alternative symmetry, which we write \mathcal{C} , which also maps the band $k_{\perp} = 0$ onto the band π : it is a translation by the vector $[\pm(k_{f\pi} - k_{f0}), \pi/b]$, as shown in Fig. 2. Some of the bare couplings satisfy this \mathcal{C} symmetry (g_0, g_f, g_t, z_0 or z_{π}), but some do not (g_b, z_+, z_-). Since interactions are mixing all couplings as soon as the flow parameter $\ell > 0$, the renormalized couplings will break the \mathcal{C} symmetry. Therefore, we cannot use it.

On the contrary, one verifies that $H_{\text{cin}}, H_{\text{int}}, H_{\text{SC}}$ and H_{DW} are invariant under $\tilde{\mathcal{C}}$. The induced relations satisfied by \mathcal{G} or \mathcal{Z} couplings are detailed in Appendix C 2.

In fact, $\tilde{\mathcal{C}}$ and \mathcal{C} weakly correspond to the $d_{x^2-y^2}$ symmetry in two dimensions.

Supplementary relation of couplings g . It is straightforward that $\tilde{\mathcal{C}}$ keeps the $RLLR$ order when one applies it to any coupling g_i ; so we find a new relation for each one, which writes, in (c, l, p) notation,

$$\begin{aligned} g_{\pi}(c, l, p) &= g_0(-c, -l, -p), \\ g_{f\pi}(c, l, p) &= g_{f0}(-c, -l, -p), \\ g_{t\pi}(c, l, p) &= g_{t0}(-c, -l, -p), \\ g_{b\pi}(c, l, p) &= g_{b0}(-c, -l, -p). \end{aligned} \quad (9)$$

One verifies that g_0 and g_{π} are related; in fact, (9) relates all 0 couplings to π couplings.

Supplementary relation of couplings z . Similarly, $\tilde{\mathcal{C}}$ keeps LR order when we apply it to any coupling z_i ; so we find a new relation for each one, which writes, in (k, c, p) notations,

$$\begin{aligned} z_{\pi}^{\text{SC}}(c, k) &= \pm z_0^{\text{SC}}(-c, -k), \\ z_{-}^{\text{SC}}(c, k) &= \pm z_{+}^{\text{SC}}(-c, -k), \end{aligned} \quad (10)$$

where \pm reads $+$ for $\Gamma = s$ or $\Gamma = p_x$ and $-$ for $\Gamma = d, g$ or $\Gamma = f_x, f_y$,

$$z_{\pi}^{\text{DW}}(p, k) = \pm z_0^{\text{DW}}(-p, -k),$$

$$z_{-}^{\text{DW}}(p, k) = \pm z_{+}^{\text{DW}}(-p, -k), \quad (11)$$

where \pm reads $+$ for site ordering and $-$ for bond ordering.

Again, one verifies that z_0 and z_{π} are related (as well as z_+ and z_-).

D. Truncation

Understanding symmetry relations does not only help us to reduce drastically the number of couplings, it is also an essential tool to make a proper truncation procedure, as we will explain now.

1. Triplet notation

Let us first introduce a useful notation for the k_{\parallel} dependence.

We have already defined the relative momentum representation $g(p_1, p_2, p'_2, p'_1)$, as well as the $g(c, l, p)$ notation, and explained how to keep only couplings, the arguments of which are all multiples of $2\Delta k_f$. We will focus on the (c, l, p) notation and write $c = 2n_1\Delta k_f, l = 2n_2\Delta k_f, p = 2n_3\Delta k_f$, with $(n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3$.

In short, we can write $g_i(n_1, n_2, n_3)$ ($i = 0, f0, t0, b0$), where (n_1, n_2, n_3) is called a triplet. Mind that, using symmetry relations, two triplets (n_1, n_2, n_3) and (n'_1, n'_2, n'_3) can represent the same coupling. One says that these triplets belong to the same symmetry orbit (or symmetry class). Mind also that the orbits are different for each coupling g_0, g_{f0}, g_{t0} and g_{b0} .

It would take too long to give an exhausted list of these orbits. Let us just observe that $(0, 0, 0)$'s orbit has only one element (itself), except for g_b , the orbits of which we detailed in Appendix C 3.

2. Choice of the truncation procedure

Obviously, one needs only renormalize one coupling per orbit. From the fundamental rules, explained in Sec. IV B 2, it follows that, even if one starts with only $g_0(0, 0, 0)$, $g_{f0}(0, 0, 0)$, and $g_{t0}(0, 0, 0)$, the RG equations will generate an infinite number of orbits. So, we will only keep couplings which satisfy $|n_i| \leq n_{\text{max}}$ (for a given n_{max}); but even so, in the RG equations of some orbits intervene couplings, with arguments lying outside of the permitted band (i.e., the distance of the corresponding momentum to the Fermi point exceeds $2n_{\text{max}}\Delta k_f$). In order to get a consistent closed set of differential equations, one needs to put these extra couplings back, inside the set of allowed couplings.

For instance, imagine that $n_{\text{max}} = 2$, and that $g(3, 2, 2)$ coupling intervenes in a RG equation. One cannot, unfortunately, just map $(3, 2, 2) \mapsto (2, 2, 2)$, because these triplets do not belong to the same symmetry orbit. In doing so, one would get a very poor k_{\parallel} dependence; we have actually proved, in the case of a (p_1, p_2, p'_2) representation, that all orbits of g_0 except $(0, 0, 0)$ would collapse into one single orbit.

Therefore, the truncation procedure *must be* compatible with all the symmetries of the system. We have used the (c, l, p) notation, which is very convenient. One can check

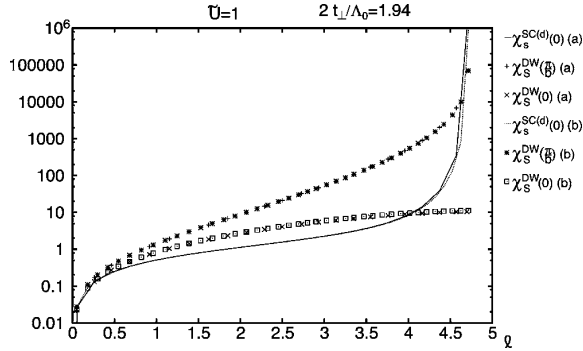


FIG. 6. Flow of the susceptibilities $\chi_s^{SC(d)}$ and χ_s^{DW} (intra or interband), at $\tilde{U}=1$ and $2t_{\perp}/\Lambda_0=1.94$: (a) usual RG procedure; (b) including k_{\parallel} dependence. You observe that $\chi_s^{DW}(0)$ does not diverge but only reaches a plateau.

that all the symmetries conserve $c+l+p$ modulo $4\Delta k_f$. This explains why $n_i \mapsto n_i \pm 1$ cannot be compatible with the symmetries. On the contrary, $n_i \mapsto n_i \pm 2$ is completely compatible, i.e., it maps a triplet onto an already defined orbit; hence we have used this mapping for the extra couplings.

With $n_{\max}=2$, for each coupling g we find 63 different couplings [that are $\{(i, j, k), i, j, k = -2, 0, 2\} \cup \{(\pm 1, \pm 1, i), i = -2, 0, 2\} \cup \{(\pm 1, i, \pm 1), i = -2, 0, 2\} \cup \{(i, \pm 1, \pm 1), i = -2, 0, 2\}$], which separate into 23 orbits (having 1, 2, or 4 elements), except for the g_b couplings. For these, the enumeration is more tedious, we eventually find 8 orbits (of 4 elements, see Appendix C 3). There are altogether $3 \times 23 + 8 = 77$ different orbits; if we include the spin separation, we thus need to calculate 154 coupled differential equations. $n_{\max}=3$ gives 390, while $n_{\max}=4$ gives 806.

E. Divergences of the susceptibilities

In the range of values for U that we have investigated, the RG flow is always diverging.

When the initial interaction Hamiltonian H_{int} is purely local, i.e., when the interchain scatterings are discarded ($C_{\text{back}}=C_{\text{for}}=0$), the interband SDW susceptibility $\chi_s^{DW}(\pi/b)$ is always divergent. In the superconducting phase, the SC singlet d susceptibility $\chi_s^{SC(d)}(0)$ is also divergent, at the same critical scale $\Lambda_c = \Lambda_0 e^{\ell_c}$. A third susceptibility $\chi_s^{DW}(0)$ increases and reaches a high plateau (see Fig. 6). Almost all other susceptibilities remain negligible.

When the parameters C_{back} or C_{for} are increased, both $\chi_s^{DW}(\pi/b)$ and $\chi_s^{SC(d)}$ decrease; they are progressively replaced by the divergence of the CDW susceptibility $\chi_C^{DW}(\pi/b)$, and, in the case of backward scattering, of the triplet SC susceptibility $\chi_t^{SC(f)}(0)$.

One finds at most four divergent susceptibilities [$\chi_s^{SC(d)}(0)$, $\chi_C^{DW}(\pi/b)$, $\chi_t^{SC(f)}(0)$, and $\chi_s^{DW}(\pi/b)$] at a time.

Since the RG flow is diverging, we cannot further calculate the renormalized couplings. To deduce a phase diagram, we must find out which mechanism dominates; we used two different criteria: according to the first one, we simply take the susceptibility which reaches the highest value $|\chi|$ at Λ_c ;

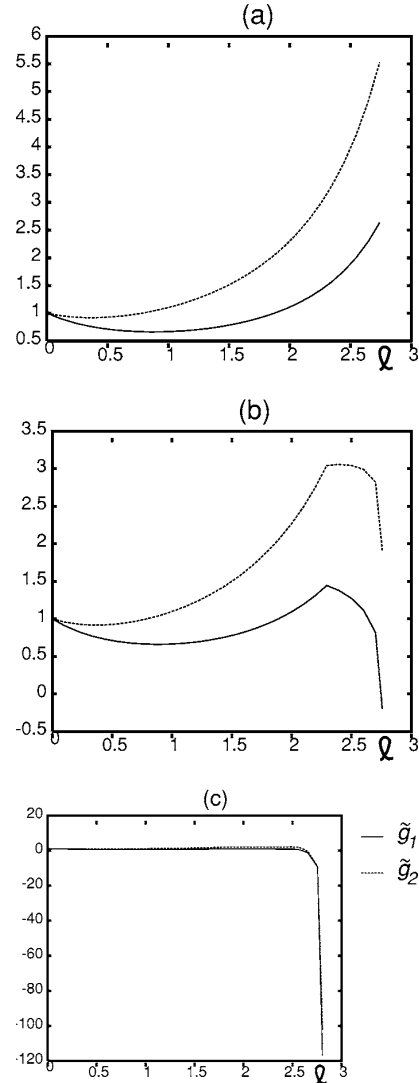


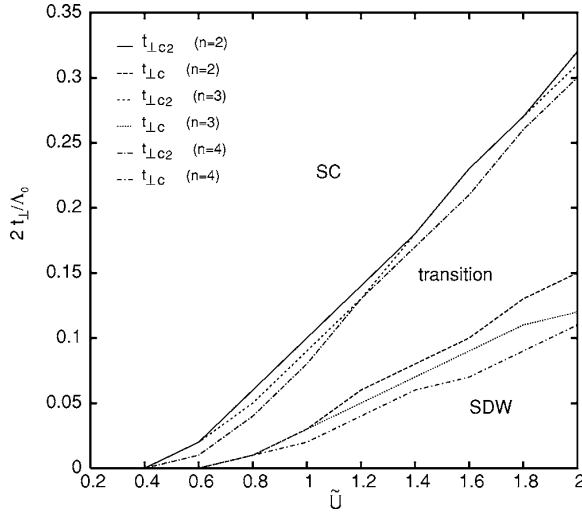
FIG. 7. Flow of the couplings \tilde{g}_{01} and \tilde{g}_{02} at (a) $t_{\perp} \leq t_{\perp c}(U)$, (b) $t_{\perp} = t_{\perp c}(U)$, and (c) $t_{\perp} \geq t_{\perp c}(U)$.

according to the second one, we take the susceptibility which has the highest slope.

These two criteria bring nonequal results. Although the first one is a poorer criterion, its conclusions remain stable when either the precision or n_{\max} are changed. The second is however preferred, as we will see its conclusions are physically consistent, contrary to the first one.

V. PHASE DIAGRAM WITH INITIALLY LOCAL INTERACTIONS

Let us first discuss the case of initially local interactions ($C_{\text{back}}=C_{\text{for}}=0$, no interchain scattering). Of course, we can only fix H_{int} at $\ell=0$, and the flow will develop nonlocal interactions.

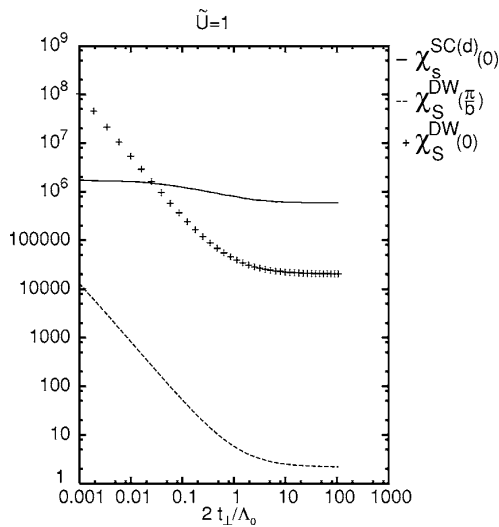
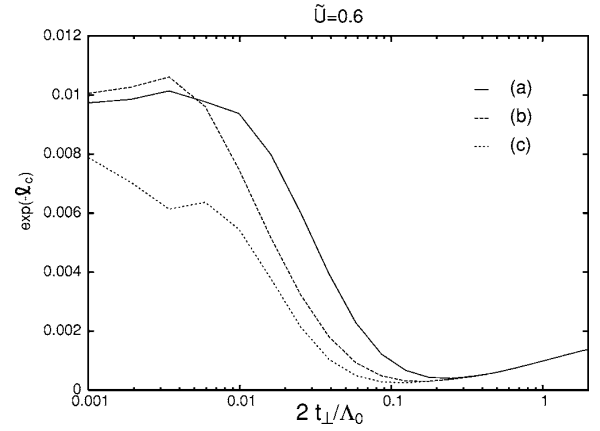
FIG. 10. Phase diagram when the k_{\parallel} dependence is included.

lowered]. This can be seen, for instance, in Fig. 11, which corresponds to Fig. 9 with no k_{\parallel} dependence.

SC critical temperature. The critical energy Λ_c at which SC susceptibility diverges gives an approximate indication of the SC critical temperature. We give a plot of Λ_c/Λ_0 versus $2t_{\perp}/\Lambda_0$; as seen in Fig. 12, Λ_c is roughly decreasing with t_{\perp} . The band gap parameter t_{\perp} is also increasing with pressure; therefore, this behavior is compatible with the experimental data, which show that T_c is decreasing with pressure in quasi-one-dimensional organic compounds.

B. Discussion

As already mentioned, as soon as the dependence of k_{\parallel} is included, we observe two separated phases, one purely SDW,

FIG. 11. Curves of $\chi_S^{(d)}(\Lambda_c)$ and $\chi_S^{DW}(\Lambda_c)$ versus $2t_{\perp}/\Lambda_0$ when k_{\parallel} is neglected.FIG. 12. Curves of $\Lambda_c/\Lambda_0 = e^{-\Lambda_c}$ versus $2t_{\perp}/\Lambda_0$ with $n_{\max}=2$ (a), $n_{\max}=3$ (b), and $n_{\max}=4$ (c).

the other one a SC phase with competing SDW instabilities.

On the other hand, for $t_{\perp} \geq 1$, i.e., when the initial bandwidth lies inside $[k_{f\pi}, k_{f0}]$, the k_{\parallel} dependence has no observable influence on the susceptibilities.

In the SDW phase, our results prove the existence of large antiferromagnetic fluctuations. We believe that these SDW instabilities are not the signature of a localized antiferromagnetic ground state, but of antiferromagnetic itinerant electrons, as it is indeed observed in Bechgaard salts. Actually, the flow is driving towards a fixed point, which does not seem to be the one-dimensional solution: for instance, the renormalized couplings \tilde{g}_1 and \tilde{g}_2 of the 1D solution are 0 and 1/2 and differ from the values which we obtain when the flow is diverging, in the SDW phase [see Fig. 7(a)].

We induce that the spin-gap should disappear in this SDW region, which is consistent with what Park and Kishine^{23,24} claim.

In the SC phase, the SC divergence is due to the Cooper channel, while that of density waves is due to the Peierls one (see, in the case of a single band model, Refs. 32 and 36). The appearance of d -wave superconductivity in ladder systems is well understood within a strong coupling scenario, where a spin gap leads to interchain Cooper pairing. However, in our calculations, we see that superconducting correlations are always enhanced by SDW fluctuations. Contrary to what Lee *et al.* claimed first,³⁷ there is an itinerant electron mechanism in this case, which is the weak coupling equivalent of the localized electron mechanism in the strong electron scenario. It was proposed by Emery,³⁸ and is essentially the spin analog of Kohn-Luttinger superconductivity. The mutual enhancement of the two channels is also discussed in Refs. 33 and 39.

As a consequence of this mutual enhancement, the spin-gap should not appear with the first appearance of SC instabilities, but for somehow larger values of t_{\perp} .

Moreover, we observe that the SC pairing is a $\mathbf{Q}=0$ mechanism, while the SDW are excited by $\mathbf{Q}=(2\Delta k_f, \pi/b)$ vectors. This can be explained by the symmetry of each channel. The Green function of the Cooper channel gives a factor $1/[\epsilon(\mathbf{k}) + \epsilon(-\mathbf{k})]$ and is minimized with the $\mathbf{k} \mapsto -\mathbf{k}$

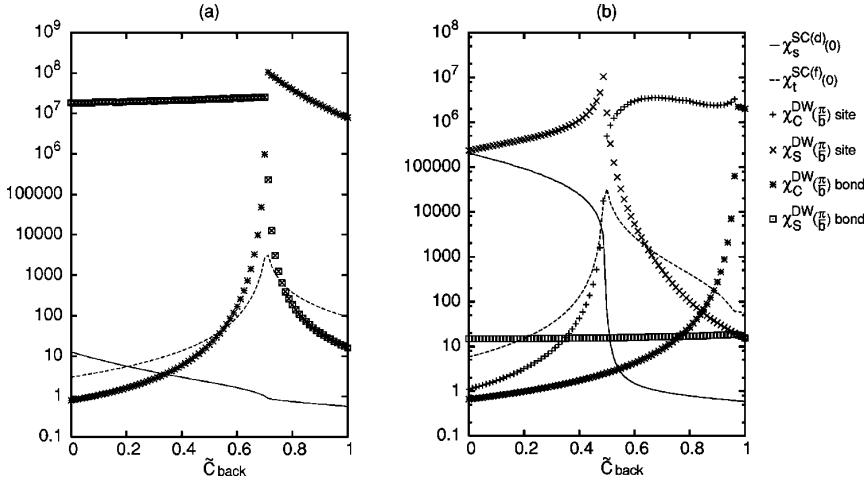


FIG. 13. Curves of the $\chi(\Lambda_c)$ versus \tilde{C}_{back} , at $\tilde{U}=1$ and (a) $2t_{\perp}/\Lambda_0=0.01$; (b) $2t_{\perp}/\Lambda_0=0.1$.

symmetry, which corresponds to an intraband process. The Green function of the Peierls channel gives a factor $1/[\epsilon(\mathbf{k})+\epsilon(\mathbf{k}+\mathbf{Q})]$ and is minimized with the $\mathbf{k} \mapsto \mathbf{k}+\mathbf{Q}$ symmetry, which corresponds to an interband process.

This can also be seen in the RG equations. $d \ln(z^{\text{SC}}(0))/d\ell$ depends only on g_0 and g_t , whereas $d \ln(z^{\text{SC}}(\pi/b))/d\ell$ depends on g_f and g_b . Since g_b processes are depressed as soon as $\Lambda \leq 2t_{\perp}$, 0 condensate are favored. Moreover, this predominance is stabilized by the $dg_t/d\ell$ equations, in which the Cooper term depends on g_0 , and by the $dg_b/d\ell$ equations, in which the Cooper term depends on g_f .

The same argument applies for DW instabilities. $d \ln(z^{\text{DW}}(0))/d\ell$ depends on g_0 and g_b , whereas $d \ln(z^{\text{DW}}(\pi/b))/d\ell$ depends on g_f and g_t . So, π processes are favored. Again, this is stabilized by the $dg_t/d\ell$ equations, in which the Peierls term depends on g_f , and by the $dg_b/d\ell$ equations, in which the Peierls term depends on g_0 .

The critical temperature, in the SC phases, is indicated in Fig. 12. We chose $\tilde{U}=0.6$ in order to avoid the SDW phase. The general trend is that of a quasi-one-dimensional system; the increasing curve, for small values of t_{\perp} , can be related to transition effect and to the furthered influence of the SDW fluctuations.

VI. PHASE DIAGRAM WITH INITIAL COULOMBIAN INTERCHAIN SCATTERING

A. Results

1. Influence of a backward interchain scattering

Let us now study the effect of a backward interchain scattering. This type of coupling has been investigated by Bourbonnais *et al.*²⁹ in the context of correlated quasi-one-dimensional metals, for which CDW correlations are enhanced and triplet superconducting instabilities can occur. When the parameter \tilde{C}_{back} is increased, the behavior of the susceptibilities depends on the parameters (t_{\perp}, \tilde{U}) .

Appearance of triplet SC and CDW. For $t_{\perp} \leq t_{\perp c}(U)$, the

SDW phase exists for \tilde{C}_{back} small enough. As \tilde{C}_{back} is further increased, the SDW instabilities are replaced by CDW ones. The transition is smooth, and there is a narrow region where both SDW and CDW coexist (region 3 in Fig. 16). We show a $2t_{\perp}/\Lambda_0=0.01$ section of the susceptibilities at Λ_c in Fig. 13.

For $t_{\perp} \geq t_{\perp c}(U)$, the SC phase (with SC singlet d and SDW instabilities) exists for \tilde{C}_{back} small enough. As \tilde{C}_{back} is further increased, the singlet SC modes are replaced by triplet ones, while SDW are replaced by CDW. Singlet and triplet SC appear to be antagonistic, and the transition is very pronounced; in the coexistence line between them, one also finds SDW and CDW divergences (see Fig. 14). On the contrary, the transition between SDW and CDW is very smooth, although the coexistence region is still narrow (region 2 in Fig. 16). We show a $2t_{\perp}/\Lambda_0=0.1$ section of the susceptibilities at Λ_c on Fig. 13.

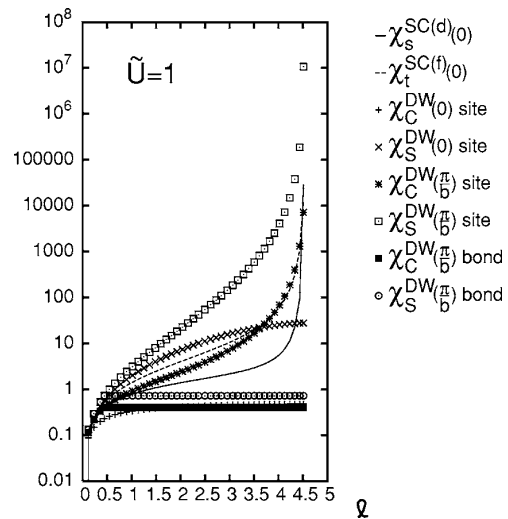


FIG. 14. Flow of the susceptibilities for $2t_{\perp}/\Lambda_0=0.32$ and $\tilde{C}_{\text{back}}=0.18$.

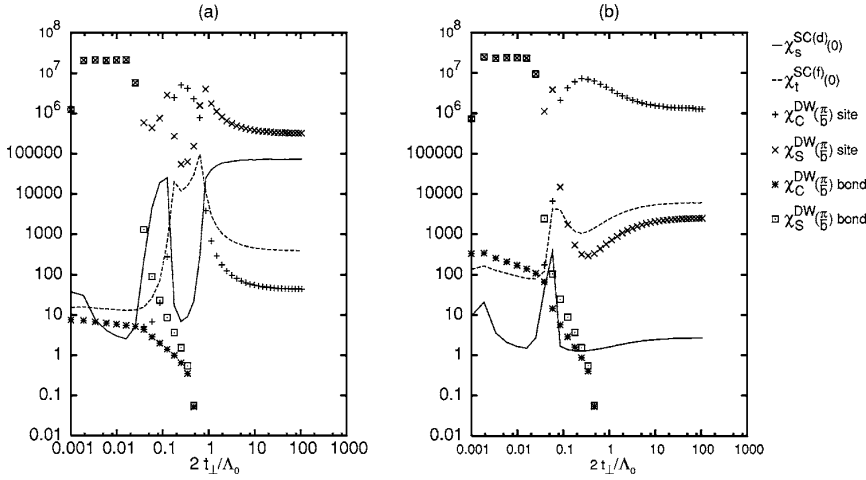


FIG. 15. Curves of the susceptibilities $\chi(\Lambda_c)$ versus $2t_{\perp}/\Lambda_0$, for (a) $\tilde{C}_{\text{back}}=0.4$; (b) $\tilde{C}_{\text{back}}=0.6$.

The triplet SC condensate has f_x symmetry. The corresponding susceptibility is mostly divergent in a region of coexistence with SDW and CDW (region 2 in Fig. 16), but it is also divergent in a region of coexistence with only CDW (region 1 in Fig. 16).

When \tilde{C}_{back} is large enough, the triplet SC modes are suppressed, and the region is a pure CDW phase. We show a section of the susceptibilities at Λ_c , for $\tilde{C}_{\text{back}}=0.2$ and $\tilde{C}_{\text{back}}=0.3$, on Fig. 15, which clearly indicates the domain of existence of the triplet SC.

Site or bond separation. As we have already observed it, in the case of $C_{\text{back}}=C_{\text{for}}=0$, for small values of t_{\perp} , site and bond SDW susceptibilities are degenerate, as well as site and bond CDW ones.

This generalizes for all values of \tilde{C}_{back} . The site or bond separation line is an increasing function $t_{\perp}g(C_{\text{back}})$ of C_{back} , shown in Fig. 16; For small values of U , this line crosses the SC domain, but for $\tilde{U}=1$ it is already disconnected from the SC frontier (although it remains close to it).

2. Influence of a forward interchain scattering

The phase diagram when C_{for} is included is very rich, and beyond the scope of this article.

We would like to emphasize only the fact that all SC instabilities are suppressed when C_{for} is increased. Figure 17 gives a typical flow of the susceptibilities, with a large \tilde{C}_{for} .

B. Discussion

Let us analyze these behaviors, which follow simple trends.

The CDW instabilities are enhanced when g_C is increased, whereas SDW ones are enhanced when g_S is increased (this can be verified in the corresponding RG equations of Appendix B 2). Similarly, singlet SC instabilities are enhanced when g_s is increased, whereas triplet ones are enhanced when g_t is increased.

So, an increase of C_{back} implies an increase of the real space coupling g_1 , and thus, from Eq. (A2), it favors CDW

instabilities against SDW ones, and from Eq. (A1), it favors triplet SC instabilities and depresses singlet SC ones.

Similarly, an increase of C_{for} implies an increase of the real space coupling g_2 , and thus, from Eq. (A2), it favors CDW and SDW instabilities, and from Eq. (A1), it depresses SC ones.

Of course, we examine here the influence of parameters C_{back} and C_{for} on the bare couplings. However, we believe that the flow could not just simply reverse this influence, even if the renormalized values of the couplings differ a lot from their bare values. Moreover, one verifies that these conclusions exactly correspond to the observed behavior.

The density wave interactions are on site, whereas the SC pairing are intersite (except for singlet s one), so we believe

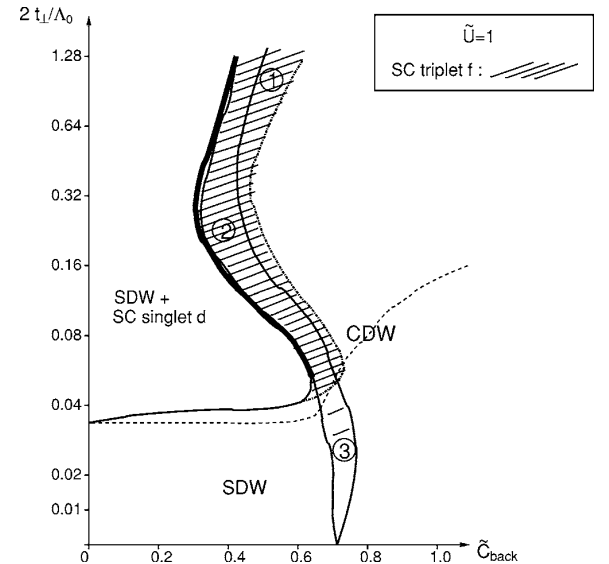


FIG. 16. Phase diagram for $\tilde{U}=1$. The shaded area indicates the divergence of the triplet susceptibility. The dashed line separates site or bond degenerated states (below) and nondegenerated ones (above). Other lines and domains are explained in the legend or in the text.

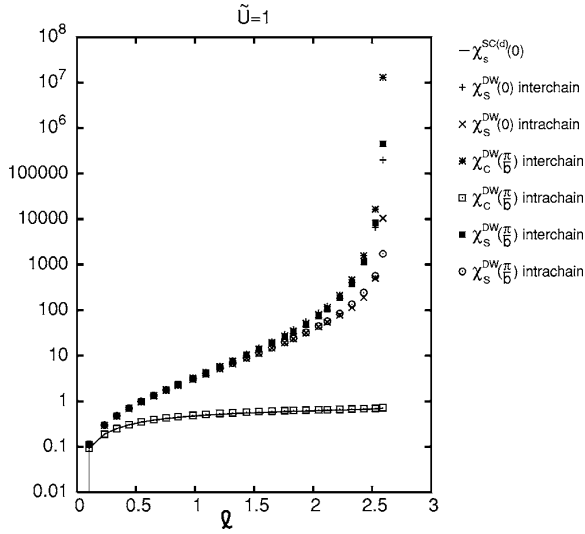


FIG. 17. Flow of the susceptibilities, $t_{\perp}=0.02$ and $\tilde{c}_{\text{for}}=0.95$.

that the DW instabilities appear first, and then enhance the SC ones. This is not true of the DW bond correlations, but we observed no divergences of these, and we have not studied any other sophisticated intersite DW excitation response.

From this point of view, the fact that π DW processes are favored, as we already discussed before, implies a π dephasing between both chains of the ladder. The π dephasing of the SDW thus fits perfectly singlet d condensate [which consists in a pairing of two electrons on a rung, with opposite spins, see Fig. 3(b)]. This accounts nicely for the appearance of singlet SC instability, induced by SDW one.

In the same trend of ideas, the π dephasing of the CDW fits triplet f_x condensate [which consists in a pairing of two electrons on each chain, one stepped by unity from the other, see Fig. 4(a)] and accounts for the appearance of triplet SC instability, induced by CDW one.

On the contrary, the triplet p_x condensate consists in two following electrons on one chain [see Fig. 4(b)], this pairing is not enhanced by CDW instabilities; in fact, it is the analog of singlet s condensate, which is not either enhanced by SDW instabilities, and is therefore disadvantaged, compared to d pairing.

As can be observed on Fig. 4, triplet f_x condensate are not incompatible with CDW. For instance, one could easily figure out a succession of condensate, with alternate spins, inducing back a global modulation of the chains. A similar scenario is not possible with triplet p condensate.

One should be aware that the symmetry classification we have used is very specific of the ladder system, and could not be extended to an infinite number of chains. The difference between p and f condensate is very subtle and the situation could reveal quite different in the general quasi-one-dimensional systems.

VII. CONCLUSION

We have investigated the phase diagram of a ladder system, in the Hubbard model, with an interchain coupling t_{\perp} ,

using functional RG method, in the OPI scheme. We have introduced an original parametrization of the k_{\parallel} dependence, and obtained rather new results; in particular, we have proved the existence of a new phase with only SDW fluctuations, for small enough values of t_{\perp} . From the divergences of the scattering couplings, we induce that this phase is different from the one-dimensional solution. However, for very small values of t_{\perp} ($t_{\perp} < \Lambda_0 10^{-4}$), we find the usual one-dimensional behavior.

Our results altogether prove that the k_{\parallel} dependence is important and must be taken into account in such a ladder system. The fact that this variable became influential in a ladder does not mean that the corresponding couplings $g(2\Delta k_f, -2\Delta k_f, 0)$, etc., are relevant. In fact, if the cutoff $\Lambda \rightarrow 0$, these couplings are left out of the integrated band, so they could only be marginal.²⁸ However, the divergence takes place at Λ_c , which is of the order of Δk_f , and this explains why these couplings, which are shifted by $\pm 2\Delta k_f$ from the Fermi points, have a nontrivial behavior and have to be taken into account. Moreover, as already explained in Section IV B 1, during the flow, these couplings influence those, with all momenta at the Fermi points, until $\Lambda = 2\Delta k_f$. This influence is still sensitive, when the divergence takes place. This explains why we could distinguish a new phase, which has not yet been observed by usual methods.

When t_{\perp} is very large, however (for instance, $t_{\perp} \sim \Lambda_0$), the flow continues up to $\Lambda_c \ll v_f \Delta k_f$ (otherwise, the integrated band would not vary much and the renormalized couplings neither differ much from their bare values), and the above argument applies, proving that couplings $g(2\Delta k_f, -2\Delta k_f, 0)$, etc., are marginal or irrelevant. In that case, k_{\parallel} are not influential, and our results coincide indeed with former calculations.

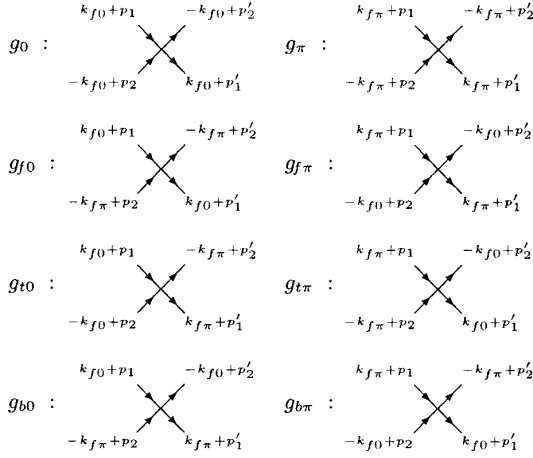
We have also given a detailed classification of the response function, which provides a convenient tool for the determination of order parameters and of related susceptibilities, corresponding to different instability processes.

We are proceeding now to a complete study of the long range correlations, and in particular, of the uniform susceptibility. This task however proves quite difficult, because of the k_{\parallel} dependence, which has to be carefully taken into account. We expect that the spin-gap will indeed disappear in the SDW phase we have brought to evidence.

We have also investigated the influence of interchain scattering, and showed that a backward interchain scattering can raise triplet superconductivity, a result consistent with the conclusions of a previous work by Bourbonnais *et al.*^{29,30} on correlated quasi-one-dimensional metals. The appearance of triplet SC in a ladder is a very exciting and promising result, since various authors^{40,41} claim to have found experimental evidence of these instabilities. Even the narrowness of the triplet SC existence region seems to fit the experimental data, which report high sensitivity of these fluctuations to some key parameters. This work gains to be compared with the previous work of Varma *et al.*, who did similar investigations.⁴²

ACKNOWLEDGMENTS

We would like to thank N. Dupuis, S. Haddad, and B. Douçot for fruitful discussions and advice. J.C.N. wishes to


 FIG. 18. Schematic definitions of the couplings g .

thank the Gottlieb Daimler- und Karl Benz-Stiftung for partial support.

APPENDIX A: COUPLINGS

1. Two-particle couplings

Here are the definitions of the different couplings g , from the two-particle parameter \mathcal{G} (also see Fig. 18):

$$g_0(p_1, p_2, p'_2, p'_1) = \mathcal{G}(k_{f_0} + p_1, -k_{f_0} + p_2, -k_{f_0} + p'_2, k_{f_0} + p'_1),$$

$$g_{\pi}(p_1, p_2, p'_2, p'_1) = \mathcal{G}(k_{f_{\pi}} + p_1, -k_{f_{\pi}} + p_2, -k_{f_{\pi}} + p'_2, k_{f_{\pi}} + p'_1),$$

$$g_{f_0}(p_1, p_2, p'_2, p'_1) = \mathcal{G}(k_{f_0} + p_1, -k_{f_{\pi}} + p_2, -k_{f_{\pi}} + p'_2, k_{f_0} + p'_1),$$

$$g_{f_{\pi}}(p_1, p_2, p'_2, p'_1) = \mathcal{G}(k_{f_{\pi}} + p_1, -k_{f_0} + p_2, -k_{f_0} + p'_2, k_{f_{\pi}} + p'_1),$$

$$g_{t_0}(p_1, p_2, p'_2, p'_1) = \mathcal{G}(k_{f_0} + p_1, -k_{f_0} + p_2, -k_{f_{\pi}} + p'_2, k_{f_{\pi}} + p'_1),$$

$$g_{t_{\pi}}(p_1, p_2, p'_2, p'_1) = \mathcal{G}(k_{f_{\pi}} + p_1, -k_{f_{\pi}} + p_2, -k_{f_0} + p'_2, k_{f_0} + p'_1),$$

$$g_{b_0}(p_1, p_2, p'_2, p'_1) = \mathcal{G}(k_{f_0} + p_1, -k_{f_{\pi}} + p_2, -k_{f_0} + p'_2, k_{f_{\pi}} + p'_1),$$

$$g_{b_{\pi}}(p_1, p_2, p'_2, p'_1) = \mathcal{G}(k_{f_{\pi}} + p_1, -k_{f_0} + p_2, -k_{f_{\pi}} + p'_2, k_{f_0} + p'_1).$$

The relations between the different representations can be found in Refs. 27 or 43. Here, they reduce to

$$g_s = -g_1 - g_2,$$

$$g_t = g_1 - g_2, \quad (\text{A1})$$

$$g_c = g_2 - 2g_1,$$

$$g_s = g_2. \quad (\text{A2})$$

2. Other couplings

Here are the definitions of the different couplings z , from the couplings to external fields \mathcal{Z} . (See also Fig. 19.)

$$z_0^{\text{SC}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{SC}}(-k_{f_0} + p_1, k_{f_0} + p_2, (q, 0), 0)$$

$$z_{\pi}^{\text{SC}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{SC}}(-k_{f_{\pi}} + p_1, k_{f_{\pi}} + p_2, (q, 0), \pi)$$

$$z_{+}^{\text{SC}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{SC}}(-k_{f_{\pi}} + p_1, k_{f_0} + p_2, (q, \frac{\pi}{b}), 0)$$

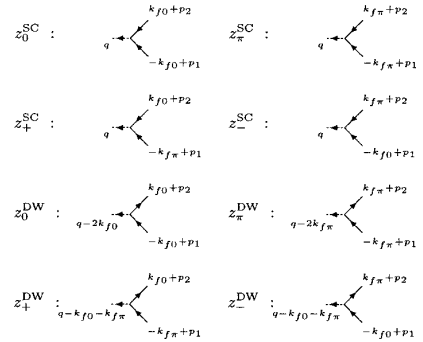
$$z_{-}^{\text{SC}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{SC}}(-k_{f_0} + p_1, k_{f_{\pi}} + p_2, (q, \frac{\pi}{b}), \pi)$$

$$z_0^{\text{DW}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{DW}}(-k_{f_0} + p_1, k_{f_0} + p_2, (q - 2k_{f_0}, 0), 0)$$

$$z_{\pi}^{\text{DW}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{DW}}(-k_{f_{\pi}} + p_1, k_{f_{\pi}} + p_2, (q - 2k_{f_{\pi}}, 0), \pi)$$

$$z_{+}^{\text{DW}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{DW}}(-k_{f_{\pi}} + p_1, k_{f_0} + p_2, (q - k_{f_0} - k_{f_{\pi}}, \frac{\pi}{b}), 0)$$

$$z_{-}^{\text{DW}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{DW}}(-k_{f_0} + p_1, k_{f_{\pi}} + p_2, (q - k_{f_0} - k_{f_{\pi}}, \frac{\pi}{b}), \pi)$$


 FIG. 19. Schematic definitions of the couplings z .

We omit the spin index α and the symmetry index Γ , and use the notation explained further in Appendix C 1. Remember that $\Gamma = s, d, g$ for $\alpha = s$ (singlet) and $\Gamma = p, f$ for $\alpha = t$ (triplet). The symmetry ($s, d_{x^2-y^2}, g, p_x, f_x, f_y$) applying to each one is detailed in the main text:

$$z_0^{\text{SC}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{SC}}(-k_{f_0} + p_1, k_{f_0} + p_2, (q, 0), 0),$$

$$z_{\pi}^{\text{SC}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{SC}}(-k_{f_{\pi}} + p_1, k_{f_{\pi}} + p_2, (q, 0), \pi),$$

$$z_{+}^{\text{SC}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{SC}}(-k_{f_{\pi}} + p_1, k_{f_0} + p_2, (q, \frac{\pi}{b}), 0),$$

$$z_{-}^{\text{SC}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{SC}}(-k_{f_0} + p_1, k_{f_{\pi}} + p_2, (q, \frac{\pi}{b}), \pi),$$

$$z_0^{\text{DW}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{DW}}(-k_{f_0} + p_1, k_{f_0} + p_2, (q - 2k_{f_0}, 0), 0),$$

$$z_{\pi}^{\text{DW}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{DW}}(-k_{f\pi} + p_1, k_{f\pi} + p_2, (q - 2k_{f\pi}, 0), \pi),$$

$$z_{+}^{\text{DW}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{DW}}\left(-k_{f\pi} + p_1, k_{f\pi} + p_2, \left(q - k_{f\pi} - k_{f\pi} \frac{\pi}{b}, 0\right), 0\right),$$

$$z_{-}^{\text{DW}}(p_1, p_2, q) = \mathcal{Z}^{\text{DW}}\left(-k_{f\pi} + p_1, k_{f\pi} + p_2, \left(q - k_{f\pi} - k_{f\pi} \frac{\pi}{b}, \pi\right), \pi\right).$$

APPENDIX B: RG EQUATIONS

We give here the detailed RG equations.

1. g couplings

Here are the RG equations for the couplings g , in (c, l, p) representation. The spin dependence is given, for all terms, by

$$\frac{dg_{\alpha}}{d\ell} = \sum_{\beta, \gamma} g_{\beta} (C_{\alpha}^{\beta\gamma} + \mathcal{P}_{\alpha}^{\beta\gamma}) g_{\gamma},$$

where C and \mathcal{P} correspond, respectively, to the Cooper and Peierls channels, and are given, in the g -ology representation, by

$$C_1 = -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad C_2 = -\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathcal{P}_1 = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

see, for instance, Refs. 27, 43, and 44. In the following equations, all two first terms are Cooper ones, whereas all two last terms are Peierls ones; so, we omit the spin dependence, which is given by the above equations, for each term. One gets

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{g}_0}{d\ell}(c, l, p) = & \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|c|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_0\left(c, \pm\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) + \frac{l+p}{2}, \mp\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) + \frac{l+p}{2}\right) \tilde{g}_0\left(c, \mp\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) + \frac{l-p}{2}, \mp\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) - \frac{l-p}{2}\right) \right. \\ & \left. + \sum_{\pm} \tilde{g}_0\left(c, \pm\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) + \frac{l+p}{2}, \mp\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) + \frac{l+p}{2}\right) \tilde{g}_{l\pi}\left(c, \mp\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) + \frac{l-p}{2}, \mp\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) - \frac{l-p}{2}\right) \right] \\ & + \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|p|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_0\left(\mp\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) + \frac{c+l}{2}, \pm\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) + \frac{c+l}{2}, p\right) \tilde{g}_0\left(\mp\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) + \frac{c-l}{2}, \mp\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) - \frac{c-l}{2}, p\right) \right] \\ & + \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|p + 2\Delta k_f|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{b0}\left(\mp\left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2}\right) + \frac{c+l}{2} - \Delta k_f, \pm\left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2}\right) + \frac{c+l}{2} - \Delta k_f, p\right) \right. \\ & \left. - \Delta k_f, p\right) \tilde{g}_{b\pi}\left(\mp\left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2}\right) + \frac{c-l}{2} + \Delta k_f, \mp\left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2}\right) - \frac{c-l}{2} + \Delta k_f, p + 2\Delta k_f\right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{g}_{f0}}{d\ell}(c, l, p) = & \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|c|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{f0}\left(c, \pm\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) + \frac{l+p}{2}, \mp\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) + \frac{l+p}{2}\right) \tilde{g}_{f0}\left(c, \mp\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) + \frac{l-p}{2}, \mp\left(\Lambda + \frac{|c|}{2}\right) - \frac{l-p}{2}\right) \right. \\ & \left. - \frac{l-p}{2}\right) \right] + \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|c + 2\Delta k_f|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{b0}\left(c, \pm\left(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_f|}{2}\right) + \frac{l+p}{2} - \Delta k_f, \mp\left(c\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_f|}{2}\right) + \frac{l+p}{2} - \Delta k_f\right) \right. \\ & \left. \tilde{g}_{b\pi}\left(c + 2\Delta k_f, \mp\left(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_f|}{2}\right) + \frac{l-p}{2} + \Delta k_f, \mp\left(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_f|}{2}\right) - \frac{l-p}{2} + \Delta k_f\right) \right] \\ & + \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|p|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{f0}\left(\mp\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) + \frac{c+l}{2}, \pm\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) + \frac{c+l}{2}, p\right) \tilde{g}_{f0}\left(\mp\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) + \frac{c-l}{2}, \mp\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) - \frac{c-l}{2}, p\right) \right. \\ & \left. + \sum_{\pm} \tilde{g}_0\left(\mp\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) + \frac{c+l}{2}, \pm\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) + \frac{c+l}{2}, p\right) \tilde{g}_{l\pi}\left(\mp\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) + \frac{c-l}{2}, \mp\left(\Lambda + \frac{|p|}{2}\right) - \frac{c-l}{2}, p\right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{g}_{i0}}{d\ell}(c,l,p) = & \frac{\Lambda}{8\Lambda+4|c|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_0 \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} \right) \tilde{g}_{i0} \left(c, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l-p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} \right) \right. \\ & + \sum_{\pm} \tilde{g}_{i0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} \right) \tilde{g}_{\pi} \left(c, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l-p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} \right) \left. \right] \\ & + \frac{\Lambda}{8\Lambda+4|p|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{i0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, p \right) \tilde{g}_{f\pi} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c-l}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) \right. \right. \\ & - \left. \left. \frac{c-l}{2}, p \right) + \sum_{\pm} \tilde{g}_{f0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, p \right) \tilde{g}_{i0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c-l}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{c-l}{2}, p \right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{g}_{b0}}{d\ell}(c,l,p) = & \frac{\Lambda}{8\Lambda+4|c|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{f0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} + \Delta k_f, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} + \Delta k_f \right) \tilde{g}_{b0} \left(c, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l-p}{2} \right. \right. \\ & \left. \left. - \Delta k_f, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} - \Delta k_f \right) \right] + \frac{\Lambda}{8\Lambda+4|c+2\Delta k_f|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{b0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{l+p}{2}, \mp \left(\Lambda \right. \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} \right) \tilde{g}_{f\pi} \left(c+2\Delta k_f, \mp \left(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2} \right) \frac{l-p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} \right) \left. \right] \\ & + \frac{\Lambda}{8\Lambda+4|p|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_0 \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2} + \Delta k_f, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2} + \Delta k_f, p \right) \tilde{g}_{b0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c-l}{2} \right. \right. \\ & \left. \left. - \Delta k_f, \mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) - \frac{c-l}{2} - \Delta k_f, p \right) \right] + \frac{\Lambda}{8\Lambda+4|p+2\Delta k_f|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{b0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, \pm \left(\Lambda \right. \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, p \right) \tilde{g}_{\pi} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{c-l}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|p+2\Delta k_f|}{2} \right) - \frac{c-l}{2}, p+2\Delta k_f \right) \left. \right]. \end{aligned}$$

2. z couplings

Here are the RG equations for the couplings z , in (k, c, p) representation. The z^{SC} couplings should be written in the singlet or triplet representation ($\alpha=s, t$), and the z^{DW} couplings should be written in the charge/spin representation ($\alpha=C, S$). Then, the spin dependence simply writes, for each one

$$\frac{dz_{\alpha}}{d\ell} = g_{\alpha} z_{\alpha}$$

and will therefore be again omitted. One gets

$$\begin{aligned} \frac{dz_0^{\text{SC}}}{d\ell}(c,k) = & \frac{\Lambda}{4\Lambda+2|c|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_0 \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{c}{2} - k, \right. \right. \\ & \left. \left. \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{c}{2} - k \right) z_0^{\text{SC}} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{c}{2} \right) \right. \\ & \left. + \sum_{\pm} \tilde{g}_{i0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{c}{2} - k, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) \right) \right. \end{aligned}$$

$$\left. + \frac{c}{2} - k \right) z_{\pi}^{\text{SC}} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{c}{2} \right) \left. \right],$$

$$\begin{aligned} \frac{dz_{+}^{\text{SC}}}{d\ell}(c,k) = & \frac{\Lambda}{4\Lambda+2|c|} \sum_{\pm} \tilde{g}_{f0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{c}{2} - k, \right. \\ & \left. \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{c}{2} - k \right) z_{+}^{\text{SC}} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{c}{2} \right) \\ & + \frac{\Lambda}{4\Lambda+2|c+2\Delta k_f|} \sum_{\pm} \tilde{g}_{b0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2} \right) \right. \\ & \left. + \frac{c}{2} - \Delta k_f - k, \mp \left(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2} \right) \right) \\ & + \frac{c}{2} - \Delta k_f - k \right) z_{-}^{\text{SC}} \left(c+2\Delta k_f, \pm \left(\Lambda + \frac{|c+2\Delta k_f|}{2} \right) \right. \\ & \left. + \frac{c}{2} + \Delta k_f \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dz_0^{\text{DW}}}{d\ell}(p, k) &= \frac{\Lambda}{4\Lambda + 2|p|} \sum_{\pm} \tilde{g}_0 \left(\pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{p}{2} + k, \right. \\ &\quad \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) - \frac{p}{2} - k, p \Big) z_0^{\text{DW}} \left(p, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{p}{2} \right) + \frac{\Lambda}{4\Lambda + 2|p + 2\Delta k_f|} \sum_{\pm} \tilde{g}_{b\pi} \left(\pm \left(\Lambda \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{p}{2} + \Delta k_f + k, \pm \left(\Lambda \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2} \right) \right) \\ &\quad - \frac{p}{2} + \Delta k_f - k, p + 2\Delta k_f \Big) z_{\pi}^{\text{DW}} \left(p + 2\Delta k_f, \right. \\ &\quad \left. \pm \left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2} \right) - \frac{p}{2} - \Delta k_f \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dz_+^{\text{DW}}}{d\ell}(p, k) &= \frac{\Lambda}{4\Lambda + 2|p|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{f0} \left(\pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{p}{2} + k, \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) - \frac{p}{2} - k, p \right) z_+^{\text{DW}} \left(p, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{p}{2} \right) + \sum_{\pm} \tilde{g}_{t\pi} \left(\pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{p}{2} + k, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{p}{2} - k, p \right) z_-^{\text{DW}} \left(p, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) - \frac{p}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

3. χ couplings

Here are the RG equations for the susceptibilities χ , with the same spin dependence as the corresponding z couplings, which is again omitted,

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_0^{\text{SC}}}{d\ell}(q) &= -\frac{\Lambda}{4\Lambda + 2|q|} \left[\sum_{\pm} z_0^{\text{SC}} \left(q, \pm \left(\Lambda + \frac{|q|}{2} \right) + \frac{q}{2} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\pm} z_{\pi}^{\text{SC}} \left(q, \pm \left(\Lambda + \frac{|q|}{2} \right) + \frac{q}{2} \right)^2 \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_+^{\text{SC}}}{d\ell}(q) &= -\frac{\Lambda}{4\Lambda + 2|q|} \sum_{\pm} z_+^{\text{SC}} \left(q, \pm \left(\Lambda + \frac{|q|}{2} \right) + \frac{q}{2} \right)^2 \\ &\quad - \frac{\Lambda}{4\Lambda + 2|q + 2\Delta k_f|} \sum_{\pm} z_-^{\text{SC}} \left(q + 2\Delta k_f, \pm \left(\Lambda \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{|q + 2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{q}{2} + \Delta k_f \right)^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_0^{\text{DW}}}{d\ell}(q) &= -\frac{\Lambda}{4\Lambda + 2|q|} \sum_{\pm} z_0^{\text{DW}} \left(-q, \pm \left(\Lambda + \frac{|q|}{2} \right) + \frac{q}{2} \right)^2 \\ &\quad - \frac{\Lambda}{4\Lambda + 2|q - 2\Delta k_f|} \sum_{\pm} z_{\pi}^{\text{DW}} \left(-q + 2\Delta k_f, \pm \left(\Lambda \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{|q - 2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{q}{2} - \Delta k_f \right)^2, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_+^{\text{DW}}}{d\ell}(q) &= -\frac{\Lambda}{4\Lambda + 2|q|} \left[\sum_{\pm} z_+^{\text{DW}} \left(-q, \pm \left(\Lambda + \frac{|q|}{2} \right) + \frac{q}{2} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \sum_{\pm} z_-^{\text{DW}} \left(-q, \pm \left(\Lambda + \frac{|q|}{2} \right) + \frac{q}{2} \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

APPENDIX C: SYMMETRIES

1. Ordinary symmetries

If we apply the conjugation symmetry C to the two-particle coupling \mathcal{G} , we get

$$\mathcal{G}(P'_1, P'_2, P_2, P_1) = \mathcal{G}(-P_1, -P_2, -P'_2, -P'_1).$$

If we apply A , we get

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_C(P_2, P_1, P'_2, P'_1) &= -2\mathcal{G}_C(P_1, P_2, P'_2, P'_1) \\ &\quad - 3\mathcal{G}_S(P_1, P_2, P'_2, P'_1), \end{aligned}$$

$$\mathcal{G}_S(P_2, P_1, P'_2, P'_1) = \mathcal{G}_C(P_1, P_2, P'_2, P'_1) + 2\mathcal{G}_S(P_1, P_2, P'_2, P'_1).$$

If we apply A' , we get

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_C(P_1, P_2, P'_1, P'_2) &= -2\mathcal{G}_C(P_1, P_2, P'_2, P'_1) \\ &\quad - 3\mathcal{G}_S(P_1, P_2, P'_2, P'_1), \end{aligned}$$

$$\mathcal{G}_S(P_1, P_2, P'_1, P'_2) = \mathcal{G}_C(P_1, P_2, P'_2, P'_1) + 2\mathcal{G}_S(P_1, P_2, P'_2, P'_1).$$

Finally, from parity P conservation, we get

$$\mathcal{G}(P_1, P_2, P'_2, P'_1) = \mathcal{G}(-P_1, -P_2, -P'_2, -P'_1).$$

Note that AA' simply gives $\mathcal{G}(P_2, P_1, P'_1, P'_2) = \mathcal{G}(P_1, P_2, P'_2, P'_1)$.

For the SC instability coupling, we will write the two-dimensional interaction vector $\mathbf{Q} = (Q_{\parallel}, Q_{\perp})$, and add a discrete variable $\theta = 0, \pi$, which indicates whether the R particle is on the 0 band ($\theta = 0$) or the π band ($\theta = \pi$); this way, one can distinguish 0-0, 0- π , π -0 or π - π processes (use Fig. 2 for help).

If we apply P , we get

$$\mathcal{Z}^{\text{SC}}(-P_1, -P_2, (-Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \theta) = \mathcal{Z}^{\text{SC}}(P_1, P_2, (Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \theta).$$

If we apply A or A' (note that in H_{SC} , the term with incoming momenta P_1 and P_2 is conjugate to that with outgoing momenta P_1 and P_2), we get

$$\mathcal{Z}_{\alpha}^{\text{SC}}(P_2, P_1, (Q_{\parallel}, 0), \theta) = \mathcal{Z}_{\alpha}^{\text{SC}}(P_1, P_2, (Q_{\parallel}, 0), \theta), \quad \alpha = s, t,$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{Z}_s^{\text{SC}(s)}\left(P_2, P_1, \left(Q_{\parallel}, \frac{\pi}{b} - Q_{\perp}\right), \theta\right) \\ &= \mathcal{Z}_s^{\text{SC}(s)}(P_1, P_2, (Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \pi - \theta), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{Z}_s^{\text{SC}(g)}\left(P_2, P_1, \left(Q_{\parallel}, \frac{\pi}{b} - Q_{\perp}\right), \theta\right) \\ &= -\mathcal{Z}_s^{\text{SC}(g)}(P_1, P_2, (Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \pi - \theta), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{Z}_t^{\text{SC}(p_x)}\left(P_2, P_1, \left(Q_{\parallel}, \frac{\pi}{b} - Q_{\perp}\right), \theta\right) \\ &= \mathcal{Z}_t^{\text{SC}(p_x)}(P_1, P_2, (Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \pi - \theta), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{Z}_t^{\text{SC}(f_y)}\left(P_2, P_1, \left(Q_{\parallel}, \frac{\pi}{b} - Q_{\perp}\right), \theta\right) \\ &= -\mathcal{Z}_t^{\text{SC}(f_y)}(P_1, P_2, (Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \pi - \theta). \end{aligned}$$

Finally, it is interesting to note that $\mathcal{Z}_s^{\text{SC}}$ (singlet) and $\mathcal{Z}_{t_x}^{\text{SC}}$ (triplet) change sign under S and are invariant under C , while $\mathcal{Z}_{t_y}^{\text{SC}}$ and $\mathcal{Z}_{t_z}^{\text{SC}}$ (both triplet) do the opposite.

For the DW instability coupling, we use the same notation. Note that Q_{\parallel} writes $-(p_1 - p_2 + 2k_{f\theta})$ for intraband processes, and $-(p_1 - p_2 + k_{f0} + k_{f\pi})$ for interband ones. If we apply CS , we get

$$\begin{aligned} & \mathcal{Z}^{\text{DW}}(-P_1, -P_2, (2k_{f\theta} - Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \theta) \\ &= \mathcal{Z}^{\text{DW}}(P_1, P_2, (-2k_{f\theta} + Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \theta), \end{aligned}$$

and if we apply AS , we get

$$\begin{aligned} & \mathcal{Z}^{\text{DW}}(P_2, P_1, (2k_{f\theta} - Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \theta) \\ &= \pm \mathcal{Z}^{\text{DW}}(P_1, P_2, (-2k_{f\theta} + Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \theta), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{Z}^{\text{DW}}\left(P_2, P_1, \left(k_{f0} + k_{f\pi} - Q_{\parallel}, \frac{\pi}{b} - Q_{\perp}\right), \theta\right) \\ &= \mp \mathcal{Z}^{\text{DW}}(P_1, P_2, (-k_{f0} - k_{f\pi} + Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \pi - \theta), \end{aligned}$$

where \pm reads $+$ for site ordering, and $-$ for bond ordering.

2. Supplementary symmetry

When we apply the special symmetry \tilde{C} to two-particle couplings \mathcal{G} , we get

$$\begin{aligned} & \mathcal{G}(k_{f0} + k_{f\pi} - P_1, k_{f0} + k_{f\pi} - P_2, k_{f0} + k_{f\pi} - P'_2, k_{f0} + k_{f\pi} - P'_1) \\ &= \mathcal{G}(P_1, P_2, P'_2, P'_1). \end{aligned}$$

When we apply the special symmetry \tilde{C} to SC instabilities \mathcal{Z}_{SC} , we get

$$\begin{aligned} & \mathcal{Z}_{\alpha}^{\text{SC}(\Gamma)}(-k_{f0} - k_{f\pi} - P_1, k_{f0} + k_{f\pi} - P_2, (-Q_{\parallel}, 0), \theta) \\ &= \pm \mathcal{Z}_{\alpha}^{\text{SC}(\Gamma)}(P_1, P_2, (Q_{\parallel}, 0), \pi - \theta), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{Z}_{\alpha}^{\text{SC}(\Gamma)}\left(-k_{f0} - k_{f\pi} - P_1, k_{f0} + k_{f\pi} - P_2, \left(-Q_{\parallel}, \frac{\pi}{b} - Q_{\perp}\right), \theta\right) \\ &= \pm \mathcal{Z}_{\alpha}^{\text{SC}(\Gamma)}(P_1, P_2, (Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \pi - \theta), \end{aligned}$$

where \pm reads $+$ for $\alpha=s, \Gamma=s$ or for $\alpha=t, \Gamma=p_x$, and $-$ for $\alpha=s, \Gamma=d, g$ or for $\alpha=t, \Gamma=f_x, f_y$.

When we apply the special symmetry \tilde{C} to DW instabilities \mathcal{Z}_{DW} , we get

$$\begin{aligned} & \mathcal{Z}^{\text{DW}}(-k_{f0} - k_{f\pi} - P_1, k_{f0} + k_{f\pi} - P_2, (2k_{f\theta} - Q_{\parallel}, 0), \theta) \\ &= \pm \mathcal{Z}^{\text{DW}}(P_1, P_2, (-2k_{f\theta} + Q_{\parallel}, 0), \pi - \theta), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{Z}^{\text{DW}}\left(-k_{f0} - k_{f\pi} - P_1, k_{f0} + k_{f\pi} - P_2, \left(-k_{f0} - k_{f\pi} - Q_{\parallel}, \frac{\pi}{b} - Q_{\perp}\right), \theta\right) \\ &= \pm \mathcal{Z}^{\text{DW}}(P_1, P_2, (-k_{f0} - k_{f\pi} + Q_{\parallel}, Q_{\perp}), \pi - \theta), \end{aligned}$$

where \pm reads $+$ for site ordering, and $-$ for bond ordering.

3. g_b orbits

Here are the 8 first orbits of the g_{b0} coefficient, in (c, l, p) representation:

$$\begin{aligned} & \{(0, 0, -2\Delta k_f, 0), (0, -2\Delta k_f, 0), (-2\Delta k_f, 0, 0), \\ & (-2\Delta k_f, -2\Delta k_f, -2\Delta k_f)\} \text{ are sym. equiv.}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \{(-4\Delta k_f, -4\Delta k_f, -2\Delta k_f), (-4\Delta k_f, 2\Delta k_f, 0), \\ & (2\Delta k_f, -4\Delta k_f, 0), \end{aligned}$$

$$(2\Delta k_f, 2\Delta k_f, -2\Delta k_f)\} \text{ id.},$$

$$\begin{aligned} & \{(0, -4\Delta k_f, 2\Delta k_f), (0, 2\Delta k_f, -4\Delta k_f), (-2\Delta k_f, -4\Delta k_f, -4\Delta k_f), \\ & (-2\Delta k_f, 2\Delta k_f, 2\Delta k_f)\} \text{ id.}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \{(-4\Delta k_f, 0, 2\Delta k_f), (-4\Delta k_f, -2\Delta k_f, -4\Delta k_f), (2\Delta k_f, 0, -4\Delta k_f), \\ & (2\Delta k_f, -2\Delta k_f, 2\Delta k_f)\} \text{ id.}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \{(0, -4\Delta k_f, -2\Delta k_f), (0, 2\Delta k_f, 0), (-2\Delta k_f, -4\Delta k_f, 0), \\ & (-2\Delta k_f, 2\Delta k_f, -2\Delta k_f)\} \text{ id.}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \{(-4\Delta k_f, 0, -2\Delta k_f), (-4\Delta k_f, -2\Delta k_f, 0), (2\Delta k_f, 0, 0), \\ & (2\Delta k_f, -2\Delta k_f, -2\Delta k_f)\} \text{ id.}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \{(0, 0, 2\Delta k_f), (0, -2\Delta k_f, -4\Delta k_f), \\ & (-2\Delta k_f, 0, -4\Delta k_f), (-2\Delta k_f, -2\Delta k_f, 2\Delta k_f)\} \text{ id.}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \{(-4\Delta k_f, -4\Delta k_f, 2\Delta k_f), (-4\Delta k_f, 2\Delta k_f, -4\Delta k_f), \\ & (2\Delta k_f, -4\Delta k_f, -4\Delta k_f), (2\Delta k_f, 2\Delta k_f, 2\Delta k_f)\} \text{ id.} \end{aligned}$$

APPENDIX D: FOURIER TRANSFORM

Creation and annihilation operators. If one writes $\psi_{ij\sigma}^{\dagger}$ the creator of a particle of spin σ , located in real space at posi-

tion i ($i \in \{1, \dots, M\}$), on chain j ($j = \pm 1$), the representation in the momentum space writes

$$L_{p,0,\sigma} = \Psi_{(-k_{f_0}+p,0)\sigma} = \sum_{ij} \psi_{ij\sigma} e^{-i(p-k_{f_0})ia},$$

$$L_{p,\pi,\sigma} = \Psi_{(-k_{f_\pi}+p,\pi/b)\sigma} = \sum_{ij} j \psi_{ij\sigma} e^{-i(p-k_{f_\pi})ia},$$

$$R_{p,0,\sigma} = \Psi_{(k_{f_0}+p,0)\sigma} = \sum_{ij} \psi_{ij\sigma} e^{-i(p+k_{f_0})ia},$$

$$R_{p,\pi,\sigma} = \Psi_{(k_{f_\pi}+p,\pi/b)\sigma} = \sum_{ij} j \psi_{ij\sigma} e^{-i(p+k_{f_\pi})ia},$$

with the notations of the text. $\Psi_{\mathbf{k}\sigma}$ stands for the absolute momentum representation, while L and R stand for the relative momentum representation. These relations are given for annihilation operators; one must take the complex conjugation to obtain those for the creation operators.

The reverse relations simply write, in terms of the Ψ operators,

$$\psi_{ij\sigma} = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{adP}{4\pi} e^{iap} (\Psi_{(P,0),\sigma} + j\Psi_{(P,\pi/b),\sigma}),$$

but one can also express them in terms of the L and R operators. Then, one can check that this transformation is the inverse of the first one.

Electron-electron pair operator. In real space, the SC order parameters are the mean value of the electron-electron pair operator, which writes

$$O^\alpha(\mathbf{X}) = \sum_{\substack{\mathbf{X}' \\ \sigma\sigma'}} \psi_{\mathbf{X}\sigma} \psi_{\mathbf{X}'\sigma'} \Gamma(\mathbf{X}, \mathbf{X}') \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha.$$

To each $\mathbf{Q}=(Q_{\parallel}, Q_{\perp})$ corresponds a Fourier component

$$O^\alpha(\mathbf{Q}) = \sum_{\mathbf{X}} e^{-\mathbf{Q}\cdot\mathbf{X}} O^\alpha(\mathbf{X}) = \sum_{ij} e^{-i(aQ_{\parallel}i+bQ_{\perp}j/2)} O^\alpha(\mathbf{X}).$$

We only keep the components \mathbf{Q} which lead to singularities; as explained in the main text, they are $(0,0)$ and $(\pm\Delta k_f, \pi/b)$. So, using the short notation 0 for the first and π_{\pm} for the second, one gets

$$O^\alpha(0) = \sum_i O^\alpha(ai, 1) + O^\alpha(ai, -1)$$

and

$$O^\alpha(\pi_{\pm}) = \sum_i -i e^{\mp i\Delta k_f a} (O^\alpha(ai, 1) - O^\alpha(ai, -1)),$$

where the main factor $O^\alpha(ai, 1) \pm O^\alpha(ai, -1) = \sum_{\sigma\sigma'} jj' (\pm 1)^j \psi_{ij\sigma} \phi_{i'j'\sigma'} \Gamma(a(i-i'), b(j-j')/2) \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha$ is the mixed representation of the pair operator.⁴⁵

Eventually, the $\psi_{ij\sigma}$ can be expressed in terms of the $\Psi_{\mathbf{p}\sigma}$, so that the components write

$$O^\alpha(\mathbf{Q}) = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{adP}{4\pi} \sum_{\theta=0,\pi} z_{\mathbf{Q}}(\mathbf{p}) \sum_{\sigma\sigma'} \Psi_{\mathbf{p},\sigma} \Psi_{\mathbf{Q}-\mathbf{p},\sigma'} \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha,$$

where $\mathbf{p}=(P, \theta/b)$ and we will also use $\mathbf{Q}=(Q_{\parallel}, Q_{\perp})$. Be careful that, for instance, with $\mathbf{Q}=(\Delta k_f, \pi/b)$ and $\mathbf{p}=(p-k_{f_0}, 0)$, and thus $\Psi_{\mathbf{p},\sigma}=\Psi_{(p-k_{f_0},0)\sigma}$, the calculation of $\Psi_{\mathbf{Q}-\mathbf{p},\sigma'}$ is not immediate; one gets $\Psi_{\mathbf{Q}-\mathbf{p},\sigma'}=\Psi_{(\Delta k_f-p+k_{f_0},\pi/b),\sigma'}$.

With $\Gamma(\mathbf{X}, \mathbf{X}')=\delta_{ii'}\delta_{jj'}$, one finds $z_0(\mathbf{p})=1$ (singlet 0 condensate of s symmetry), and $z_{\pi_{\pm}}(\mathbf{p})=-i$ (singlet π condensate of s symmetry). With $\Gamma(\mathbf{X}, \mathbf{X}')=\delta_{ii'}\delta_{j,-j'}$, one finds $z_0(\mathbf{p})=\cos(\theta)$ (singlet 0 condensate of d symmetry) and $z_{\pi_{\pm}}(\mathbf{p})=i\cos(\theta)$ (triplet π condensate of f_y symmetry). With $\Gamma(\mathbf{X}, \mathbf{X}')=\delta_{i,i'+1}\delta_{j,-j'}$, one finds $z_0(\mathbf{p})=\cos(aP)\cos(\theta)$ (singlet 0 condensate of extended d symmetry), as well as $z_0(\mathbf{p})=-i\sin(aP)\cos(\theta)$ (triplet 0 condensate of f_x symmetry), and $z_{\pi_{\pm}}(\mathbf{p})=\sin(a(P\mp\Delta k_f/2))\cos(\theta)$ (singlet π condensate of g symmetry) or $z_{\pi_{\pm}}(\mathbf{p})=ie^{\pm i(\Delta k_f a/2)}\cos(a(P\mp\Delta k_f/2))\cos(\theta)$ (triplet π condensate of extended f_y symmetry). With $\Gamma(\mathbf{X}, \mathbf{X}')=\delta_{i,i'+1}\delta_{jj'}$, one finds $z_0(\mathbf{p})=\cos(aP)$ (singlet 0 condensate of extended s symmetry) or $z_0(\mathbf{p})=-i\sin(aP)$ (triplet 0-condensate of p_x symmetry), and $z_{\pi_{\pm}}(\mathbf{p})=-ie^{\pm i(\Delta k_f a/2)}\cos(a(P\mp\Delta k_f/2))$ (singlet π condensate of extended s symmetry) or $z_{\pi_{\pm}}(\mathbf{p})=-e^{\pm i(\Delta k_f a/2)}\sin(a(P\mp\Delta k_f/2))$ (triplet π condensate of p_x symmetry).

Electron-hole pair operator. It is almost the same, with the product of a creation and an annihilation operators; be careful, however, that, in reciprocal space, one gets

$$\sum_{\sigma\sigma'} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{adP}{4\pi} \Psi_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \Psi_{\mathbf{Q}+\mathbf{p}\sigma'} z(\mathbf{p}) \tau_{\sigma\sigma'}^\alpha.$$

¹M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, and Y. Kitaoka, Phys. Rev. Lett. **73**, 3463 (1994).

²E. M. McCarron, Mater. Res. Bull. **23**, 1355 (1988); M. Sigrist, *ibid.* **23**, 1429 (1988).

³Z. Hiroi and M. Takano, Nature (London) **377**, 41 (1995).

⁴For a review of experimental results, see E. Dagotto, Rep. Prog. Phys. **62**, 1525 (1999).

⁵K. Penc and J. Sólyom, Phys. Rev. B **41**, 704 (1990).

⁶T. Giamarchi and H. J. Schulz, J. Phys. (France) **49**, 819 (1988).

⁷M. Tsuchiizu, P. Donohue, Y. Suzumura, and T. Giamarchi, Eur. Phys. J. B **19**, 185 (2001).

⁸J. I. Kishine and K. Yonemitsu, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 1714 (1998).

⁹K. Le Hur, Phys. Rev. B **63**, 165110 (2001).

¹⁰S. Haddad, S. Charfi-Kaddour, M. Heritier, and R. Bennaceur, J. Phys. IV **10**, 3 (2000).

¹¹E. Dagotto, J. Riera, and D. Scalapino, Phys. Rev. B **45**, 5744 (1992).

- ¹²M. Fabrizio, Phys. Rev. B **48**, 15838 (1993).
- ¹³D. V. Khveshchenko and T. M. Rice, Phys. Rev. B **50**, 252 (1993).
- ¹⁴T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera, and E. S. Swanson, Phys. Rev. B **47**, 3196 (1993).
- ¹⁵H.-H. Lin, L. Balents, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **56**, 6569 (1997).
- ¹⁶A. M. Finkel'stein and A. I. Larkin, Phys. Rev. B **47**, 10461 (1993).
- ¹⁷H. J. Schulz, Phys. Rev. B **53**, R2959 (1996).
- ¹⁸E. Orignac and T. Giamarchi, Phys. Rev. B **56**, 7167 (1997).
- ¹⁹K. Kuroki and H. Aoki, Phys. Rev. Lett. **72**, 2947 (1994).
- ²⁰D. V. Khveshchenko, Phys. Rev. B **50**, 380 (1993).
- ²¹D. J. Scalapino, J. Low Temp. Phys. **117**, 179 (1999).
- ²²R. M. Noack, S. R. White, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **73**, 882 (1994).
- ²³J. I. Kishine and K. Yonemitsu, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 2590 (1998).
- ²⁴Y. Park, S. Liang, and T. K. Lee, Phys. Rev. B **59**, 2587 (1999).
- ²⁵W. Metzner, C. Castellani, and C. Di Castro, Adv. Phys. **47**, 317 (1998).
- ²⁶C. Honerkamp, Ph.D. thesis, Naturwissenschaften ETH Zürich, Nr. 13868, 2000.
- ²⁷C. Halboth, Ph.D. thesis, RWTH Aachen, 1999.
- ²⁸R. Shankar, Rev. Mod. Phys. **66**, 129 (1994).
- ²⁹C. Bourbonnais and R. Duprat, Bull. Am. Phys. Soc. **49**, 179 (2004).
- ³⁰J. C. Nickel, R. Duprat, C. Bourbonnais, and N. Dupuis, cond-mat/0502614.
- ³¹S. Dusuel, F. V. de Abreu, and B. Douçot, Phys. Rev. B **65**, 094505 (2002).
- ³²J. Sólyom, Adv. Phys. **28**, 201 (1979).
- ³³C. Honerkamp, M. Salmhofer, N. Furukawa, and T. M. Rice, Phys. Rev. B **63**, 035109 (2001).
- ³⁴B. Binz, D. Baeriswyl, and B. Douçot, Ann. Phys. (N.Y.) **12**, 704 (2003).
- ³⁵C. Bourbonnais, in *Strongly Interacting Fermions and High- T_c Superconductivity*, edited by B. Douçot and J. Zinn-Justin, Les Houches LVI, 1991 (Elsevier Science, Amsterdam, 1995).
- ³⁶V. N. Prigodin and Y. A. Firsov, Sov. Phys. JETP **49**, 813 (1979).
- ³⁷P. A. Lee, T. M. Rice, and R. A. Klemm, Phys. Rev. B **15**, 2984 (1977).
- ³⁸V. J. Emery, Synth. Met. **13**, 21 (1986).
- ³⁹N. Furukawa, T. M. Rice, and M. Salmhofer, Phys. Rev. Lett. **81**, 3195 (1998).
- ⁴⁰I. J. Lee, P. M. Chaikin, and M. J. Naughton, Phys. Rev. B **62**, R14669 (2000); I. J. Lee, S. E. Brown, W. G. Clark, M. J. Strouse, M. J. Naughton, W. Kang, and P. M. Chaikin, Phys. Rev. Lett. **88**, 17004 (2002); I. J. Lee, D. S. Chow, W. G. Clark, M. J. Strouse, M. J. Naughton, P. M. Chaikin, and S. E. Brown, Phys. Rev. B **68**, 092510 (2003).
- ⁴¹R. W. Chemg and C. A. R. Sá de Melo, Phys. Rev. B **67**, 212505 (2002).
- ⁴²C. M. Varma and A. Zawadowski, Phys. Rev. B **32**, 7399 (1985).
- ⁴³J. C. Nickel, Thèse de troisième cycle, Université Paris 11, Paris, 2004.
- ⁴⁴D. Zanchi, Europhys. Lett. **55**, 376 (2001).
- ⁴⁵See, for instance, D. Poilblanc, M. Heritier, G. Montambaux, and P. Lederer, J. Phys. C **19**, L321 (1986).

**Erratum: Renormalization-group calculations with k_{\parallel} -dependent couplings in a ladder
[Phys. Rev. B 72, 045120 (2005)]**

G. Abramovici, J. C. Nickel, and M. Héritier
(Received 24 January 2008; published 17 March 2008)

DOI: [10.1103/PhysRevB.77.129902](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.129902) PACS number(s): 71.10.Li, 71.10.Pm, 71.10.Fd, 74.20.-z, 99.10.Cd

In Appendix B, part 1, the sign before the Peierls terms in the renormalization group equations is wrong, but was correct in the numerical simulation, so that none of the results are compromised. Here are the corrected equations:

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{g}_0}{d\ell}(c, l, p) = & \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|c|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_0 \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} \right) \tilde{g}_0 \left(c, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l-p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} \right) \right. \\ & \left. + \sum_{\pm} \tilde{g}_{i0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} \right) \tilde{g}_{i\pi} \left(c, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l-p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} \right) \right] \\ & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|p|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_0 \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, p \right) \right. \\ & \left. \times \tilde{g}_0 \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c-l}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) - \frac{c-l}{2}, p \right) \right] \\ & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|p + 2\Delta k_f|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{b0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{c+l}{2} - \Delta k_f, \pm \left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{c+l}{2} - \Delta k_f, p \right) \right. \\ & \left. \times \tilde{g}_{b\pi} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{c-l}{2} + \Delta k_f, \mp \left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_f|}{2} \right) - \frac{c-l}{2} + \Delta k_f, p + 2\Delta k_f \right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{g}_{f0}}{d\ell}(c, l, p) = & \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|c|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{f0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} \right) \right. \\ & \left. \times \tilde{g}_{f0} \left(c, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l-p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} \right) \right] \\ & + \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|c + 2\Delta k_f|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{b0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} - \Delta k_f, \mp \left(c\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} - \Delta k_f \right) \right. \\ & \left. \times \tilde{g}_{b\pi} \left(c + 2\Delta k_f, \mp \left(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_f|}{2} \right) + \frac{l-p}{2} + \Delta k_f, \mp \left(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_f|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} + \Delta k_f \right) \right] \\ & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|p|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{f0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, p \right) \right. \\ & \left. \times \tilde{g}_{f0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c-l}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) - \frac{c-l}{2}, p \right) \right. \\ & \left. + \sum_{\pm} \tilde{g}_{i0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, p \right) \tilde{g}_{i\pi} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c-l}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) - \frac{c-l}{2}, p \right) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{g}_{i0}}{d\ell}(c, l, p) = & \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|c|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_0 \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} \right) \tilde{g}_{i0} \left(c, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l-p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} \right) \right. \\ & \left. + \sum_{\pm} \tilde{g}_{i0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} \right) \tilde{g}_{i\pi} \left(c, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l-p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} \right) \right] \\ & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|p|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{i0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, p \right) \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \tilde{g}_{f\pi} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c-l}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) - \frac{c-l}{2}, p \right) \\ & + \sum_{\pm} \tilde{g}_{f0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, p \right) \\ & \times \tilde{g}_{i0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c-l}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) - \frac{c-l}{2}, p \right) \Big], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{g}_{b0}}{d\ell}(c, l, p) = & \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|c|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{f0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} + \Delta k_f, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} + \Delta k_f \right) \right. \\ & \times \tilde{g}_{b0} \left(c, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) + \frac{l-p}{2} - \Delta k_f, \mp \left(\Lambda + \frac{|c|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} - \Delta k_f \right) \Big] \\ & + \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|c + 2\Delta k_{fl}|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{b0} \left(c, \pm \left(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_{fl}|}{2} \right) + \frac{l+p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_{fl}|}{2} \right) + \frac{l+p}{2} \right) \right. \\ & \times \tilde{g}_{f\pi} \left(c + 2\Delta k_f, \mp \left(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_{fl}|}{2} \right) \frac{l-p}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|c + 2\Delta k_{fl}|}{2} \right) - \frac{l-p}{2} \right) \Big] \\ & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|p|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_0 \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2} + \Delta k_f, \pm \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c+l}{2} + \Delta k_f, p \right) \right. \\ & \times \tilde{g}_{b0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) + \frac{c-l}{2} - \Delta k_f, \mp \left(\Lambda + \frac{|p|}{2} \right) - \frac{c-l}{2} - \Delta k_f, p \right) \Big] \\ & - \frac{\Lambda}{8\Lambda + 4|p + 2\Delta k_{fl}|} \left[\sum_{\pm} \tilde{g}_{b0} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_{fl}|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, \pm \left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_{fl}|}{2} \right) + \frac{c+l}{2}, p \right) \right. \\ & \times \tilde{g}_{\pi} \left(\mp \left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_{fl}|}{2} \right) + \frac{c-l}{2}, \mp \left(\Lambda + \frac{|p + 2\Delta k_{fl}|}{2} \right) - \frac{c-l}{2}, p + 2\Delta k_f \right) \Big]. \end{aligned}$$

Functional renormalization-group calculation of the Fermi surface of a spin ladder

G. Abramovici and M. Héritier

Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris-Sud, CNRS, UMR 8502, F-91405 Orsay, Cedex, France

(Received 12 October 2006; revised manuscript received 18 December 2006; published 30 March 2007)

We study nonconventional superconductivity on a ladder, improving the predictions of the Hubbard model. The determination of the Fermi surface, in two or three dimensions, remains a very hard task, but it is exactly solvable for a single ladder. We use functional renormalization group methods, which prove, here, scheme dependant. In the superconducting phase, the binding-antibinding gap is stabilized, but in the antiferromagnetic phase, it shrinks and the ladder turns one dimensional.

DOI: [10.1103/PhysRevB.75.094516](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.094516)

PACS number(s): 74.20.Mn, 71.10.Fd, 71.10.Li, 74.20.Rp

INTRODUCTION

The mechanism of unconventional superconductivity remains a major source of interest for theorists. Anisotropic crystals, in particular organic ones, are expected, both from a theoretical point of view and experimentally, to show unconventional behavior. Among the many materials, which are currently studied, $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ (Refs. 1 and 2) or $(\text{LaY})_y(\text{SrCe})_{14-y}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ (Refs. 3 and 4) show very anisotropic structures, and can be well represented by a single ladder. Indeed, unconventional superconductivity has been observed in these materials,^{5,6} in particular, superconducting (SC) phases are found in the vicinity of antiferromagnetic ones, sometimes with a gapped phase in between.⁷ These observations indicate the possibility of coexistence of magnetism and superconductivity.

The materials we have studied in this work belong to the class of strongly correlated quasi-one-dimensional systems of electrons. One important peculiarity of these systems is the existence of nearly degenerate phases with different symmetries and, therefore, the possibility of very rich phase diagrams, commonly observed experimentally and often predicted theoretically. In quasi-one-dimensional systems, it is well established that two kinds of Fermi surface instabilities can occur: (i) Cooper instabilities, including singlet or triplet superconducting ones; (ii) Peierls instabilities, including spin density wave (SDW) or charge density wave (CDW) ones. A very important and quite general property is that these two kinds of instability are coupled, because of the topology of the phase space in one dimension. The questions about how these instabilities compete and sometimes coexist are very important for the physics of these systems. Because of this instability coupling, such a discussion cannot be done in a Fermi liquid approach, but requires more sophisticated methods.

Different approaches have been used, to understand unconventional superconductivity, like Monte Carlo simulations with the t - J model^{8,9} or with the Hubbard model,^{10,11} or exact diagonalization,¹² DMRG method¹³ or variational approach,¹⁴ etc.¹⁵

An important step forward has been taken with the use of the renormalization group (RG).¹⁶ Not only can these calculations predict a SC phase,^{17,18} but they give a new interpretation of this unconventional mechanism: it results from the competition between the Cooper channel (formation of pairs

of electrons) and the Peierls channel (formation of electron-hole pairs).¹⁹

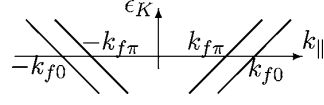
The RG method is a fixed point method, its application in condensed matter has a severe drawback: the RG flow is always diverging, so that no exact fixed point can be obtained; in other words, it is impossible to calculate the renormalized parameters of these systems. Nevertheless, one can calculate the phase diagram, by examining which susceptibilities are diverging (i.e., are unstable) and which are remaining finite: the processes corresponding to nondivergent susceptibilities are negligible compared to those corresponding to divergent ones.

This paper is devoted to the study of a ladder system, which consists of two coupled chains of atoms, the intrachain coupling is written t_{\parallel} , the interchain one t_{\perp} , with $t_{\perp} \ll t_{\parallel}$. We use the Hubbard model, which has been widely studied by theorists,²⁰ though its complete analysis has not yet been achieved. Fabrizio²¹ has previously calculated the phase diagram of the ladder by a two-loop expansion using RG equations. He obtains a very rich diagram, with Hubbard parameter U ranging over $[0, 18\pi v_f]$ (v_f is the Fermi velocity) and t_{\perp} over $[0, 1.2\Lambda_o]$ (Λ_o is the half band width), though its validity is somehow questionable, since U/v_f is the parameter of this expansion. If one focuses on range $U \in [0, 2\pi v_f]$, Fabrizio predicts a superconducting phase, which he named phase I; in this phase, the RG flow of susceptibilities shows several divergences: the SDW channel coexists with the superconducting one.

We proved recently, for small values of the interchain interaction t_{\perp} , the existence of an extra SDW phase, in this region of parameters, by including K_{\parallel} dependence of the couplings.²² This phase is characterized by the flow of all superconducting susceptibilities, which remain finite, while SDW ones diverge. These calculations have been performed with a fixed Fermi surface. This work also established the importance of high energy processes (like the backward interband scattering g_b , see below) during the RG flow: although these processes die before the flow becomes divergent, they prove eventually influential.

In this paper, we will discuss the effect of the renormalization of the Fermi surface, in the line of these K_{\parallel} dependent RG calculations. One of the questions is whether our results, in particular the existence of a SDW phase, are valid or not. The answer is fortunately yes.

In the last decade, RG methods have achieved very sophisticated schemes: here, we use either the one particle ir-


 FIG. 1. The 2-band dispersion in \parallel direction.

reducible (OPI) scheme, following Refs. 23 and 24, or the Wick-ordered one, following Ref. 25, and calculated the scatterings in a one-loop expansion. The renormalization of the Fermi surface remains valid, in this approximation.

A remarkable result is that the phase diagram becomes scheme dependent. This question was first addressed by Schulz, who argued that high energy processes would be influent in specific cases: this implies that the way they are included in the RG calculation would matter.¹⁸ The response it receives here contradicts the usual opinion, shared by a number of specialists, that all schemes are equivalent and give identical results.

We will first describe the model and the RG equations, then discuss the choice of the RG scheme and analyze our results.

MODEL

In a ladder, there are two separated bands in the dispersion diagram (0, binding and π , antibinding), because of the Coulombian interaction between the chains. In other words, in the K_{\perp} direction, there are only two physical points, O and π/b (b is the interchain distance). There are four Fermi points ($-k_{f0}, -k_{f\pi}, k_{f\pi}, k_{f0}$) in the K_{\parallel} direction (see Fig. 1). We will simply note K , for the momenta in the K_{\parallel} direction (and k will always be the relative momentum to a given Fermi point).

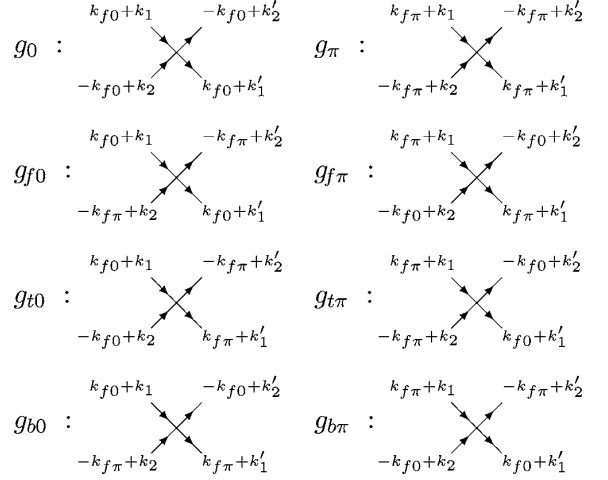
The Fermi surface gap is defined as $\Delta k_f \equiv k_{f0} - k_{f\pi}$. From Luttinger theorem, $k_{f0} + k_{f\pi}$ is constant, so Δk_f is the only Fermi surface parameter. It relates t_{\perp} the interchain interaction by $\Delta k_f = 2t_{\perp}/v_f$.

The kinetic Hamiltonian is linearized around the Fermi points²⁶ with a single Fermi velocity v_f , and writes (R reads *right moving particle* and L *left moving one*)

$$H_{\text{cin}} = \sum_{\sigma} v_f \left(\sum_K (K - k_{f0}) R_{0\sigma}^{\dagger}(K) R_{0\sigma}(K) + (K - k_{f\pi}) R_{\pi\sigma}^{\dagger}(K) R_{\pi\sigma}(K) + (K + k_{f0}) L_{0\sigma}^{\dagger}(K) L_{0\sigma}(K) + (K + k_{f\pi}) L_{\pi\sigma}^{\dagger}(K) L_{\pi\sigma}(K) \right).$$

The interaction Hamiltonian writes

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \mathbf{K}'_1, \mathbf{K}'_2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \mathcal{G}_4 R_{\mathbf{K}'_1 \sigma_1}^{\dagger} R_{\mathbf{K}'_2 \sigma_2}^{\dagger} R_{\mathbf{K}_2 \sigma_2} R_{\mathbf{K}_1 \sigma_1} + \mathcal{G}_4 L_{\mathbf{K}'_1 \sigma_1}^{\dagger} L_{\mathbf{K}'_2 \sigma_2}^{\dagger} L_{\mathbf{K}_2 \sigma_2} L_{\mathbf{K}_1 \sigma_1} + \mathcal{G}_1(\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \mathbf{K}'_1, \mathbf{K}'_2) R_{\mathbf{K}'_1 \sigma_1}^{\dagger} L_{\mathbf{K}'_2 \sigma_2}^{\dagger} R_{\mathbf{K}_2 \sigma_2} L_{\mathbf{K}_1 \sigma_1} + \mathcal{G}_2(\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \mathbf{K}'_1, \mathbf{K}'_2) R_{\mathbf{K}'_1 \sigma_1}^{\dagger} L_{\mathbf{K}'_2 \sigma_2}^{\dagger} L_{\mathbf{K}_2 \sigma_2} R_{\mathbf{K}_1 \sigma_1}$$


 FIG. 2. Schematic definitions of the couplings \mathcal{G} .

in which \mathcal{G}_{α} is the two-particle coupling, and we have used the g-ology representation. More precisely, there are eight different couplings $g_0, g_{\pi}, g_{f0}, g_{f\pi}, g_{t0}, g_{t\pi}, g_{b0},$ and $g_{b\pi}$, corresponding to the interaction processes shown in Fig. 2 (in this way, all K_{\perp} dependence of the couplings is included in the symbolic names, whereas all K_{\parallel} dependence is given in their arguments, see more details in Ref. 22), plus the $\mathcal{G}_4 = \mathcal{G}(RRRR) = \mathcal{G}(LLLL)$ couplings which are not renormalized in a one-loop expansion. At the beginning of the RG flow ($\Lambda = \Lambda_0$), all scatterings \mathcal{G}_{α} are set to U , the Hubbard constant, thus one simply gets $\mathcal{G}_4 = U$.

RG EQUATIONS

The RG equations for scatterings $g_0, g_{\pi}, g_{f0}, \dots, g_{b\pi}$ express their derivative as the sum of two terms: the first term is usually called Cooper term, since it comes from an electron-electron diagram; the second one is called Peierls term, since it comes from an electron-hole diagram. One can write, in a generic way,

$$\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \ell}(\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \mathbf{K}_3, \mathbf{K}_4) = \mathcal{C} \sum_{\mathbf{K}', \mathbf{K}''} \mathcal{G}(\mathbf{K}'_1, \mathbf{K}'_2, \mathbf{K}'_3, \mathbf{K}'_4) \mathcal{G}(\mathbf{K}''_1, \mathbf{K}''_2, \mathbf{K}''_3, \mathbf{K}''_4) + \mathcal{P} \sum_{\mathbf{K}', \mathbf{K}''} \mathcal{G}(\mathbf{K}'_1, \mathbf{K}'_2, \mathbf{K}'_3, \mathbf{K}'_4) \mathcal{G}(\mathbf{K}''_1, \mathbf{K}''_2, \mathbf{K}''_3, \mathbf{K}''_4) \quad (1)$$

in which \mathcal{C} and \mathcal{P} are coefficients (\mathcal{C} stands for Cooper term while \mathcal{P} stands for Peierls term); explicit and detailed sums are given in Appendix B of Ref. 22; ℓ is the flow parameter (the half band width is $\Lambda = \Lambda_0 e^{-\ell}$).

For all couplings, except g_{b0} and $g_{b\pi}$, we get, in the OPI scheme, $\mathcal{C} = 1/(4+2|\tilde{K}_1 + \tilde{K}_2|)$ and, in the Wick-ordered one, $\mathcal{C} = 1/(4-2|\tilde{K}_1 + \tilde{K}_2|)$ (here $\tilde{K} \equiv v_f K/\Lambda$); we get, in the OPI scheme, $\mathcal{P} = 1/(4+2|\tilde{K}_1 - \tilde{K}_3|)$ and, in the Wick-ordered one, $\mathcal{P} = 1/(4-2|\tilde{K}_1 - \tilde{K}_3|)$. In fact, the generic expression (1) does

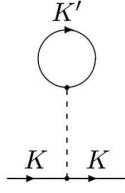


FIG. 3. One-loop tadpole diagram.

not apply to couplings g_b : the Cooper term splits into two terms, one with the same \mathcal{C} factor, one with a special factor $\mathcal{C}^{\text{sp}} = 1/(4+2|\tilde{K}_1 + \tilde{K}_2 \pm 2\Delta\tilde{k}_f|)$ for the OPI scheme and $\mathcal{C}^{\text{sp}} = 1/(4-2|\tilde{K}_1 + \tilde{K}_2 \pm 2\Delta\tilde{k}_f|)$ for the Wick-ordered one ($\Delta\tilde{k}_f \equiv v_f\Delta k_f/\Lambda$); the Peierls term splits into two terms, one with the same \mathcal{P} factor, one with a special factor $\mathcal{P}^{\text{sp}} = 1/(4+2|\tilde{K}_1 - \tilde{K}_3 \pm 2\Delta\tilde{k}_f|)$ for the OPI scheme and $\mathcal{P}^{\text{sp}} = 1/(4-2|\tilde{K}_1 - \tilde{K}_3 \pm 2\Delta\tilde{k}_f|)$ for the Wick-ordered one (\pm reads + for g_{b0} and - for $g_{b\pi}$).

The RG equation for Δk_f is obtained through the two-loop expansion of the self-energy Σ , following a standard calculation.^{21,27,28} Let $G_o = Z/[-i\omega + v_f(K - k_{f0} + \mu)]$ be the free right-hand propagator of the band ($\theta = 0, \pi$), and μ the chemical potential, one can write

$$\Sigma_{R\theta} = \delta G_o^{-1} = \frac{1}{Z} [\delta v_f(K - k_{f0}) - v_f \delta k_{f0} + \delta\mu] - \frac{G_o^{-1}}{Z} \delta Z.$$

In Fig. 3, we show the tadpole diagram, corresponding to a one-loop contribution in this expansion of Σ : after all simplifications (one must subtract carefully the contribution of $\delta\mu$), one gets, in this one-loop expansion,

$$\delta k_{f0} = -\delta k_{f\pi} = \frac{Z}{\pi v_f^2} \left(g_{\pi 2} - g_{02} + g_{f\pi 2} - g_{f0 2} - \frac{g_{\pi 1} - g_{01} + g_{f\pi 1} - g_{f0 1}}{2} \right).$$

It is obvious, in this formula, that Δk_f depends on K_{\parallel} , however, this dependency gives very small variations and can be neglected.

There are two different two-loop diagrams, represented in Fig. 4. The first one (a) gives no contribution, and the second one (b) (sunrise) gives three.

Two of them give logarithmic terms; in fact, these two contributions can be deduced one from the other using symmetry AA' (see notations in Ref. 22).

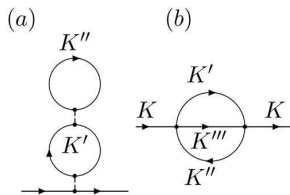


FIG. 4. Two-loop tadpole diagram.

The only contribution containing \mathcal{G}_4 is

$$\begin{aligned} \delta(\Delta k_f)_{\mathcal{G}_4}^{2\text{-loop}} &= -\frac{4ZU^2\delta\Lambda}{\pi^2 v_f^3} \left(\int_{-\Lambda+2v_f\Delta k_f}^0 \frac{d\epsilon}{-2\Lambda+2v_f\Delta k_f} \right. \\ &\quad - \int_{-\Lambda-2v_f\Delta k_f}^0 \frac{d\epsilon}{-2\Lambda-2v_f\Delta k_f} + \int_0^{\Lambda+2v_f\Delta k_f} \frac{d\epsilon}{2\Lambda+2v_f\Delta k_f} \\ &\quad \left. - \int_0^{\Lambda-2v_f\Delta k_f} \frac{d\epsilon}{2\Lambda-2v_f\Delta k_f} \right) \\ &= -\frac{4ZU^2\delta\Lambda}{\pi^2 v_f^3} \begin{cases} \frac{1+2v_f\Delta k_f/\Lambda}{1+v_f\Delta k_f/\Lambda} & \text{if } \Lambda \leq 2v_f\Delta k_f, \\ \frac{2v_f\Delta k_f/\Lambda}{1-v_f^2\Delta k_f^2/\Lambda^2} & \text{if } \Lambda \geq 2v_f\Delta k_f. \end{cases} \end{aligned}$$

We have calculated the complete expression of the two-loop expansion, including K_{\parallel} dependence, both in the OPI scheme and in the Wick-ordered one. Except for the last \mathcal{G}_4 contribution, these expressions depend on the RG scheme. It would be too fastidious to explicit all contributions: instead, let us skip all K_{\parallel} dependence. We get the following contribution:

$$\begin{aligned} \delta(\Delta k_f)_{\text{except } \mathcal{G}_4}^{2\text{-loop}} &= \mp \frac{4Z\delta\Lambda}{\pi^2 v_f^3} \left[\frac{v_fk - \Lambda}{|v_fk - \Lambda|} + \frac{v_fk + \Lambda}{|v_fk + \Lambda|} \right. \\ &\quad \left. + 2 \ln \left(\frac{-2\Lambda_o - v_fk}{-\Lambda - |\Lambda - v_fk|} \right) \right. \\ &\quad \left. + 2 \ln \left(\frac{2\Lambda_o - v_fk}{\Lambda + |\Lambda + v_fk|} \right) \right] \\ &\quad \times [(\mathcal{G}_1)^2 + (\mathcal{G}_2)^2 - \mathcal{G}_1\mathcal{G}_2] \end{aligned}$$

for each g_0, g_{f0}, g_{i0} (for which \pm reads +), $g_{\pi}, g_{f\pi}$ and $g_{i\pi}$ (for which \pm reads -). This is similar to previous calculations (Ref. 29 for the OPI scheme, Ref. 30 for the Wick-ordered one), but we would like to emphasize one major point: for g_{b0} and $g_{b\pi}$, the second factor is modified and writes

$$\begin{aligned} &\frac{v_f(k \pm 2\Delta k_f) - \Lambda}{|v_f(k \pm 2\Delta k_f) - \Lambda|} + \frac{v_f(k \pm 2\Delta k_f) + \Lambda}{|v_f(k \pm 2\Delta k_f) + \Lambda|} \\ &+ 2 \ln \left(\frac{-2\Lambda_o - v_f(k \mp 2\Delta k_f)}{-\Lambda - |\Lambda - v_f(k \mp 2\Delta k_f)|} \frac{2\Lambda_o - v_f(k \mp 2\Delta k_f)}{\Lambda + |\Lambda + v_f(k \mp 2\Delta k_f)|} \right) \end{aligned}$$

in which the \pm reads as in the first factor.

To end with technical details, let us explain the approximations used in the RG equations. First, all scattering \mathcal{G} depend on three arguments (k_1, k_2, k_3) , which are replaced by their $2p_i\Delta k_f$ ($p_i \in \mathbb{Z}$) approximation. This is generalized to all other couplings. Second, the list of all functional couplings $\mathcal{G}(k_1, k_2, k_3)$ is truncated by setting $|p_i| = 2, 3$ or 4. Extra couplings are replaced by the closer element in the list using symmetry preserving relations (cf. Ref. 22). Last, couplings $\mathcal{G}(k_1, k_2, k_3)$ in which some $|k_i| \geq 2\Delta k_f$ are replaced by U , the

Hubbard constant (this happens when the initial half band width $\Lambda_0 \gg \Delta k_f$, i.e., for small values of t_\perp ; it mostly arises from the logarithmic contributions).

CHOICE OF THE RG SCHEME

It is not the place here to derive the RG equations for the OPI scheme,³¹ nor for the Wick-ordered one.³² What matters here is that one can express the RG flow in terms of couplings \mathcal{G} , Fermi gap Δk_f , Fermi velocity v_f , and renormalization factor Z . As far as we will not distinguish v_{f0} and $v_{f\pi}$, we need not discuss the renormalization of v_f and Z , which only induces a global scaling of the other couplings, subsequently we will forget these parameters.

To get the RG equations, one expands diagrammatically all couplings, as in the Cauchy expansion in U/v_f . For a given energy scale Λ , one of the inner energies is integrated in the range $[\Lambda - \delta\Lambda, \Lambda + \delta\Lambda]$, where $\delta\Lambda$ is infinitesimal; in the OPI scheme, all other inner energies are integrated over $[\Lambda, \Lambda_0]$; in the Wick-ordered scheme, they are integrated over $[0, \Lambda]$.³³ OPI and Wick-ordered schemes not only differ according to these rules, they also give different \mathcal{C} and \mathcal{P} factors, as explained before.

From a theoretical point of view, both schemes should converge to the same fixed point, however, the RG flows are divergent and therefore never reach the fixed point: the integration of energy is incomplete; therefore, it is crucial to choose whether one will integrate over UV energies first (i.e., $|E| > \Lambda$, as in the OPI scheme) or over IR energies first (i.e., $|E| < \Lambda$, as in the Wick-ordered one).³⁴

This choice is expected to be more influential when high energy processes are taken into account. Within the Wick-ordered scheme, such processes participate in the RG flow at the very beginning, when $\Lambda \equiv \Lambda_0$, but they are skipped when ℓ is increased. In the OPI scheme, they are always taken into account.

In the ladder system, there is one such process, corresponding to the backward interband scattering g_b . It is indeed a high energy process, only permitted for $|E| > 2\Delta k_f$. Within the Wick-ordered scheme, this contribution is suppressed for $\ell > \ln(2v_f\Delta k_f/\Lambda_0)$. After these considerations, one could expect that the RG calculations performed with a fixed Fermi surface would bring different results, depending on which scheme is chosen. However, the weight of the g_b contribution is proportional to \mathcal{C} , \mathcal{C}^{sp} , \mathcal{P} or \mathcal{P}^{sp} . In the OPI scheme, all these terms vanish as $1/(1 + \frac{\Delta k_f}{\Lambda})$, when ℓ is increased, so g_b mostly contributes to the RG flow at the beginning, as in the Wick-ordered scheme. We have indeed performed both calculations and found a difference which is meaningless and negligible.³⁵

However, if the Fermi surface is correctly renormalized during the RG flow, in the case when $\Delta k_f \rightarrow 0$ as far as $\Lambda \rightarrow 0$, the weight of the g_b contribution keeps finite during the RG flow, in the OPI scheme, whereas it is still suppressed for large values of ℓ in the Wick-ordered one; so, the results of RG calculations should prove significantly different, using one or the other scheme.

In our opinion, the choice of the OPI scheme is more convenient, because, in the Wick-ordered scheme, the weight

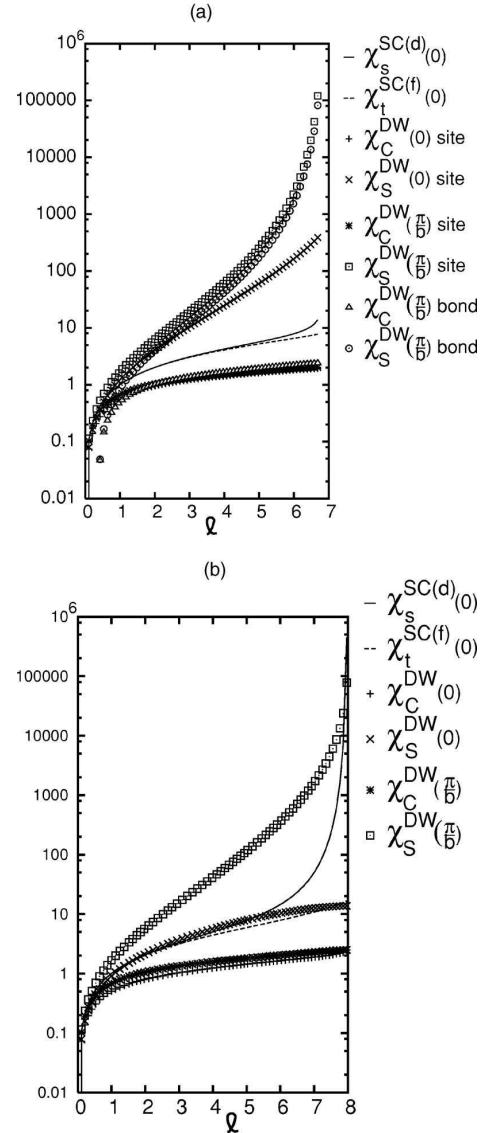


FIG. 5. Flow of the susceptibilities for $2t_\perp/\Lambda_0=1.4$ (a) or $2t_\perp/\Lambda_0=1.5$ (b), and $\bar{U}=0.5$. $\chi_S^{\text{SC}(d)}(0)$ is the intraband singular SC susceptibility of d symmetry, $\chi_S^{\text{SC}(f)}(0)$ is the intraband triplet SC susceptibility of f symmetry, $\chi_C^{\text{DW}}(0)$ is the intraband CDW susceptibility, $\chi_S^{\text{DW}}(0)$ is the intraband SDW susceptibility, $\chi_C^{\text{DW}}(\frac{\pi}{6})$ is the interband CDW susceptibility and $\chi_S^{\text{DW}}(\frac{\pi}{6})$ is the interband SDW susceptibility (the difference between site and bond susceptibilities as well as the symmetry classification are explained in Sec. III of Ref. 22).

of high energy processes is underestimated. This is, in particular, the conclusion of Nickel, who has performed a careful comparison of different RG schemes (see Sec. 3.4 of Ref. 32).

There is another indication that it is more correct to use the OPI scheme: in his pioneer work with Schulz and Zanchi³⁶ has proved that some terms in the 3-loop expansion

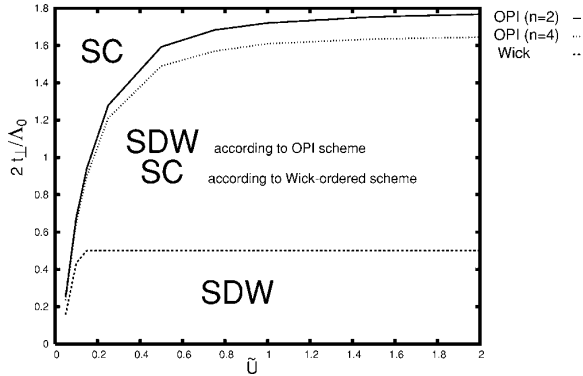


FIG. 6. Phase diagram, versus parameters t_{\perp} and $\tilde{U} = \frac{U}{\pi v_f}$; the central area belongs to the SDW phase, according to the OPI scheme, and to the SC one, according to the Wick-ordered scheme. The parameter n indicates range $[-2n\Delta k_f, 2n\Delta k_f]$ in which K_{\parallel} dependency is exactly taken into account. We did not distinguish the curves for $n=2$ and $n=4$ in the Wick-ordered scheme, because they hardly separate *de visu*.

induce an integration of energies $|E| > \Lambda$. Therefore, the OPI seems the only self-coherent scheme, when one tries to include further terms in the perturbative expansion.

RESULTS

The results of these calculations confirm those of Ref. 22, done with a fixed Fermi surface (i.e., Δk_f was kept constant). We find two distinct regions; in the SDW region, no superconducting susceptibility is diverging, while SDW ones are [see Fig. 5(a)]; in the SC region, both are diverging, but the superconducting susceptibility always dominates [see Fig. 5(b)]. However, the intermediate region, described in Ref. 22, in which superconducting susceptibilities, although diverging, are not dominating, vanishes completely.

In Fig. 6, the two phase diagrams are presented, according to the choice of the RG scheme. Let us repeat that, when Δk_f is not renormalized, both schemes give almost the same phase diagram.³⁵ Here, on the contrary, one observes that the SDW region quantitatively depends on the RG scheme. Indeed, for all values of U , except very small ones, in the Wick-ordered calculation, a constant critical value $t_{\perp c}$ can be defined, which separates the SDW and the SC regions. In the OPI calculations, the evolution of this critical value $t_{\perp c}$ is smoother, with a linear part of slope ~ 8.6 at small U . On the whole, the critical line $t_{\perp c}(U)$ which separates both regions differs quantitatively, except for small values of U .³⁷ With the Wick-ordered RG scheme, the SDW area is reduced by a factor 3, compared to the result of the RG with the OPI scheme.

The difference of results coming from the choice of the RG scheme has already been suggested by several authors. It was, in particular mentioned in Ref. 29.

The behavior of the Fermi surface, during the RG flow, brings no surprise. Let us first present the results in the SC phase, then in the SDW one.

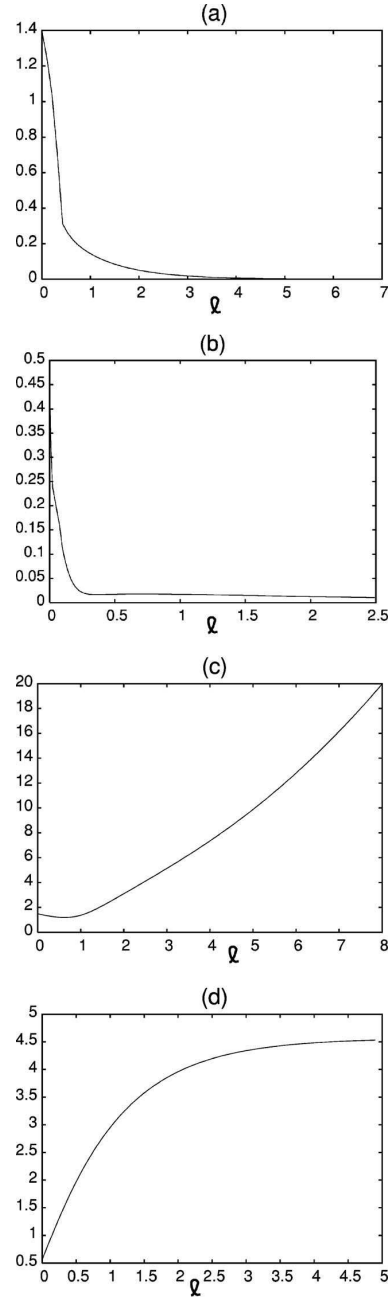


FIG. 7. Flow of the Δk_f : in the SDW phase, (a) using OPI RG calculations, or (b) using Wick-ordered RG calculations; in the SC phase, (c) using OPI RG calculations, or (d) using Wick-ordered RG calculations.

In the SC phase, Δk_f increases slowly, while not diverging. The flow diverges at some Λ_c , and Δk_{fc} is the final value of Δk_f . The numerical values of $\Delta k_{fc}/\Lambda_0$ are not realistic, however the general trend is very satisfactory and indicates that the binding-antibinding separation is necessary to the existence of superconductivity. We believe that, if one would

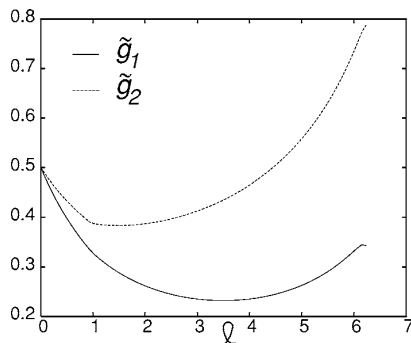


FIG. 8. Flow of couplings g_{01} and g_{02} during the RG flow, for $\tilde{U}=0.5$ and $2t_{\perp}/\Lambda_0=1.485$.

include a greater number of chains in the model, one would obtain more realistic values for Δk_f .

Let us emphasize the importance of a nonzero value of Δk_f . As discussed by Clarke, Strong, and Anderson,³⁸ the properties of Luttinger liquid, which have been established for a single one-dimensional chain, can extend in the case of a quasi-one-dimensional system (spin-charge separation, power-law behavior of correlation functions); that is, even though the band structure extends in the \perp dimension (as $\Delta k_f \neq 0$), the system will not converge to the two-dimensional Fermi liquid. These authors claim that \perp superconductivity originates from this mechanism, which also relates to confinement in the \parallel dimension. From this point of view, unconventional superconductivity and Luttinger liquid concept (in particular spin-charge separation) are interplaying; this gives an explanation for the possibility of coexistence of SDW instabilities and superconductivity.

In this SC phase, we also observe a quantitative difference between the results obtained using a OPI or a Wick-ordered scheme. In the first case, the value of Δk_f lies in the interval $[25, 30]$, while in the second, it lies in $[4, 5]$ [see Figs. 7(c) and 7(d)].

In the SDW phase, $\Delta k_f \rightarrow 0$ as $\Lambda \rightarrow \Lambda_c$ [see Figs. 7(a) and 7(b)]. This proves that this phase relates to the Luttinger solution. Contrary to the SC phase, the band structure remains purely one dimensional. This system, however, is different from Luttinger's original one, because, in real space, there are still two chains, with nonzero hopping in between. Let us examine in detail the behavior of the scattering susceptibilities. Couplings g_{01} and g_{02} are not diverging (see Fig. 8), contrary to what is observed in the SC phase. The curves of all couplings are very close to those obtained when Δk_f is kept constant. These results are very different from that of Fabrizio, who finds the behavior of a single chain (see Ref. 21 and compare with Fig. 8 here).

One must observe that, as $\Delta k_f \rightarrow 0$, the effective range of K_{\parallel} shrinks, so that, when one approaches the critical scale

Λ_c , the K_{\parallel} dependence is extremely badly taken into account. One could even expect to recover usual RG calculations, for which no SDW phase is found; however, the observation of this phase has proved surprisingly robust; the explanation is probably that, just before Λ_c , the divergence of χ_S^{DW} dominates already in such a way that it prevents any divergence of $\chi_S^{\text{SC}(d)}$. Nevertheless, this discussion sheds also light about serious numerical convergence problems that arise in this region, and have required technical answers.

Let us compare these calculations with experimental data. No direct determination of U or t_{\perp} are available, one can only get indirect determinations by matching experimental and theoretical curves, as it is done in Ref. 39, for $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ compounds (with $x=12$). These authors compare several experimental and theoretical spin susceptibility curves (including uniform spin susceptibilities) and obtain a best fit for $U/t_{\parallel} \sim 4$ and $|t_{\perp}| \sim t_{\parallel}$ (those values correspond here to $\tilde{U} \sim 1$ and $2t_{\perp}/\Lambda_0 \sim 1$), which corresponds here to predictions done with the Wick-ordered scheme; other determinations are available, which correspond to the OPI scheme. Actually, the determinations are accurate within an order of magnitude, thus it is not possible, from experimental data, to decide which scheme gives the right predictions. However, many theoretical predictions, and a few experimental fits, are located in this region of parameters, close to point $(\tilde{U} \sim 1, 2t_{\perp}/\Lambda_0 \sim 1)$ in the phase diagram (for instance by a factor 2). In particular the boundary, between SC and SDW phases, is located in the same region of parameters. Therefore, even if we cannot discriminate between Wick-ordered and OPI schemes, the phase diagrams we have calculated are qualitatively in good agreement with experimental observations.

In conclusion, we would like to emphasize that these calculations confirm the determination of a pure SDW phase using a very simple ladder model, which was far from being obvious until now. The SC phase also indicates a possible coexistence of magnetism and superconductivity, as it is indeed observed, both theoretically and experimentally.

We have also established the importance of the choice of the RG scheme. Even if this alternative only raises quantitative differences, they are not negligible, so this must be carefully taken into account. We hope that in further and more precise models, a clear discrimination between the two schemes will be possible, and that it will confirm our conjecture that the OPI scheme is more accurate.

ACKNOWLEDGMENT

The authors would like to thank Christoph Nickel for his collaboration in the theoretical preparation of this paper; without his help, this work would probably never have been completed successfully.

- ¹M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, and Y. Kitaoka, Phys. Rev. Lett. **73**, 3463 (1994).
- ²E. M. McCarron, Mater. Res. Bull. **23**, 1355 (1988); M. Sigrist, *ibid.* **23**, 1429 (1988).
- ³Z. Hiroi and M. Takano, Nature (London) **377**, 41 (1995).
- ⁴H. Sato and M. Naito, Physica C **274**, 221 (1997).
- ⁵E. Dagotto, Rep. Prog. Phys. **62**, 1525 (1999).
- ⁶Y. Piskunov *et al.*, Eur. Phys. J. B **13**, 417 (2000).
- ⁷See Fig. 3 in: J. Hopkinson and K. Le Hur, Phys. Rev. B **69**, 245105 (2004).
- ⁸K. Kuroki, T. Kimura, and H. Aoki, Phys. Rev. B **54**, R15641 (1996).
- ⁹J. A. Riera, Phys. Rev. B **64**, 104520 (2001).
- ¹⁰M. Randeria, N. Trivedi, A. Moreo, and R. T. Scalettar, Phys. Rev. Lett. **69**, 2001 (1992).
- ¹¹N. Bulut, D. J. Scalapino, and S. R. White, Phys. Rev. B **50**, 7215 (1994).
- ¹²P. Germain and M. Lagus, Eur. Phys. J. B **8**, 497 (1999).
- ¹³R. M. Noack, S. R. White, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **73**, 882 (1994).
- ¹⁴G. Sierra and M. A. Martin-Delgado, Phys. Rev. B **56**, 8774 (1997).
- ¹⁵A. Moreo, S. Haas, A. W. Sandvik, and E. Dagotto, Phys. Rev. B **51**, 12045 (1995).
- ¹⁶K. G. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3174 (1971).
- ¹⁷K. Kuroki and H. Aoki, Phys. Rev. Lett. **72**, 2947 (1994).
- ¹⁸H. J. Schulz, Phys. Rev. B **53**, R2959 (1996).
- ¹⁹T. Giamarchi and H. J. Schulz, J. Phys. (France) **49**, 819 (1988).
- ²⁰It is impossible to review the hundreds of papers using this model; three pioneer works are P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987); J. R. Schrieffer, X.-G. Wen, and S.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **60**, 944 (1988); C. L. Kane, P. A. Lee, and N. Read, Phys. Rev. B **39**, 6880 (1989).
- ²¹M. Fabrizio, Phys. Rev. B **48**, 15838 (1993).
- ²²G. Abramovici, J. C. Nickel, and M. Héritier, Phys. Rev. B **72**, 045120 (2005).
- ²³W. Metzner, C. Castellani, and C. Di Castro, Adv. Phys. **47**, 317 (1998).
- ²⁴C. Honerkamp, M. Salmhofer, N. Furukawa, and T. M. Rice, Phys. Rev. B **63**, 035109 (2001).
- ²⁵M. Salmhofer, Phys. Lett. B **408**, 245 (1997); Commun. Math. Phys. **194**, 249 (1998).
- ²⁶J. Sólyom, Adv. Phys. **28**, 201 (1979).
- ²⁷N. Dupuis, Eur. Phys. J. B **3**, 315 (1998).
- ²⁸S. Dusuel and B. Douçot, Phys. Rev. B **67**, 205111 (2003).
- ²⁹D. Rohe and W. Metzner, Phys. Rev. B **71**, 115116 (2005).
- ³⁰A. A. Katanin and A. P. Kampf, Phys. Rev. Lett. **93**, 106406 (2004).
- ³¹For a pedagogical explanation of the Wick-ordered scheme, see C. J. Halboth, dissertation, Shaker Verlag, Aachen, 1999.
- ³²For a pedagogical explanation of the OPI scheme, see J. C. Nickel, Thèse de troisième cycle, de l'Université Paris 11, 2004.
- ³³Other choices are possible, see for instance the scheme used in C. Bourbonnais and R. Duprat, Bull. Am. Phys. Soc. **49**, 179 (2004).
- ³⁴In one-loop diagrams, there is only one integration, however, the domain of external momenta are different in the OPI scheme and in the Wick-ordered one.
- ³⁵All calculations in Ref. 22 are done using the OPI scheme. They have been also performed using the Wick-ordered scheme, but there are no noticeable differences.
- ³⁶D. Zanchi, Europhys. Lett. **55**, 376 (2001); D. Zanchi and H. J. Schulz, Phys. Rev. B **61**, 13609 (2000).
- ³⁷It is a fact that all curves are exactly converging to the point ($2t_{\perp}/\Lambda_o=0.02, U=0$), however, one must take these extrapolations very carefully, because the theoretical precision of the calculations behaves like Λ_c/Λ_o and one observes that $\ln(\Lambda_c/\lambda_o) > 100$ for $2t_{\perp}/\Lambda_o \leq 0.01$.
- ³⁸D. G. Clarke, S. P. Strong, and P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **74**, 4499 (1995).
- ³⁹M. Tsuchiizu and Y. Suzumura, Phys. Rev. B **72**, 075121 (2005).

Magnetic-field-induced singlet-triplet phase transition in quasi-one-dimensional organic superconductors

N. BELMECHRI¹, G. ABRAMOVICI¹, M. HÉRITIER¹, S. HADDAD² and S. CHARFI-KADDOUR²¹ *Laboratoire de Physique des Solides, UMR 8502, CNRS Université Paris-Sud 11 - 91405 Orsay, France*² *Laboratoire de Physique de la Matière Condensée, Faculté des Sciences de Tunis - Tunisia*received 1 August 2007; accepted in final form 4 September 2007
published online 28 September 2007PACS 74.70.Kn – Organic superconductors
PACS 74.25.Op – Mixed states, critical fields, and surface sheaths
PACS 74.20.Rp – Pairing symmetries (other than *s*-wave)

Abstract – We propose a theoretical model of quasi-one-dimensional superconductors, with attractive electron-electron interactions dominant in the singlet *d*-wave channel and sub-dominant in the *p*-wave channel. We discuss, in the mean-field approximation, the effect of a magnetic field applied perpendicularly to the direction of the lowest conductivity. The lowest free energy phase corresponds to a singlet *d*-wave symmetry in low fields, but to a triplet symmetry in high fields. A first-order singlet-triplet phase transition is expected at moderate applied fields of a few teslas. We propose to ascribe the recent critical field and NMR experimental data, observed in superconducting (TMTSF)₂ClO₄ to such an effect.

Copyright © EPLA, 2007

The nature of superconductivity in the family of the quasi-1D organic superconductors [1–3] (TMTSF)₂X (X = PF₆, ClO₄, ...) has been a long-standing issue for the last three decades. There is still a debate whether it is a conventional superconductivity, with a completely gapped Fermi surface, or an unconventional one with points or lines of nodes on the gap. Many experiments have tried to address this question using different techniques such as NMR relaxation rate, thermal conductivity, non-magnetic impurity effect on T_c , Knight Shift and upper critical field measurements.

The temperature dependence of the proton spin lattice relaxation rate, measured by Takigawa *et al.* [4] in the ClO₄ compounds, suggested the presence of lines of nodes in the gap on the Fermi surface. On the other hand, Belin *et al.* [5] measurements of the temperature dependence of the thermal conductivity argued for a fully gapped Fermi surface. More recently, Joo *et al.* [6] studied the effect of non-magnetic impurities on the superconducting critical temperature T_c [7], and showed unequivocally that the order parameter changes sign on the Fermi surface and that consequently the gap has nodes where it is zero on the Fermi surface. This is in complete agreement with a model of unconventional superconductivity in these organic materials.

However, whether the pairing of the electrons in the superconducting state is in the singlet or the triplet

symmetry remains an unsolved question. Measurements of the upper critical field of superconductivity in these materials [8–10] showed a superconducting state surviving up to a field as high as 9 T in the case of the PF₆ compounds [8], and at least 5 T in the case of the ClO₄ compounds [9]. These fields exceed by far the Clogston-Pauli paramagnetic limit [11] for homogeneous singlet superconductivity, which is estimated to be of the order of $1.84 T_c$, with a T_c around 1.1 K in these materials. This result is a strong indication that at high-magnetic-fields superconductivity could not be of a homogeneous singlet type. Many theories [12–14] have been proposed to explain this behaviour by a triplet superconducting state, which is a non-Pauli-limited state. At low magnetic fields, however, besides the observation by Andres *et al.* [15] of a diamagnetic signal when the field is perpendicular to the chains indicating a singlet state, measurements of the Knight-Shift [16] showed a significant variation from the normal-state behaviour of the spin susceptibility of Cooper pairs which decreased with decreasing temperature in the two directions of the (*a*, *b'*)-planes. This behaviour was interpreted as being the signature of a singlet state at low fields. Therefore, it seems that there is a contradiction between a low-magnetic-field singlet behaviour and a high-magnetic-field non singlet one.

Other authors, however [17,18], pointed out that a singlet superconducting state may survive the Pauli

N. Belmechri *et al.*

paramagnetic limit by allowing for a spatially modulated order parameter, forming an inhomogeneous singlet state, or FFLO state [19-21], where the two electrons of the Cooper pair will have different wave vectors to compensate for the Zeeman splitting. Maki *et al.* was the first to consider FFLO in *d*-wave superconductors in CeCoIn₅ and to consider the orbital effect [22,23]. Nevertheless, a phase transition to an inhomogeneous FFLO state has not yet been identified experimentally with certainty in Bechgaard salts.

Another important property of these quasi-1D materials, which must not be ignored to explain their behaviour in magnetic field, is that under an increasing magnetic field parallel to the *b'*-direction the electron motion gets confined to the (*a*, *b*)-planes of the crystalline lattice, when the magnetic field is large enough ($H \gtrsim 2$ T), the electronic orbitals in each (*a*, *b*)-plane are decoupled. Therefore the orbital pair breaking effect is almost suppressed and can be neglected in that case [24,25]. Using this particular characteristic, we study a simple model which considers the possibility of the phase transition between a singlet superconducting state at low magnetic fields, and a triplet one at higher fields, in order to explain the discrepancy between the low-field singlet behaviour and the high-field triplet one.

The purpose of this article is to describe this transition and not to give the most accurate and most realistic values of the critical fields $H_{c2}(T)$, as we have neglected the orbital pair breaking effect. Nevertheless, it is true that this orbital effect is much weaker in Bechgaard salts than in isotropic metals, because of their lamellar character, as discussed below.

Eventually, the transition between singlet and triplet superconductivity results from the small difference between the corresponding values of the renormalized scattering coefficients V_s and V_t , as they have been calculated by a renormalisation group method [26-28]. This implies indeed a small free-energy gap between both configurations.

Theoretical model. – One of the most important features of the (TMTSF)₂X compounds is the very weak electron transfer in the *c*-direction transverse to the (*a*, *b*)-planes [2,29]. The transfer integral in this direction is $t_c = 10$ K, which is an order of magnitude less than that in the *b*-direction, with $t_b = 300$ K, and two orders of magnitude less than that in the chains direction *a*, with $t_a = 3000$ K. The particular structural feature of these compounds gives them a lamellar character, and hence reduces considerably the orbital destructive effect against superconductivity. Furthermore, when the magnetic field is oriented parallel to the *b'*-direction at low temperatures, the semi-classical electron motion can be shown to be oscillatory in the *c*-direction [30] with the amplitude

$$\delta z = \frac{4t_c}{ev_f H},$$

where v_f is the Fermi velocity, e the electron charge and H the magnetic field.

Such a mechanism is somewhat analogous to the field-induced one-dimensionalisation leading to the FISDW [31,32]. The electron system, in fact, undergoes a dimensional crossover from a low-field 3D regime to a higher-field effective 2D regime, where the electron motion is confined to the (*a*, *b*)-planes and the interlayer hopping is considerably reduced. This phenomenon has first been predicted by Lebed [24] based on a quantum-mechanical calculation taking into account the highly anisotropic shape of the Fermi surface. Magnetoresistance measurements along the *c*-direction [33,34] have confirmed these predictions. This confinement phenomenon reduces the screening currents in the *c*-direction and therefore cancels out their destructive effect on superconductivity. In our model, we take these considerations into account by assuming that the orbital pair breaking effect of the magnetic field can be ignored as a first approximation. Therefore, the only pair breaking effect of the magnetic field that will be taken in our case is the Zeeman splitting of the electron energy. The inter-plane transfer, t_c , is implicit, so that the mean-field approximation is justified. However, it is weak enough to be ignored in the subsequent calculations.

We consider a mean-field Hamiltonian which allows for both singlet and triplet order parameters. At high magnetic fields the electron spin susceptibility is that of the normal state. This is why we assume that the field-induced triplet state is the equal spin pairing state (ESP) [35], for it has no $S_z = 0$ component and therefore has the same spin susceptibility as the normal state. We will consider it throughout this paper. Furthermore we assume a unitary state with real order parameters. The singlet and triplet order parameters are assumed to have *d*-wave and *p*-wave orbital symmetry, respectively, see eqs. (5) and (6). The FFLO case, where the mixed singlet and triplet order parameters are spatially modulated, was previously studied by Shimahara [36,37]. In our model we will only consider the homogeneous state. A state in which singlet and triplet symmetry coexist does not seem favourable in our model.

The mean-field Hamiltonian is described as follows:

$$H = H_0 + H_s + H_t, \quad (1)$$

$$H_0 = \sum_{\vec{k}\sigma} \xi_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma}, \quad (2)$$

$$H_s = \sum_{\vec{k}\sigma} \Delta_s(\vec{k}) \left\{ c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} + c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right\}, \quad (3)$$

$$H_t = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \Delta_t(\vec{k}) \left\{ c_{\vec{k}\downarrow} c_{-\vec{k}\downarrow} + c_{-\vec{k}\uparrow} c_{\vec{k}\uparrow} + h.c. \right\}, \quad (4)$$

with the following definitions for the order parameters, where *s* and *t* subscripts stand for singlet and triplet respectively,

$$\begin{aligned}\Delta_s(\vec{k}) &= \Delta_{s,\uparrow\downarrow}(\vec{k}) \\ &= \sum_{\vec{k}'} V_s(\hat{k}, \hat{k}') \{ \langle \langle c_{-\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \rangle \rangle - \langle \langle c_{-\vec{k}'\uparrow} c_{\vec{k}'\downarrow} \rangle \rangle \},\end{aligned}\quad (5)$$

$$\begin{aligned}\Delta_t(\vec{k}) &= \Delta_{t,\uparrow\uparrow}(\vec{k}) = -\Delta_{t,\downarrow\downarrow}(\vec{k}) \\ &= 2 \sum_{\vec{k}'} V_t(\hat{k}, \hat{k}') \langle \langle c_{-\vec{k}'\uparrow} c_{\vec{k}'\uparrow} \rangle \rangle,\end{aligned}\quad (6)$$

with

$$V_s(\hat{k}, \hat{k}') = V_s^0 \left(2(\hat{k} \cdot \hat{k}')^2 - 1 \right), \quad (7)$$

$$V_t(\hat{k}, \hat{k}') = V_t^0 \hat{k} \cdot \hat{k}'. \quad (8)$$

In our model, we use the following assumptions:

$$\Delta_s(\vec{k}) = \Delta_s^0 (2\hat{k}_x^2 - 1), \quad (9)$$

$$\Delta_t(\vec{k}) = \Delta_t^0 \hat{k}_x \quad \text{and} \quad \Delta_{t,\uparrow\downarrow}(\vec{k}) = 0. \quad (10)$$

$V_s(\hat{k}, \hat{k}')$ and $V_t(\hat{k}, \hat{k}')$ are, respectively, the d -wave and p -wave parts of the interaction potential, which is assumed to be attractive in both parts. The possibility of coexistence of these two attractive parts of the interaction has been previously discussed by many authors [37,38]. In the g -ology model [2,39] both interactions are included in the Hamiltonian and their relative relevance determines the symmetry of the superconducting state. In our model, we do not discuss the physical origin of these interactions, whether they are mediated by phonons or by magnetic fluctuations, or any other mechanisms. We assume the coupling constants, V_s and V_t , to be temperature and magnetic field independent. On the other hand, in the case of a very strong magnetic field, the coupling constant may indeed depend on the field strength. This case, which has been discussed by Kuroki *et al.* [40], will not be discussed here.

As a first approximation we will consider an isotropic dispersion relation. We think that the anisotropic aspect of the dispersion relation will not change qualitatively our results, as will be reported elsewhere. In the following, we will study the relative stability of a d -singlet and a p -triplet superconducting state. We are interested, in particular, in the possibility of a phase transition between these two states in an increasing magnetic field.

Self consistent equations. – It is not difficult to diagonalize the model Hamiltonian equation (1). Here, we use the thermal Green's functions to solve it. The equations of motion for the relevant Green's functions yield the following equations in matrix form:

$$\begin{pmatrix} i\omega_n - \xi_{\vec{k}\uparrow} & -\Delta_{s,\vec{k}} & -\Delta_{t,\vec{k}} \\ -\Delta_{s,\vec{k}} & i\omega_n + \xi_{\vec{k}\downarrow} & 0 \\ -\Delta_{t,\vec{k}} & 0 & i\omega_n + \xi_{\vec{k}\uparrow} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -\langle \langle c_{\vec{k}\uparrow} c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \rangle \rangle \\ \langle \langle c_{\vec{k}\uparrow} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle \rangle \\ \langle \langle c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\uparrow} \rangle \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

where $\omega_n = (2n+1)\pi T$. Solving eq. (9) for the relevant Green's functions, $\langle \langle c_{\vec{k}\uparrow} c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle \rangle$ and $\langle \langle c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\uparrow} \rangle \rangle$, and performing the frequency sum we can write the self-consistent equations for the order parameters of eqs. (5) and (6) as

$$\begin{aligned}\Delta_{s,\vec{k}} &= \sum_{\vec{k}'} \frac{V_s(\hat{k}, \hat{k}') \Delta_{s,\vec{k}'}}{2E_{c,\vec{k}'}} \left\{ (\Delta_{t,\vec{k}'}^2 + (\mu_e H)^2 - E_{c,\vec{k}'}) \text{thc}_- \right. \\ &\quad \left. - (\Delta_{t,\vec{k}'}^2 + (\mu_e H)^2 + E_{c,\vec{k}'}) \text{thc}_+ \right\}\end{aligned}\quad (12)$$

$$\begin{aligned}\Delta_{t,\vec{k}} &= - \sum_{\vec{k}'} \frac{V_t(\hat{k}, \hat{k}') \Delta_{t,\vec{k}'}}{2E_{c,\vec{k}'}} \left\{ (E_{c,\vec{k}'} - \Delta_{s,\vec{k}'}^2 + \mu_e H \xi) \text{thc}_- \right. \\ &\quad \left. + (E_{c,\vec{k}'} + \Delta_{s,\vec{k}'}^2 - \mu_e H \xi) \text{thc}_+ \right\}\end{aligned}\quad (13)$$

where μ_e is the electron magnetic moment and we have defined

$$\begin{aligned}E_{o,\vec{k}}^2 &= \xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{s,\vec{k}}^2, \\ E_{\vec{k}}^2 &= \xi_{\vec{k}}^2 + \Delta_{s,\vec{k}}^2 + \Delta_{t,\vec{k}}^2, \\ E_{c,\vec{k}}^2 &= (\mu_e H)^2 E_{o,\vec{k}}^2 + \Delta_{s,\vec{k}}^2 \Delta_{t,\vec{k}}^2, \\ \text{thc}_\pm &= \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2} \sqrt{E_{\vec{k}}^2 + (\mu_e H)^2 \pm 2E_{c,\vec{k}}^2}\right)}{\sqrt{E_{\vec{k}}^2 + (\mu_e H)^2 \pm c, \vec{k}'}}.\end{aligned}\quad (15)$$

It is straightforward to see that if we put $\Delta_t = 0$ in eq. (12) the field and temperature dependence of $\Delta_s(T, H)$ is given by

$$\begin{aligned}\Delta_{s,\vec{k}} &= - \sum_{\vec{k}'} \frac{V_s(\hat{k}, \hat{k}') \Delta_{s,\vec{k}'}}{2E_{o,\vec{k}'}} \left\{ \tanh\left(\frac{\beta}{2} (E_{o,\vec{k}'} - \mu_e H)\right) \right. \\ &\quad \left. + \tanh\left(\frac{\beta}{2} (E_{o,\vec{k}'} + \mu_e H)\right) \right\},\end{aligned}\quad (16)$$

which is nothing but the BCS gap equation with the magnetic field acting only on the spins of the electrons. When $\Delta_s = 0$ in eq. (13) we get another correct limiting case, that is

$$\begin{aligned}\Delta_{t,\vec{k}} &= - \sum_{\vec{k}'} V_t(\hat{k}, \hat{k}') \Delta_{t,\vec{k}'} \\ &\quad \times \frac{\tanh\left(\frac{\beta}{2} \sqrt{(\xi_{\vec{k}'} - \mu_e H)^2 + \Delta_{t,\vec{k}'}^2}\right)}{\sqrt{(\xi_{\vec{k}'} - \mu_e H)^2 + \Delta_{t,\vec{k}'}^2}}.\end{aligned}\quad (17)$$

This determines the field and temperature dependence of the p -triplet order parameter.

By numerically solving eqs. (16) and (17) for Δ_s^0 and Δ_t^0 with the d and p symmetries given respectively by eqs. (9) and (10), we could calculate the critical field of superconductivity in these two limiting cases, using the free-energy difference with the normal state given by

$$\delta F = \int_0^{V^0} \frac{dv^0}{(v^0)^2} (\Delta^0(v^0))^2. \quad (18)$$

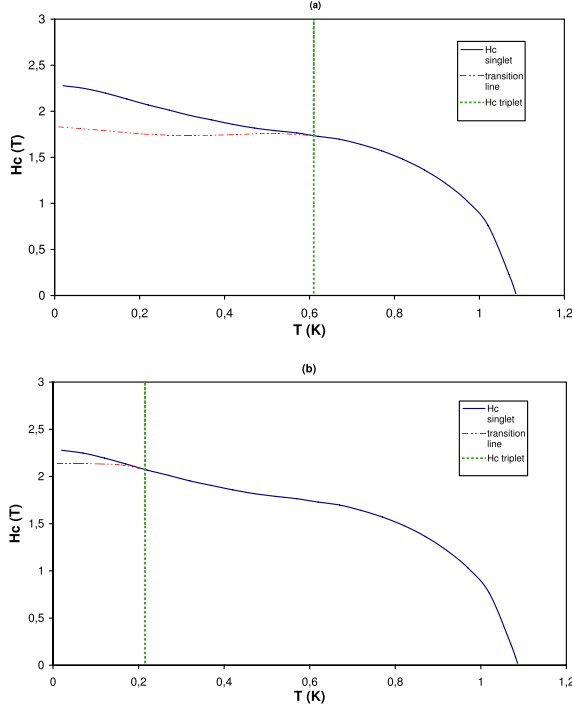
N. Belmechri *et al.*


Fig. 1: Critical fields of superconductivity in the d -singlet (solid line) and p -triplet (dotted line) case, with a triplet critical temperature of (a) 0.62 K and (b) 0.22 K. The dash-dotted line is the transition line between the two phases. The infinite slope of the triplet line is unrealistic, and is a consequence of the neglect of the orbital pair-breaking effect.

Using eq. (18) we could also calculate the critical field beyond which the d -singlet state becomes energetically less favourable than the p -triplet one. In fig. 1 are shown the phase diagrams of the pure d -singlet and p -triplet cases, with the transition line between these two phases. The strength of the triplet interaction, and accordingly the triplet zero-field critical temperature, are unknown. Therefore we take the triplet critical temperature as our free adjustable parameter. What should also be noted is that this transition to the triplet phase is a first-order transition. However, accurate enough experimental measurements of thermodynamic quantities, such as specific heat or magnetic susceptibilities, have yet to be done to address the existence or the order of such a phase transition.

Let us now study the possibility of a coexistence phase, where both the singlet and triplet order parameters are simultaneously non-zero. When solving numerically the two coupled equations (12) and (13), we could not find any physically plausible solutions, which makes the coexistence state very unlikely to happen. To confirm this result we calculated a Ginzburg-Landau free energy development to the fourth order in Δ_s and Δ_t , see eq. (19). In the

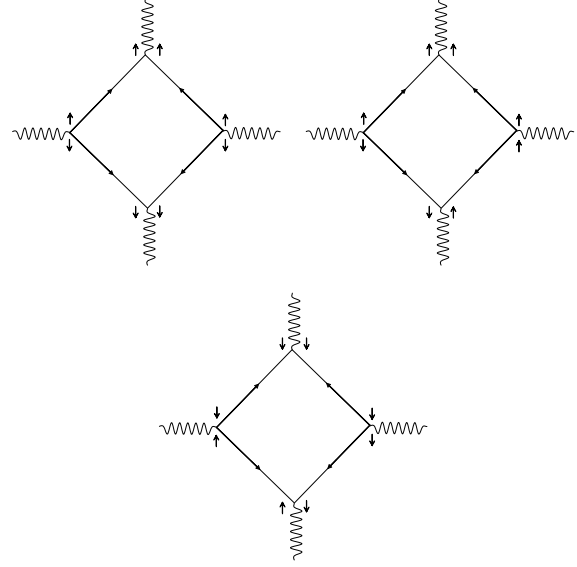


Fig. 2: Diagrammatic expansion of the $\Delta_s^2 \Delta_t^2$ term in the free energy.

diagrammatic expansion of the free energy there are only three non-zero diagrams contributing to the $\Delta_s^2 \Delta_t^2$ term. They are shown in fig. 2. All three diagrams have a positive sign in the (T, H) -plane, which makes coefficient c in eq. (19) positive for all values of T and H , making the mixing term energetically unfavourable.

$$\delta F_c = \delta F_0 + a\Delta_s^2 + a'\Delta_t^2 + b\Delta_s^4 + b'\Delta_t^4 + c\Delta_s^2\Delta_t^2 \quad (19)$$

with δF_c being the free-energy difference of the coexistence phase to the normal state.

Discussion. – In conclusion, we have presented a theoretical model in which we assume the simultaneous existence of singlet and triplet pairing interactions. This model, treated in a mean-field approximation, shows a competition between two homogeneous superconducting phases, a d -wave singlet phase, stable in low applied field and a p -wave triplet superconducting phase, stable under large applied field. We have shown the existence of a phase transition from the d -singlet phase to the p -triplet phase in a moderate field, of the order of two teslas. A phase in which these two symmetries coexist is not stable in our simple model.

In this model, we therefore predict a very large critical field, much larger than the Clogston-Pauli limit. We are also able to understand the very peculiar behaviour of the NMR data recently observed in $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ [16]: a usual Meissner effect is expected in the singlet phase, while one should recover the normal-phase susceptibility in the Equal Spin Pairing triplet phase, as experimentally observed.

A qualitative property concerning the anisotropy of the critical field can be easily predicted. As the applied magnetic field is rotated in the (a, b) -plane, the field orientation corresponding to the highest critical field should depend on the field strength. In low fields, typically H smaller than about 2 teslas, the orbital effect of the field is too weak to induce the two-dimensional confinement observed at larger field [30]. Therefore, in this low-field limit, we expect that the orientation of the highest critical field, which, of course is determined by the orbital effect is along the a -direction, in which the electron transfer integral is the largest. On the contrary, in the large-field limit, the field-induced two-dimensional confinement strongly reduces the electron transfer in directions perpendicular to b' . We therefore expect, as the field is increased above about 2 teslas, that the orientation of the maximum critical field is progressively rotated from the a -direction to the b' -direction.

In the large magnetic field case, the (a, b) -planes are decoupled and the orbital pair-breaking effect is drastically reduced and can be neglected, as we have already discussed. In the small-magnetic-field case, however, we expect that the remaining orbital effect will be similar for the singlet and for the triplet cases, so that the difference between the triplet and the singlet free energy is not noticeably modified; therefore we hope that the orbital corrections will not destroy this transition. Moreover, we observe that experimental values of the critical field H_{c2} are noticeably increased when the field is aligned along the b' -direction; this effect is coherent with our assumption of a two-dimensional nature of the singlet/triplet transition.

We have examined the case of a p -wave triplet state. We could have extended our study to an f -wave triplet state, which might be favoured by two-dimensional fluctuations [14,26–28]. We believe, however, that similar results would have been obtained.

Our two-dimensional model, described in eqs. (1)–(4), can be obtained by a three-cut-off renormalisation group approach [41], in which the three cut-offs are the bandwidth $E_0 \approx 6000$ K, the cross-over temperature $T_{co} \approx 100$ K and the Zeeman energy $\mu_e H \approx 2$ K, and have different orders of magnitude. In the range where $\omega < T_{co}$, our Fermi liquid analysis is valid. Since $\mu_e H < T_{co}$, the Zeeman energy can also be discussed in a mean-field approach, as we did here.

Many authors [18,36,37,42] have proposed to interpret the experimental data by the field-induced stabilisation, not of a triplet phase, but of a singlet-FFLO phase. Both phases have somewhat similar properties: they appear in a first-order transition; they are very sensitive to non-magnetic disorder, which might be the case of the high field phase; they have a critical field which exceeds the Clogston-Pauli limit. However, there is a second paramagnetic limiting field beyond which the FFLO inhomogeneous singlet superconducting state will also be destroyed. This new paramagnetic limit was calculated by Lebed [12] in the quasi-1D (TMTSF)₂X superconductors along the

b' -direction, the direction of the highest critical field, and was estimated to be given by $H_{p\text{FFLO}} = 0.6(t_a/t_b)^{1/2} H_p$, where H_p is the usual Pauli-limited critical field, t_a and t_b are the electronic transfer integral along a and b . In the Bechgaard salts $H_{p\text{FFLO}}$ should be of the order of 4 T. This limit was calculated without considering the orbital pair-breaking mechanism, which should reduce it further. It is not obvious to us that such a theoretical estimation of the FFLO critical field is large enough to account for the experimental values.

It seems to us that more experimental work is still necessary to discriminate between the various theoretical models proposed to interpret the experimental data.

We gratefully acknowledge helpful and stimulating discussions with J. FRIEDEL, D. JÉRÔME, and C. PASQUIER. We are thankful for the French-Tunisian cooperation CMCU (project 04 G1307).

REFERENCES

- [1] JÉRÔME D., MAZAUD A., RIBAUT M. and BECHGAARD K., *J. Phys. (Paris) Lett.*, **41** (1980) L95.
- [2] JÉRÔME D. and SCHULZ H. J., *Adv. Phys.*, **31** (1982) 299.
- [3] JÉRÔME D., *Chem. Rev.*, **104** (2004) 5565.
- [4] TAKIGAWA M., YASUOKA H. and SAITO G., *J. Phys. Soc. Jpn.*, **56** (1987) 873.
- [5] BELIN S. and BEHNIA K., *Phys. Rev. Lett.*, **79** (1997) 2125.
- [6] JOO N., Thèse de doctorat, Université de Paris-Sud (2006) Orsay.
- [7] JOO N., AUBAN-SENZIER P., PASQUIER C. R., JEROME D. and BECHGAARD K., *Europhys. Lett.*, **72** (2005) 645.
- [8] LEE I. J., NAUGHTON M. J., DANNER G. M. and CHAIKIN P. M., *Phys. Rev. Lett.*, **78** (1997) 3555.
- [9] OH J. I. and NAUGHTON M. J., *Phys. Rev. Lett.*, **92** (2004) 67001.
- [10] LEE I. J., CHAIKIN P. M. and NAUGHTON M. J., *Phys. Rev. B*, **62** (2000) R14669.
- [11] CLOGSTON A. M., *Phys. Rev. Lett.*, **9** (1962) 266.
- [12] LEBED A. G., *Phys. Rev. B*, **59** (1999) R721; LEBED A. G. and YAMAJI K., *Phys. Rev. Lett.*, **80** (1998) 2697.
- [13] LEBED A. G., MACHIDA K. and OZAKI M., *Phys. Rev. B*, **62** (2000) R795; LEBED A. G., *J. Low Temp. Phys.*, **142** (2006) 495.
- [14] FOLGUERAS A. D. and MAKI K., cond-mat/060165 (2006); *Proceedings of the M2S Conference (Dresden) (2006)*, *Physica C*, **460-462** (2007) 643.
- [15] ANDERS K., WUDL F., MCWHAN D. B., THOMAS G. A., NALEWAJEK D. and STEVENS A. L., *Phys. Rev. Lett.*, **45** (1980) 1449.
- [16] SHINAGAWA J., KUROSAKI Y., ZHANG F., PARKER C., BROWN S. E., JÉRÔME D., CHRISTENSEN J. B. and BECHGAARD K., *Phys. Rev. Lett.*, **98** (2007) 147002.
- [17] DUPUIS N., MONTAMBAUX G. and SÀ DE MELO C. A. R., *Phys. Rev. Lett.*, **70** (1993) 2613.
- [18] SHIMAHARA H., *Phys. Rev. B*, **50** (1994) 12760; *J. Phys. Soc. Jpn.*, **68** (1999) 3069.

- [19] FULDE P. and FERRELL R. A., *Phys. Rev.*, **135** (1964) A550.
- [20] LARKIN A. I. and OVCHINNIKOV Y. N., *JETP*, **20** (1965) 762.
- [21] MAKI K. and WON H., *Czech. J. Phys.*, **46**, suppl. S2 (1996) 1035.
- [22] WON H., MAKI K., HAAS S., OESCHLER N., WEICKERT F. and GEGENWART P., *Phys. Rev. B*, **69** (2004) 180504.
- [23] MICLEA C. F., NICKLAS M., PARKER D., MAKI K., SARRAO J. L., THOMPSON J. D., SPAM G. and STEGLICH F., *Phys. Rev. Lett.*, **96** (2006) 117001.
- [24] LEBED A. G., *Sov. Phys. JETP*, **44** (1986) 114.
- [25] LEE I. J., BROWN S. E. and NAUGHTON M. J., *J. Phys. Soc. Jpn.*, **75** (2006) 051011.
- [26] ABRAMOVICI G. and HÉRITIER M., *Phys. Rev. B*, **75** (2007) 094516.
- [27] ABRAMOVICI G., NICKEL J. C. and HÉRITIER M., *Phys. Rev. B*, **72** (2005) 045120.
- [28] NICKEL J. C., DUPRAT R., BOUBONNAIS C. and DUPUIS N., *Phys. Rev. Lett.*, **95** (2005) 247001.
- [29] ISHIGURO T., YAMAJI K. and SAITO G., *Organic Superconductors, Springer Ser. Solid State Sci.*, Vol. **88** (Springer Verlag, Berlin, Heidelberg) 1998.
- [30] JOO N., AUBAN-SENZIER P., PASQUIER C. R., YONEZAWA S., HIGASHINAKA R., MAENO Y., HADDAD S., CHARFI-KADDOUR S., HÉRITIER M., BECHGAARD K. and JÉRÔME D., *Eur. Phys. J. B*, **52** (2006) 337.
- [31] GOR'KOV L. P. and LEBED A. G., *J. Phys. (Paris) Lett.*, **45** (1984) L433.
- [32] HÉRITIER M., MONTAMBAUX G. and LEDERER P., *J. Phys. (Paris) Lett.*, **45** (1984) L943.
- [33] DANNER G. M., ONG N. P. and CHAIKIN P. M., *Phys. Rev. Lett.*, **78** (1997) 983.
- [34] BEHNIA K., BALICAS L., KANG W., JÉRÔME D., CARRETTA P., FAGOT-REVURAT Y., BERTHIER C., HORVATIC M., SÉGRANSAN P., HUBERT L. and BOUBONNAIS C., *Phys. Rev. Lett.*, **74** (1995) 5272.
- [35] BALIAN R. and WERTHAMER N. R., *Phys. Rev.*, **131** (1963) 1553.
- [36] SHIMAHARA H., *Phys. Rev. B*, **62** (2000) 3524.
- [37] SHIMAHARA H., *J. Phys. Soc. Jpn.*, **69** (2000) 1966.
- [38] KUROKI K. and TANAKA Y., *J. Phys. Soc. Jpn.*, **74** (2005) 1694.
- [39] SOLYOM J., *Adv. Phys.*, **28** (1979) 201.
- [40] TANAKA Y. and KUROKI K., *Phys. Rev. B*, **70** (2004) 060502.
- [41] MONTAMBAUX G., HÉRITIER M. and LEDERER P., *J. Phys. (Paris) Lett.*, **45** (1984) L533.
- [42] SUGINISHI Y. and SHIMAHARA H., *Phys. Rev. B*, **74** (2006) 024518.

Available online at www.sciencedirect.com

Solid State Sciences 10 (2008) 1790–1793

www.elsevier.com/locate/ssscie

Singlet/triplet transition in a two-band organic superconductor

G. Abramovici*, N. Belmechri, M. Héritier

Laboratoire de Physique des Solides, Univ. Paris-Sud, CNRS, UMR 8502, Bâtiment 510, F-91405 Orsay Cedex, France

Received 29 October 2007; received in revised form 22 January 2008; accepted 23 January 2008

Available online 5 February 2008

Abstract

We study quasi-one-dimensional organic superconductors with two-band dispersion. We use spin ladder approximation with the Hubbard model. We determine the symmetry of the Cooper pairing by calculating the free energy. Thanks to close values of singlet and triplet scatterings, the phase diagram reveals that, at high magnetic field, the triplet configuration is more favorable, indicating a transition from singlet superconducting state at low fields to triplet one. This result confirms similar ones in one-band system and can explain recent experimental results on $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$.

© 2008 Elsevier Masson SAS. All rights reserved.

PACS: 71.10.Li; 71.10.Pm; 71.10.Fd; 74.20.-z; 74.20.Mn; 74.20.Rp

Keywords: Superconductors; Strongly interacting electrons; Magnetism; Triplet symmetry; Singlet symmetry; Phase transition

1. Introduction

The symmetry of the superconducting phases that are observed in organic materials is a challenging subject and its determination has been longly debated. Experimental observations in the Bechgaard salts $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ ($\text{X} = \text{PF}_6, \text{ClO}_4$) [1] are contradictory and could not yet be interpreted unambiguously: some data indicate that the pairing is singlet [2], while others indicate that it is triplet [3,4].

It is now generally admitted that, at low magnetic field, this symmetry is singlet [2,5], and not conventional [6], therefore Cooper pairs form (*d*)-waves. The situation is more intricate at high field, since the critical field far exceeds the Pauli limit [3,4]. Moreover, Ref. [5] gives some indications of a possible transition between two superconducting phases, at high magnetic field. Some authors [7,8] suggested that there is a transition to an FFLO state, which is still singlet [9], but, following Lebed [10], we believe this is not possible, and we have proposed a simple theoretical model, for the case of $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$, that shows a transition from singlet to triplet symmetry, as the field is increased [11].

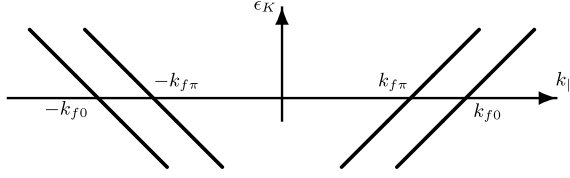
We study here the case of $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$, which is a two-band system. Although this system is simpler than $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ (in the PF_6 compound, k_f depends on k_\perp , giving a curved quasi-one-dimensional Fermi surface, while in the ClO_4 one, k_f only takes two values), we believe they are likely to exhibit a similar transition at high magnetic field. In a previous study of the influence of interchain backward scattering on the charge density wave and triplet superconducting susceptibilities [12,14], a large similarity has already been observed between both systems. We approximate the crystalline structure by a spin ladder with a standard Hubbard model. Scattering couplings are modified by a standard renormalisation group (RG) method [13]. We add a Zeeman term for spin magnetic moment, but we neglect orbital pair-breaking mechanism which is reduced here, as we choose $H \parallel b'$.

At high temperature, the Cooper and the Peierls channels are coupled, so we use an RG procedure similar to that in Ref. [14]. The two-band system is quasi-one-dimensional and fluctuations favor triplet phase as well as singlet one. The system undergoes a dimensional transition at $T = T^* \sim 100$ K, so we turn the RG flow into a standard RPA calculation, where the Cooper and Peierls channels are decoupled.

For $T < T^*$, the scattering couplings remain constant and we simply solve the Gor'kov equations for the normal and

* Corresponding author.

E-mail address: abramovici@lps.u-psud.fr (G. Abramovici).


 Fig. 1. The two-band dispersion in \parallel direction.

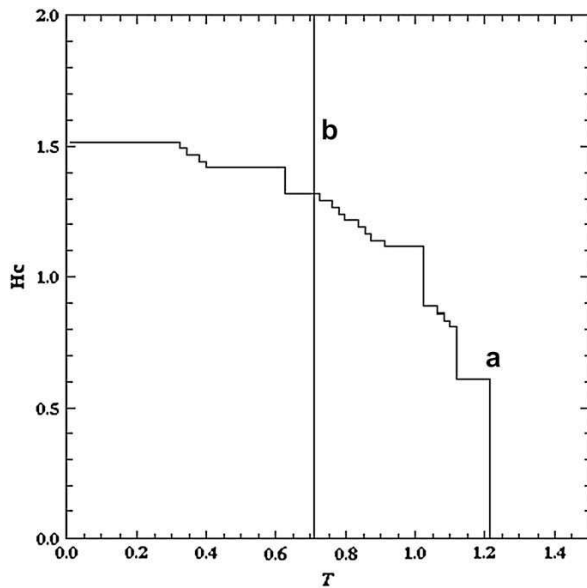
abnormal propagators. Thus we calculate the free energy, for each symmetry, at low temperature.

When the renormalised scattering couplings g_s^* and g_t^* are close, the triplet configuration always becomes more favorable at high magnetic fields. This confirms the possibility of a singlet/triplet transition in such organic materials.

2. Model

We use the two-band Hubbard model, with Hamiltonian $H = H_{\text{kin}} + H_{\text{int}}$, where the kinetic and interaction parts can be written as

$$\begin{aligned}
 H_{\text{kin}} = & \sum_{\sigma=\pm 1/2} \sum_K (v_f(K - k_{f0}) - 2\sigma\mu_e H) R_{0\sigma}^\dagger(K) R_{0\sigma}(K) \\
 & + (v_f(K - k_{f\pi}) - 2\sigma\mu_e H) R_{\pi\sigma}^\dagger(K) R_{\pi\sigma}(K) \\
 & + (v_f(K + k_{f0}) - 2\sigma\mu_e H) L_{0\sigma}^\dagger(K) L_{0\sigma}(K) + (v_f(K + k_{f\pi}) \\
 & - 2\sigma\mu_e H) L_{\pi\sigma}^\dagger(K) L_{\pi\sigma}(K)
 \end{aligned}$$


 Fig. 2. H_c versus T for singlet (a) and triplet (b) symmetries.

$$\begin{aligned}
 H_{\text{int}} = & \sum_{\substack{\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \mathbf{K}'_1, \mathbf{K}'_2 \\ \mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2 = \mathbf{K}'_1 + \mathbf{K}'_2}} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \frac{1}{N} \\
 & \times (\mathcal{G}_1(\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \mathbf{K}'_1, \mathbf{K}'_2) R_{\mathbf{K}'_1 \sigma_1}^\dagger L_{\mathbf{K}'_2 \sigma_2}^\dagger R_{\mathbf{K}_2 \sigma_2} L_{\mathbf{K}_1 \sigma_1} \\
 & + \mathcal{G}_2(\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \mathbf{K}'_1, \mathbf{K}'_2) R_{\mathbf{K}'_1 \sigma_1}^\dagger L_{\mathbf{K}'_2 \sigma_2}^\dagger L_{\mathbf{K}_2 \sigma_2} R_{\mathbf{K}_1 \sigma_1})
 \end{aligned}$$

The kinetic Hamiltonian is linearized around the Fermi points [15] with a single Fermi velocity v_f (R reads *right moving* particle and L *left moving* one), see Fig. 1. \mathcal{G}_i is the two-particle coupling, and we will use the g -ology representation in a simplified symmetrical version. Including the spin dependency $i = 1, 2$, there are eight different couplings [16] g_{0i} , $g_{\pi i}$, g_{i1} , g_{i2} (we use dimensionless couplings $\mathcal{G}/(\pi v_f)$).

There are two adjustable parameters, U , the Hubbard constant (the flow begins with $\mathcal{G}_i = U$ for all couplings), and t_\perp , which relates the Fermi surface gap $\Delta k_f \equiv k_{f0} - k_{f\pi}$ by $\Delta k_f = 2t_\perp/v_f$.

At high temperature, the magnetic field H is negligible, and we use the one particle irreducible (OPI) scheme [17,18] to recalculate the scattering couplings in an one-loop expansion.

The RG equations for scatterings \mathcal{G} can be written as

$$\frac{\partial g_{01}}{\partial \ell} = -\frac{g_{01}^2 + g_{t1} g_{t2}}{2} + \frac{g_{b1} g_{b2} - g_{b1}^2}{2(1 + t^* \exp(\ell))}$$

$$\frac{\partial g_{02}}{\partial \ell} = -\frac{g_{01}^2 + g_{t1}^2 + g_{t2}^2}{4} + \frac{g_{b2}^2}{4(1 + t^* \exp(\ell))}$$

$$\frac{\partial g_{f1}}{\partial \ell} = \frac{g_{t1}^2 + g_{t2}^2 - g_{t1}^2 - g_{f1}^2}{2} - \frac{g_{b1} g_{b2}}{2(1 + t^* \exp(\ell))}$$

$$\frac{\partial g_{f2}}{\partial \ell} = \frac{g_{t2}^2 - g_{f1}^2}{4} - \frac{g_{b1}^2 + g_{b2}^2}{4(1 + t^* \exp(\ell))}$$

$$\frac{\partial g_{t1}}{\partial \ell} = \frac{(g_{f2} - g_{02} - 2g_{f1})g_{t1} + (g_{f1} - g_{01})g_{t2}}{2}$$

$$\frac{\partial g_{t2}}{\partial \ell} = \frac{(g_{f2} - g_{02})g_{t2} - g_{01}g_{t1}}{2}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g_{b1}}{\partial \ell} = & \frac{(g_{02} - g_{f2} - 2g_{01})g_{b1} + (g_{01} - g_{f1})g_{b2}}{4} \\
 & \times \left(1 + \frac{1}{1 + t^* \exp(\ell)} \right)
 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial g_{b2}}{\partial \ell} = \frac{(g_{02} - g_{f2})g_{b2} - g_{f1}g_{b1}}{4} \left(1 + \frac{1}{1 + t^* \exp(\ell)} \right)$$

where the half bandwidth is $A = A_0 e^{-\ell}$ and $t^* = \Delta k_f A_0$.

We stop the RG flow at $A = t_\perp$, which corresponds fairly to $T \sim T^*$. For $T < T^*$, we solve the Gor'kov equations [19] and find the following gap equations, for singlet (d) or triplet (f) symmetry, which depend now on the magnetic field H

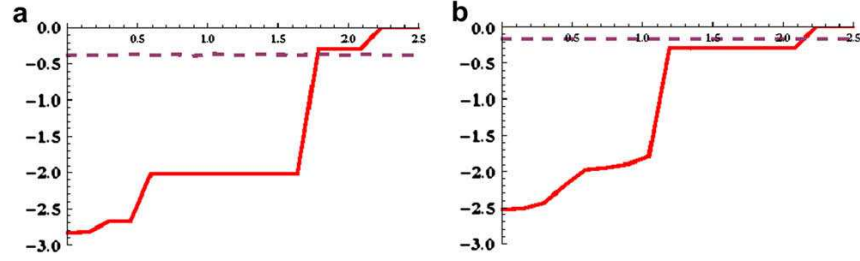


Fig. 3. $F_{SC(d)} - F_{normal}$ (line) and $F_{SC(f)} - F_{normal}$ (dashed) versus m for $T = 0.01$ K (a) and $T = 1$ K (b).

$$\frac{1}{g_s} = \int_{-\frac{T_c}{2}}^{\frac{T_c}{2}} dk \frac{\tanh\left(\frac{\Theta(\Delta_s, \nu_f k) + \mu_c H}{2T}\right) + \tanh\left(\frac{\Theta(\Delta_s, \nu_f k) - \mu_c H}{2T}\right)}{2\Theta(\Delta_s, \nu_f k)}$$

$$\frac{1}{g_t} = \int_{-\frac{T_c}{2}}^{\frac{T_c}{2}} dk \frac{\tanh\left(\frac{\Theta(\Delta_t, \nu_f k - \mu_c H)}{2T}\right)}{\Theta(\Delta_t, \nu_f k - \mu_c H)}$$

with $\Theta(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2}$. We chose singlet (d)-wave instead of singlet s -wave with respect to experimental results obtained by Joo et al. [6]. We chose triplet (f)-wave instead of triplet (p)-wave to be consistent with previous numerical results obtained in Ref. [14], where the only diverging triplet susceptibility is indeed (f). With these assumptions, we have $g_s = -g_{01} - g_{02} + g_{t1} + g_{t2}$ and $g_t = g_{01} - g_{02} - g_{t1} + g_{t2}$.

These equations implicitly give the superconducting order parameters, in the singlet case, and in the triplet one. The difference of thermodynamic potentials, between the superconducting state and the normal one,

$$\Omega_{SC} - \Omega_{normal} \approx \int_0^g dg' \left(\frac{1}{g'2} \right) \int dk |\Delta(k)|^2$$

gives (assuming the same number of particles $N_{SC} = N_{normal}$) [20] the difference of free energies $F_{SC} - F_{normal}$.

3. Results

For $U = 0.68$ [21] and $2t_{\perp}/A_0 = 0.24295$, one get $g_s^* = g_s(T^*) = 11.6$ and $g_t^* = g_t(T^*) = 10.6$.

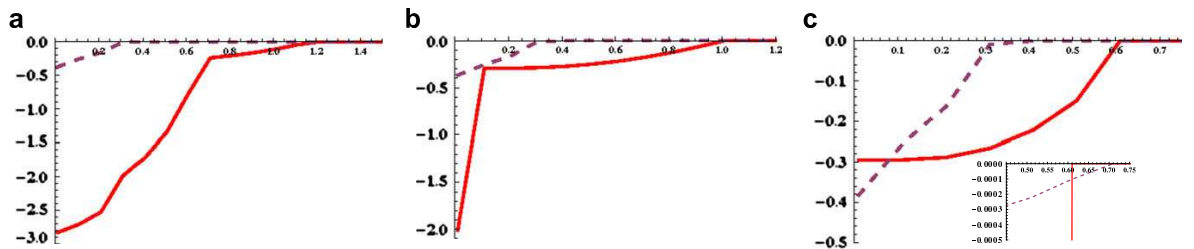


Fig. 4. $F_{SC(d)} - F_{normal}$ (line) and $F_{SC(f)} - F_{normal}$ (dashed) versus T for $m = 0$ T (a), $m = 1.4$ T (b) and $m = 2$ T (c) (inset $m = 2$ T shows reentrance).

Here are the curves of the critical field H_c in the singlet case and in the triplet one. In the triplet case, there is no saturation because we have neglected the orbital pair-breaking effect. We have adjusted our parameters in order to fit $T_c \approx 1.14$ K at zero field (Fig. 2).

Let us analyse the free energy dependence in more details. Here are the free energies, at $T = 0.01$ K and $T = 0.3$ K, as a function of the magnetic field (Fig. 3).

The triplet curve is almost constant, when T is fixed. This is only because we have neglected the orbital pair-breaking effect. The singlet curve becomes discontinuous when T is above 0.2 K.

Here are the free energies, at $H = 0$ T, $H = 1$ T and $H = 1.34$ T, as a function of the temperature (Fig. 4).

It is only at small temperature that the triplet configuration is more favorable. There is a very small reentrance at $H = 1.34$ T.

4. Discussion

We get the following phase diagram of the two-band system (Fig. 5), which shows that triplet pairing is more favorable when H is increased and $T \leq 0.3$ K.

Let us first discuss the orbital pair-breaking effect. Although we neglect it, we account for its main effect on electronic orbitals: in the absence of magnetic field, the system becomes three-dimensional when $T < T^*$. However, when $H \parallel b'$, the magnetic field reduces the overlapping between $a-b$ planes, so the system becomes bi-dimensional as H is increased (the spin ladder is only a crude approximation of such a quasi-one-dimensional system).

Moreover, this orbital pair-breaking effect has already been calculated in a simple case [10], where it was proved that in

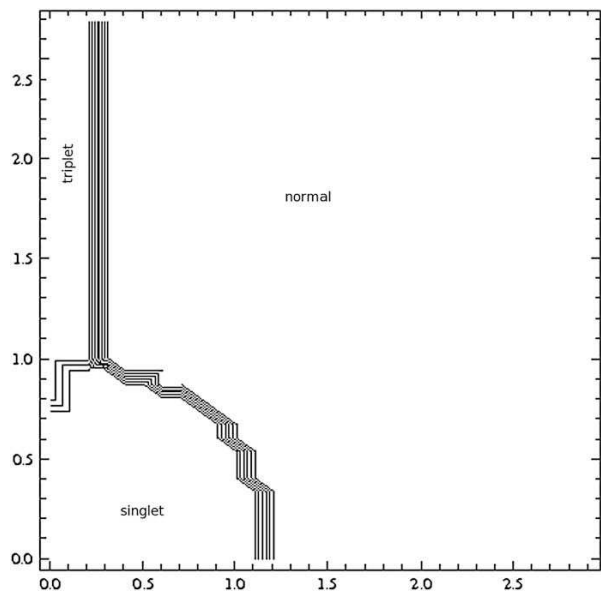


Fig. 5. Phase diagram versus T and magnetic field H .

FFLO state H_c is only raised from the Pauli limit, by an amount that cannot account for experimental data.

The values of the renormalised scatterings g_s^* and g_t^* , for this two-band system, are not as free as it could seem at first glance. They are constrained by experimental determinations of T_c and H_c . It is in fact commonly admitted that $g_t \lesssim g_s \sim 1/10$. With these values, triplet superconductivity is still favorable at very high fields, while singlet one is always saturated.

To support our model, one needs to confirm experimentally that there is a transition from thermodynamic measurements. We believe this will be the case.

In conclusion, we believe that the symmetry of the superconducting state in organic materials is not permanent but

that a transition can be observed, as magnetic field is increased from a singlet state to a triplet one. This has already been suggested by a few authors [5].

References

- [1] D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault, K. Bechgaard, J. Phys. Lett. (Paris) 41 (1980) L95;
- D. Jérôme, H.J. Schultz, Adv. Phys. 4 (1982) 299.
- [2] K. Anders, F. Wudl, D.B. McWhan, G.A. Thomas, D. Nalewajek, A.L. Stevens, Phys. Rev. Lett. 45 (1980) 1449.
- [3] I.J. Lee, M.J. Naughton, G.M. Danner, P.M. Chaikin, Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 3555.
- [4] J.I. Oh, M.J. Naughton, Phys. Rev. Lett. 92 (2004) 67001.
- [5] J. Shinagawa, Y. Kurosaki, F. Zhang, C. Parker, S.E. Brown, D. Jérôme, J.B. Christensen, K. Bechgaard, Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 147002.
- [6] N. Joo, P. Auban-Cenzier, C.R. Pasquier, D. Jérôme, K. Bechgaard, Europhys. Lett. 72 (2005) 645.
- [7] N. Dupuis, G. Montambaux, C.A.R. Sà de Melo, Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 2613.
- [8] H. Shimahara, Phys. Rev. B 50 (1994) 12760.
- [9] P. Fulde, R.A. Ferrell, Phys. Rev. 135 (1964) A550;
- A.I. Larkin, Y.N. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP 20 (1965) 762.
- [10] A.G. Lebed, Phys. Rev. B 59 (1999) R721.
- [11] N. Belmechri, G. Abramovici, M. Héritier, Europhys. Lett. 80 (2007) 37004.
- [12] G. Abramovici, M. Héritier, Phys. Rev. B 75 (2007) 094516.
- [13] T. Giamarchi, H.J. Schulz, J. Phys. (France) 49 (1988) 819.
- [14] G. Abramovici, J.C. Nickel, M. Héritier, Phys. Rev. B 72 (2005) 045120.
- [15] J. Sólyom, Adv. Phys. 28 (1979) 201.
- [16] M. Fabrizio, Phys. Rev. B 48 (1993) 15838.
- [17] W. Metzner, C. Castellani, C. Di Castro, Adv. Phys. 47 (1998) 317.
- [18] C. Honerkamp, M. Salmhofer, N. Furukawa, T.M. Rice, Phys. Rev. B 63 (2001) 35109.
- [19] N. Belmechri, G. Abramovici, M. Héritier, Europhys. Lett., in press.
- [20] A.L. Fetter, J.D. Walecka, Quantum Theory of Many-particle Systems, McGraw-Hill, 1971.
- [21] I keep the normalisation of Ref. [12], in standard normalisation, one reads $U=0.34$. These values are in complete agreement with those usually estimated for this system.



Contents lists available at SciVerse ScienceDirect

Solid State Communications

journal homepage: www.elsevier.com/locate/ssc

Coexistent symmetries in a two-band organic superconductor



G. Abramovici*, T. Vinatier, M. Héritier

Laboratoire de Physique des Solides, Univ. Paris-Sud, CNRS, UMR 8502, F-91405 Orsay Cedex France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 1 February 2013

Received in revised form

4 June 2013

Accepted 3 July 2013

by F. Peeters

Available online 9 July 2013

ABSTRACT

We have revisited the phase diagram of perchlorate Bechgaard salts under magnetic field at small temperature, using a spin ladder model with a Hubbard Hamiltonian. Using a non-perturbative Gorkov method, we have calculated the free energies of all possible phases, including a phase with coexisting singlet and triplet superconducting pairs. With our choice of coupling parameters, this coexisting phase proved not favorable. Nevertheless, this study opens new fields of investigation, while the search of such a coexisting phase seems a realistic and promising goal.

© 2013 Elsevier Ltd. All rights reserved.

Keywords:

A: Organic superconductors

B: Transition with magnetic field

D: singlet/triplet pairing

Experimental evidence of triplet superconductivity in organic compounds [1–8] has opened a new and exciting field for theoreticians. Here, we are more particularly interested in $(\text{TM}_2\text{SF})_2\text{X}$ Bechgaard salts [9–11], which exhibit complex and challenging properties. $\text{X}=\text{PF}_6$ compounds are quasi-one-dimensional systems [1,10,12], while $\text{X}=\text{ClO}_4$ compounds are more like spin ladder ones [2,3,13].

We study these materials when a magnetic field H is applied. They exhibit that Meissner effect [10] and superconductivity is very robust when H is increased [1,3,12]. When no field is applied, it has been shown that Cooper pairs have d -singlet symmetry [14,15]. On the other hand, superconductivity resists to fields far above H_c Clogston limit [16]. Even superconductivity reentrance has been observed, which was attributed by most authors to triplet pairing [2,17,18], while by others to Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov (FFLO) states [19]. On the whole, these compounds have shown to be non-conventional superconductors [20].

Indeed, spatially modulated FFLO states which are of singlet symmetry [21] raise Clogston limit up to $H_{c2} > H_c$, while that of triplet states is experimentally unreachable. So, there has been a controversy among theoreticians about the real nature of superconductivity, under strong magnetic field, some arguing that Cooper pairs must be of triplet symmetry under high magnetic field [1,4–7,18,22–28], some that they are FFLO states [8,20,29–34]. Some authors have changed opinion [25,29–31,35–37]. Recent experiments [38] seem to make this controversy obsolete: they give evidences of a FFLO state, but also seem to indicate that

superconductivity survives at $H > H_{c2}$, which could be interpreted as a transition to triplet pairing.

Orbital effect, which is a key mechanism, should be taken into account [11,39], while it is neglected in most of the theoretical calculations [37]. Moreover, the absence of a limiting field to superconductivity gives a strong support to the triplet interpretation; the first estimations [4,22,27,30,31,40] of H_{c2} were clearly too low and not compatible with observed superconductivity at higher values of magnetic field [2,12].

However, new calculations taking into account disorder [41] have given more compatible [36,38,42,43] values of H_{c2} . Experimental data are not clear enough to discriminate between triplet and FFLO interpretation [44].

Our work is devoted to the transition from singular to triplet phase. This transition was first mentioned by Miyasaki and Hasegawa [7], but there has been a recent renewal of the theory [40,46]. A passionating question arises: in case of singlet and triplet pair coexistence at the transition (or near the transition), are pairs of different symmetries separated into domains, or is there a unique stable thermodynamic phase? By the way, very little has been done yet, on the thermodynamic level, concerning superconducting systems.

We have used a non-perturbative method to study the coexistence of singlet and triplet superconductivities. We apply a standard self-consistent mean-field approximation, analogue to BCS equations, but, instead of introducing a simple gap, we include both Δ_s singlet and Δ_t triplet gaps, which correspond to quadratic terms of opposite symmetries in the Hamiltonian.

The solutions of this model are given by two coupled gap equations, which one must treat simultaneously. At that stage, it was already a challenge to find mixed states, which we have

* Corresponding author. Tel.: +33 169155373.

E-mail address: abramovici@lps.u-psud.fr (G. Abramovici).

been very lucky to do. However, they proved thermodynamically unstable: we have calculated the thermodynamic free energy of each phase, comparing that of the singlet, triplet and mixed ones. The last free energy has challenged new theoretical developments, which we present here.

Altogether, the phase diagram is not modified and confirms the previously calculated phase diagram [47], with a singlet zone at small magnetic field, and a triplet one at higher field (and small temperature). The precision has been far increased, so that we could determinate the nature of the transition between singlet and triplet zones, which is first order when T is fixed, but second order when H is fixed.

We will briefly recall the model, before explaining the free energy calculation and, eventually, presenting our results.

Model: We use the two-band Hubbard model, with Hamiltonian $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{\text{int}}$ [47], which we develop using a mean-field approximation

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{kin}} &= \sum_{\sigma = \pm 1/2} \sum_{k_{\perp}, k_{\parallel}} \left\{ (\xi_{k_{\perp}}(\mathbf{k}) - 2\sigma\mu H) R_{k_{\perp},\sigma}^{\dagger}(k_{\parallel}) R_{k_{\perp},\sigma}(k_{\parallel}) \right. \\ &\quad \left. + (\xi_{k_{\perp}}(\mathbf{k}) - 2\sigma\mu H) L_{k_{\perp},\sigma}^{\dagger}(k_{\parallel}) L_{k_{\perp},\sigma}(k_{\parallel}) \right\} \\ \mathcal{H}_{\text{int}} &= \sum_{\sigma = \pm 1/2} 2\sigma \sum_{k_{\perp}, k_{\parallel}} \left\{ \cos(k_{\perp}) \Delta_s R_{k_{\perp},\sigma}^{\dagger}(k_{\parallel}) L_{k_{\perp},-\sigma}^{\dagger}(-k_{\parallel}) \right. \\ &\quad \left. + \cos(k_{\perp}) \Delta_t R_{k_{\perp},\sigma}^{\dagger}(k_{\parallel}) L_{k_{\perp},\sigma}^{\dagger}(-k_{\parallel}) + h.c. \right\} \end{aligned}$$

where \mathbf{k} is the complete parallel wave-vector with norm $|k_{\parallel}|$. Its complete expression depends on k_{\perp} and on the direction of the particle momentum (R stands for *right moving* and L for *left moving* particle). This model is analogous to Eq. (3) of Ref. [31]: the orbital effect reduces the coupling between orbitals of separate chains and therefore enhances the anisotropy between t_a and t_b , which is now encoded in the difference $k_{f\pi} - k_{f0}$. This quantity does not explicitly depend on H [45]. Although there exist some differences, for instance, the ground state of the ladder system is spin-gapped, the comparison between the ladder model and the coupled chain [23] one shows many qualitative similarities [47] and we have chosen the ladder system, for which calculations can be performed analytically. We have chosen an interchain intraband d -symmetry for the singlet pairing, and an interchain intraband f_x -symmetry for the triplet one. We chose singlet d -wave instead of s -wave with respect to the experimental results obtained by Joo et al. [14]. We chose triplet f -wave instead of p -wave to be consistent with previous numerical results obtained in Ref. [27], where the only diverging triplet susceptibility has indeed f -symmetry. A matrix representation of \mathcal{H} writes

$$\begin{pmatrix} \xi(\mathbf{k}) - \mu H + i\omega & \Delta_s & \Delta_t & 0 \\ \Delta_s & -\xi(\mathbf{k}) + \mu H + i\omega & 0 & -\Delta_t \\ \Delta_t & 0 & -\xi(\mathbf{k}) - \mu H + i\omega & \Delta_s \\ 0 & -\Delta_t & \Delta_s & \xi(\mathbf{k}) + \mu H + i\omega \end{pmatrix}$$

For $T < T^*$, we solve the Gor'kov [34,48] which writes $i\hbar\partial G/\partial t = [\mathcal{H}, G]$ and find the following gap equations, for singlet d - or triplet f_x -symmetry, which depend now on the magnetic field H and are exact:

$$\begin{aligned} \frac{1}{g_s} &= \int_{-T_c/2}^{T_c/2} de \left\{ \frac{\tanh\left(\frac{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, \mu H)}{2T}\right)}{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, \mu H)} \left(1 + \frac{\mu H}{\sqrt{e^2 + \Delta_s^2}}\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\tanh\left(\frac{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, -\mu H)}{2T}\right)}{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, -\mu H)} \left(1 - \frac{\mu H}{\sqrt{e^2 + \Delta_s^2}}\right) \right\} \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{1}{g_t} = \int_{-T_c/2}^{T_c/2} de \left\{ \frac{\tanh\left(\frac{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, \mu H)}{2T}\right)}{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, \mu H)} + \frac{\tanh\left(\frac{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, -\mu H)}{2T}\right)}{\Theta(\Delta_s, \Delta_t, e, -\mu H)} \right\} \quad (2)$$

with $\Theta(x, y, z, t) = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2 + t^2 + 2xt\sqrt{x^2 + z^2}}$ and g_s (resp. g_t) is the singlet (resp. triplet) coupling.

Free energy: (Δ_s, Δ_t) is the solution of the system of Eqs. (1) and (2). The original equations have been already divided by a factor Δ_s in (1) and Δ_t in (2). Therefore, there are two kinds of non-zero solutions: either one of the order parameters is zero, which immediately cancels the corresponding gap equation, and the other one follows an ordinary gap equation, giving standard singlet or triplet phases; or both order parameters are non-zero, and we are let to find non-trivial coupled solutions.

In standard singlet and triplet cases, the difference between the free energies of the superconducting phase and the normal one, $F_{\text{SC}} - F_{\text{normal}}$, equals the difference of thermodynamic potentials, assuming the same number of particles $N_{\text{SC}} = N_{\text{normal}}$ [49]. This difference can be exactly calculated and writes

$$\Omega_{\text{SC}} - \Omega_{\text{normal}} \approx - \int_0^{g_s} dg' \frac{1}{g'^2} \int dk |\Delta(k)|^2$$

so the thermodynamically stable phase is that with the smallest free energy difference.

For the mixed phase, one must add singlet and triplet contributions, which reads

$$- \int_0^{g_s} dg'_s \frac{1}{g_s'^2} \int dk |\Delta_s(k)|^2 - \int_0^{g_t} dg'_t \frac{1}{g_t'^2} \int dk |\Delta_t(k)|^2$$

but in order not to cope with a general two-parameter minimization problem, so we have used g_s as a unique parameter, writing

$$g'_t = \frac{g_t}{g_s} g'_s \approx \frac{10.783}{11.5} g'_s$$

where we have used a previous estimation of g_s/g_t [40,47]. This ratio could depend on H , according to some authors, but, as we study here the coexistence phase, which is very narrow in H , one can fix it to a constant value. We have varied this value but found no significant modifications. Altogether, the free energy difference writes

$$- \int_0^{g_s} dg'_s \left\{ \frac{1}{g_s'^2} \int dk \left(|\Delta_s(k)|^2 + \frac{g_s}{g_t} |\Delta_t(k)|^2 \right) \right\}$$

but this is *not* the end of the story. Typical curves of the order parameter Δ_s and Δ_t versus g'_s are given in Fig. 1. One observes first that non-trivial coexisting solutions (Δ_s, Δ_t) are only found in a restricted interval of parameter g'_s . Consequently, ordinary solutions $(\Delta_s, 0)$ or $(0, \Delta_t)$ are the correct solutions of the coupled

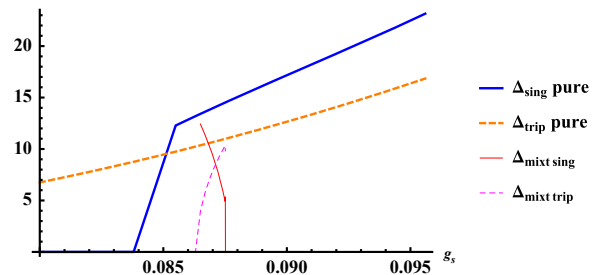


Fig. 1. (Color online) Here are the different solutions Δ_s and Δ_t for $T \sim 0.1$ K and $H \sim 1.1$ T. The thick plain (blue) line corresponds to a pure singlet pairing, the thick dashed (orange) line to a pure triplet one. The thin lines correspond to a mixed case (plain red line is the singlet contribution, dashed purple the triplet one).

gap equations, out of this region, so that the non-trivial solutions be analytically continued over the whole parameter line.

This can be done in many ways, if no attention is paid to continuity, but there is only one possible analytical continuation, that is: choosing the singlet solution for values of g'_s under this interval, and the triplet one for values above the interval. By chance, this behavior is constant whatever T or H . Again, three possibilities arise, to which one must be very cautious. Either g_s , the actual value of the singlet coupling, lies under the interval, so that there is no mixed solution [50] for given (T, H) , or g_s lies within the interval, so that there is indeed a mixed state. Or else, g_s lies above the interval, so that the state has triplet symmetry, although its free energy is different, from that of ordinary triplet states. We believe that such states could be found close to a singlet zone and show precursor (unstable) singlet coupling tendency.

Thanks to this interpretation, we are now in a position to calculate the free energy of each phase and to build the phase diagram.

Calculations: First of all, one must solve the two gap equations, where g_s and g_t are replaced by any value $0 \leq g'_s \leq g_s$ and $0 \leq g'_t \leq g_t$ respectively.

For coexisting symmetry solutions, one must first solve the following equation: one writes that the right side term of (2) is equal to that of (1) multiplied by $g_t/g_s \approx 10.783/11.5$. This equation gives actually Δ_s as a function of Δ_t (or reversely), for fixed values of T and H . A typical curve of this relation is shown in Fig. 2.

Then, one must solve (1) where Δ_t is expressed as a function of Δ_s (or, equivalently (2) where Δ_s is expressed as a function of Δ_t). We show in Fig. 3 the curve of the right term of (1) versus Δ_s for a mixed solution, together with the curve for an ordinary Δ_s solution. It is very instructive to observe that they only differ for small values of Δ_s .

Results: We present in Fig. 4 the complete phase diagram of this system, for $0 \leq T \leq 1.41$ K and $0 \leq H \leq 4$ T. We have divided this figure into four zones, although there are only three phases. In areas I and Ib, the system has singlet symmetry, thanks to the experimental determination of g_s/g_t , whereas triplet wins in area II, so we observe a transition from singlet to triplet superconductivity at the frontier in-between. No order parameter is found in III, which corresponds to a normal metal. Eventually, the frontier with area III is that of superconducting phases with the metallic one. The drastic change of the singlet frontier at larger temperature, $T > 1$ K, recalls that obtained by renormalization group calculations [43]. In this area, no coexistence phase can be found, so we did not study it carefully, although strange behavior can be observed, which are not elucidated.

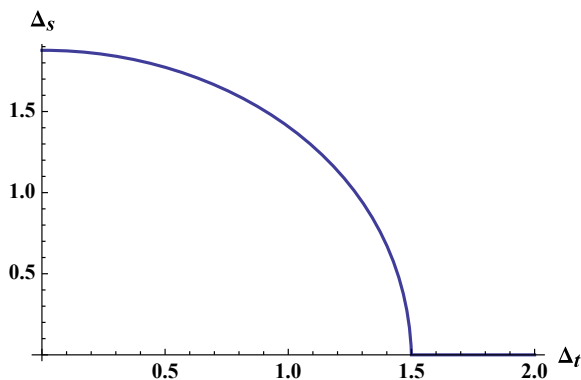


Fig. 2. (Color online) Δ_s versus Δ_t at $T = 1.2$ K and $H = 0.8$ T.

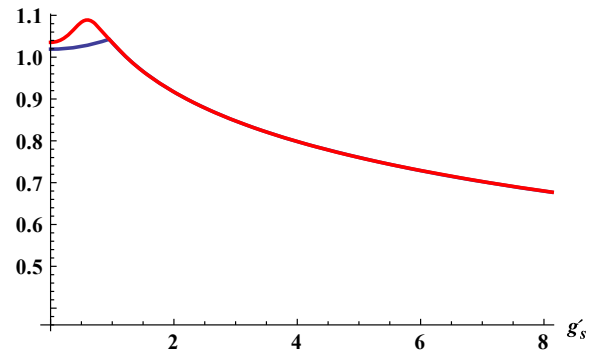


Fig. 3. (Color online) Curve of the right side term of (1) versus Δ_s at $T = 1.2$ K, $H = 0.8$ T and $g'_s = 0.814$. The broken (blue) line corresponds to the mixed solution where Δ_t is an implicit function of Δ_s , the other (red) one to the ordinary solution where $\Delta_t = 0$.

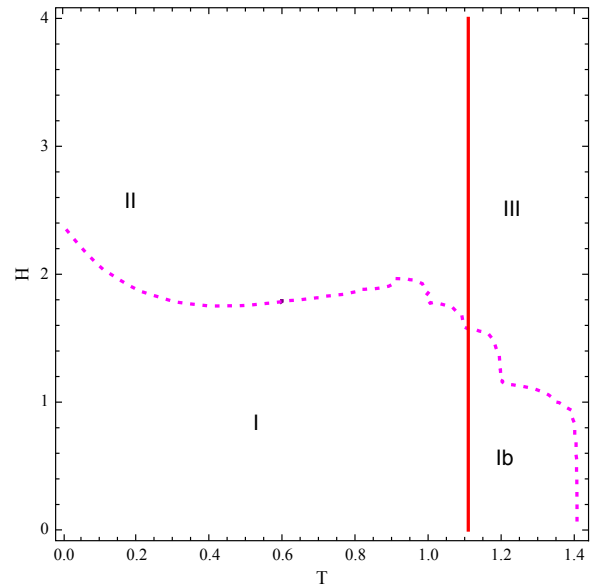


Fig. 4. (Color online) Phase diagram of $(\text{TM}_5\text{SF})_2\text{PF}_6$ versus T (in K) and H (in T). The explanations of zones I–IV are given in the text.

Indeed, we have found a coexistence phase for smaller temperature, $t < 0.8$ K. We do not indicate the corresponding area, since its free energy has always proved smaller than that of singlet pairing states, showing that this phase is unstable.

At a fixed temperature, the nature of the transition from singlet to triplet symmetry is first order, indicating that all Cooper pairs suddenly change order, with a finite energy cost, when H is increased. At a fixed magnetic field, transitions are found to be second order.

Discussion: Although it is conceptually very simple, the resolution of a system with two order parameters using exact Gor'kov equations is quite original. One can compare for instance with Ref. [26], where very interesting calculations are performed treating the second interaction as a perturbation. On the contrary, here we treat each interaction on an equal footing.

This work offers a large perspective. At once, one can vary the value of g_s , which is sensible. More interestingly, we are now working on an extension to a general quasi-one-dimensional model of interacting chains, for which gap equations are similar but somehow different.

We are preparing new calculations with the ladder system, adding a new orbital contribution $\mu_{\text{orb}} \cos k_{\perp}$ in the Hamiltonian, with $\mu_{\text{orb}} = 2ebv$ (e electron charge, b distance between chains and $\xi(\mathbf{k}) = vk_{\parallel}$). This term comes from the discrete [27] Fourier transform of $\alpha m \omega_c$, which appears in Eq. (1) of Ref. [51], with $\alpha = \pm$ and other signs defined therein. There is actually another constant contribution in the Fourier transform, and we also omit a phase factor, but these are less likely to influence the existence of a coexistence phase. This orbital contribution depends explicitly on H , contrary to the anisotropy effect which we use here. We hope that this contribution will compare with singlet pairing, and that the coexistence phase will be thermodynamically stable. Moreover, the order of μ_{orb} can be calculated and is equal to that of μ_B , therefore one must take into account both magnetic terms. In particular, the Zeeman effect is still necessary for the competition against singlet pairing, because it is much more efficient than the new orbital term. Calculations are similar, but much more difficult.

In that respect, the main perspective is related to some important subtlety, which we have not discussed yet: as is described in detail in Ref. [27], superconducting order parameters Δ_s and Δ_t have a very rich structure. Even when one specifies the symmetry (d and f_x here) of each order parameter, they depend both on k_{\parallel} and k_{\perp} . Here, we neglected all dependencies. Moreover, triplet ones are vectors, which allows interesting discussion about the orientation of the Cooper pairs with the direction of the magnetic field. This aspect was also neglected here.

According to a *standard singlet* \rightarrow FFLO \rightarrow *triplet* scenario, [38] one should choose FFLO states instead of standard singlet ones. More generally, Charge Density Waves, which can coexist with superconductivity [23,27], should be also included, leading to a three order-parameter problem.

Taking k_{\perp} dependency into account can be done in many ways. We have chosen to keep only intraband terms and to neglect interband ones, for the simplicity of calculations. Other choices would have led to an 8×8 matrix \mathcal{H} , at least. In fact, keeping only two scalar parameters is somehow artificial, in that respect, but the resolution of many (four or six) simultaneous gap equations seems quite adventurous. The k_{\parallel} dependence is partially encoded in the symmetry of Δ_s and Δ_t . We actually chose the simplest symmetries, which are not very realistic. But taking even symmetry for Δ_t and odd symmetry for Δ_s would lead to a 12×12 matrix \mathcal{H} (or even 24×24 with the linear orbital term, suggested just before).

In conclusion, taking into account coexistence phase may allow the discovery of new phases. Even if it proved unstable, this work offers a new insight in physics.

References

- [1] I.J. Lee, M.J. Naughton, G.M. Danner, P.M. Chaikin, Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 3555.
- [2] I.J. Lee, A.P. Hope, M.J. Leone, M. J. Naughton, Synth. Met. 70 (1995) 747.
- [3] J. Shinagawa, Y. Kurosaki, F. Zhang, C. Parker, S.E. Brown, D. Jérôme, K. Bechgaard, J.B. Christensen, Phys. Rev. Lett. 98 (2007) 147002.
- [4] A.G. Lebed, K. Machida, M. Ozaki, Phys. Rev. B 62 (2000) R795.
- [5] I.J. Lee, P.M. Chaikin, M.J. Naughton, Phys. Rev. B 62 (2000) R14669; I.J. Lee, S.E. Brown, W.G. Clark, M.J. Strouse, M.J. Naughton, W. Kang, P.M. Chaikin, Phys. Rev. Lett. 88 (2001) 017004; I.J. Lee, D.S. Chow, W.G. Clark, M.J. Strouse, M.J. Naughton, P.M. Chaikin, S.E. Brown, Phys. Rev. B 68 (2003) 092510.
- [6] I.J. Lee, P.M. Chaikin, M.J. Naughton, Phys. Rev. B 65 (2002) 180502.
- [7] M. Miyasaki, Y. Hasegawa, J. Phys. Soc. Jpn. 65 (1996) 3283.
- [8] N. Joo, P. Auban-Senzier, C.R. Pasquier, S. Yonezawa, R. Higashinaka, Y. Maeno, S. Haddad, S. Charfi-Kaddour, M. Héritier, K. Bechgaard, D. Jérôme, Eur. Phys. J. B 52 (2006) 337.
- [9] T. Ishiguro, K. Yamaji, G. Saito, Organic Superconductors, Springer Series in Solid State Sciences, vol. 88, Springer Verlag, New York, 1998.
- [10] D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault, K. Bechgaard, J. Physique Lett. 41 (1980) 95.
- [11] D. Jérôme, H.J. Schulz, Adv. Phys. 31 (4) (1982) 299.
- [12] K. Andres, F. Wudl, D.B. McWhan, G.A. Thomas, D. Nalewajek, A.L. Stevens, Phys. Rev. Lett. 45 (1980) 1449.
- [13] J.I. Oh, M.J. Naughton, Phys. Rev. Lett. 92 (2004) 067001.
- [14] N. Joo, P. Auban-Senzier, C.R. Pasquier, D. Jérôme, K. Bechgaard, Europhys. Lett. 72 (2005) 645.
- [15] S. Belin, K. Behnia, Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 2125.
- [16] A.M. Clogston, Phys. Rev. Lett. 9 (1962) 266.
- [17] A.G. Lebed, K. Yamaji, Phys. Rev. Lett. 80 (1998) 2697.
- [18] C.A.R. Sá de Melo, J. Supercond. 12 (1999) 459.
- [19] N. Dupuis, G. Montambaux, C.A.R. Sá de Melo, Phys. Rev. Lett. 70 (1993) 2613.
- [20] M. Kano, H. Mori, T. Nakamura, K. Matsubayashi, M. Hedo, M. Itoi, T. Murphy, S. W. Tozer, Y. Uwatoko, arXiv:0912.1391[cond-mat], 2009.
- [21] P. Fulde, R.A. Ferrell, Phys. Rev. 135 (1964) A550; A.I. Larkin, Y.N. Ovchinnikov, JETP 20 (1965) 762; L.P. Gor'kov, A.G. Lebed', J. Physique Lett. 45 (1984) 433.
- [22] A.G. Lebed, Phys. Rev. B 59 (1999) R721.
- [23] J.C. Nickel, R. Duprat, C. Bourbonnais, N. Dupuis, Phys. Rev. Lett. 95 (2005) 247001; J.C. Nickel, R. Duprat, C. Bourbonnais, N. Dupuis, Phys. Rev. B 73 (2006) 165126.
- [24] R.W. Cherng, C.A.R. Sá de Melo, Phys. Rev. B 67 (2003) 212505; Y. Fuseya, Y. Suzumura, J. Phys. Soc. Jpn. 74 (2005) 1263; K. Kuroki, Y. Tanaka, J. Phys. Soc. Jpn. 74 (2005) 1694; Y. Tanaka, K. Kuroki, Phys. Rev. B 70 (2004) 060502. (R); L.P. Gor'kov, P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B 75 (2007) 020507. (R); H. Aizawa, K. Kuroki, Y. Tanaka, Physica B 403 (2008) 1162; B.J. Powell, J. Phys.: Condens. Matter 20 (2008) 345234.
- [25] A.D. Folgueras, K. Maki, Physica C 460-462 (2007) 643.
- [26] P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B 77 (2008) 224508.
- [27] G. Abramovici, J.C. Nickel, M. Héritier, Phys. Rev. B 72 (2005) 045120.
- [28] K. Kajiwara, M. Tsuchizu, Y. Suzumura, C. Bourbonnais, J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 104702.
- [29] M. Miyazaki, K. Kishigi, Y. Hasegawa, J. Phys. Soc. Jpn. 68 (1999) 3794.
- [30] N. Dupuis, Phys. Rev. B 51 (1995) 9074.
- [31] N. Dupuis, G. Montambaux, Phys. Rev. B 49 (1994) 8993.
- [32] H. Shimahara, Phys. Rev. B 50 (1994) 12760; K. Maki, H. Won, Czech. J. Phys. 46 (Suppl. S2) (1996) 1035; M. Héritier, G. Montambaux, P. Lederer, J. Physique Lett. 45 (1984) 943; S. Yonezawa, S. Kusaba, Y. Maeno, P. Auban-Senzier, C. Pasquier, D. Jérôme, J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) 054712; S. Yonezawa, S. Kusaba, Y. Maeno, P. Auban-Senzier, C. Pasquier, K. Bechgaard, D. Jérôme, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 117002.
- [33] S. Yonezawa, Y. Maeno, K. Bechgaard, D. Jérôme, Phys. Rev. B 85 (2012) 140502.
- [34] M. Sigrist, K. Ueda, Rev. Mod. Phys. 63 (1991) 239.
- [35] H. Shimahara, J. Phys. Soc. Jpn. 68 (1999) 3069; H. Shimahara, Phys. Rev. B 62 (2000) 3524; H. Shimahara, J. Phys. Soc. Jpn. 69 (2000) 1966; H. Won, K. Maki, S. Haas, N. Oeschler, F. Weickert, P. Gegenwart, Phys. Rev. B 69 (2004) 180504. (R); A.G. Lebed, S. Wu, Phys. Rev. B 82 (2010) 172504.
- [36] A.G. Lebed, Phys. Rev. Lett. 107 (2011) 087004; A.G. Lebed, S. Wu, The Physics of organic superconductors, in: A. Lebed (Ed.), Springer Series in Material Sciences, vol. 110, 2008, p. 643.
- [37] G. Roux, S.R. White, S. Capponi, D. Poilblanc, Phys. Rev. Lett. 97 (2006) 087207; G. Roux, E. Orignac, P. Pujol, D. Poilblanc, Phys. Rev. B 75 (2007) 245119.
- [38] R. Beyer, B. Bergk, S. Yasin, J.A. Schlueter, J. Wosnitza, Phys. Rev. Lett. 109 (2012) 027003.
- [39] H. Shimahara, S. Matsuo, K. Nagai, Phys. Rev. B 53 (1996) 12284; G. Montambaux, M. Héritier, P. Lederer, J. Physique Lett. 45 (1984) 533; S. Haddad, M. Héritier, R. Bennaceur, Eur. Phys. J. B 11 (1999) 429.
- [40] N. Belmechri, G. Abramovici, M. Héritier, EPL 80 (2007) 37004.
- [41] E. Helfand, N.L. Werthamer, Phys. Rev. 147 (1966) 288.
- [42] P. Dhakal, H. Yoshino, J.I. Oh, K. Kikuchi, M.J. Naughton, Phys. Rev. B 83 (2011) 014505.
- [43] Y. Fuseya, C. Bourbonnais, K. Miyake, Europhys. Lett. 100 (2012) 57008.
- [44] For instance, see the difference between the determination of H_{c2} from specific heat measurements, done by Refs. [33,38].
- [45] The way we include orbital effect is very poor, we suggest in the concluding remarks to add a term in the Hamiltonian, which depends linearly on H . However, this needs a considerable amount of new calculations, which exceeds the purpose of this paper.
- [46] K. Kajiwara, M. Tsuchizu, Y. Suzumura, C. Bourbonnais, J. Phys. Soc. Jpn. 78 (2009) 104702; A. Aperis, G. Varelogiannis, P.B. Littlewood, Phys. Rev. Lett. 104 (2010) 216403; A. Aperis, G. Varelogiannis, P.B. Littlewood, B.D. Simons, J. Phys.: Condens. Matter 20 (2008) 434235; H. Aizawa, K. Kuroki, T. Yokoyama, Y. Tanaka, Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 016403; A. Romano, M. Cuoco, C. Noce, P. Gentile, G. Annunziata, Phys. Rev. B 81 (2010) 064513.
- [47] G. Abramovici, N. Belmechri, M. Héritier, Solid State Sci. 10 (2008) 1790.
- [48] L.P. Gor'kov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. (Sov. Phys.—JETP) 34 (1958) 735.
- [49] A.L. Fetter, J.D. Walecka, Quantum Theory of Many-particle Systems, McGraw-Hill, 1971; A.A. Abrikosov, L.P. Gor'kov, Sov. Phys.—JETP 12 (1961) 1243.
- [50] When g_{\perp} lies under the interval, the (Δ_s, Δ_t) curves coincide with that of an ordinary singlet state.
- [51] N. Dupuis, Phys. Rev. B 50 (2000) 9607.

The one-dimensional Coulomb problem

G Abramovici¹ and Y Avishai^{2,3}

¹ Laboratoire de Physique des Solides, Univ. Paris Sud, CNRS, UMR 8502, F-91405 Orsay Cedex, France

² Department of Physics and Ilse Katz Center for Nanotechnology, Ben-Gourion University, Beer-Shiva 84105, Israel

³ Hong Kong University of Science and Technology, Clear Water Bay, Kowloon, Hong Kong

E-mail: abramovici@lps.u-psud.fr and yshai@bgu.ac.il

Received 2 February 2009, in final form 3 February 2009

Published 19 June 2009

Online at stacks.iop.org/JPhysA/42/285302

Abstract

One-dimensional scattering by a Coulomb potential $V(x) = \frac{c}{|x|}$ is studied for both repulsive ($c > 0$) and attractive ($c < 0$) cases. Two methods of regularizing the singularity at $x = 0$ are used, yielding the same conclusion, namely, that the transmission vanishes. For an attractive potential ($c < 0$), two groups of bound states are found. The first one consists of *regular* (Rydberg) bound states, following standard orthogonality relations. The second set consists of *anomalous* bound states (in a sense to be clarified), which always relax as coherent states.

PACS numbers: 03.65.Ge, 03.65.Nk, 11.55.Bq, 11.55.Ds, 73.21.Fg, 73.22.Dj

(Some figures in this article are in colour only in the electronic version)

1. Introduction

One-dimensional quantum Hamiltonians are very useful in modeling simple quantum systems. Beside their ubiquitous importance in the study of transmission and tunneling experiments, numerous quantum systems in higher dimensions can be reduced to one-dimensional ones, due to symmetry (for instance radial wavefunctions in a central potential) or specific physical properties (Josephson junctions or edge states in the quantum Hall effect are just two examples).

The aim of the present work is to examine one-dimensional scattering by a three-dimensional Coulomb potential $V(x) = \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0|x|}$, starting from the Schrödinger equation with the Hamiltonian $H = \frac{p^2}{2m} + V$, for an eigenstate $\psi(x)$, with $x \in \mathbb{R}^* \equiv \mathbb{R} \setminus \{0\}$,

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2}(x) + \frac{\lambda}{|x|}\psi(x) = e\psi(x), \quad (1)$$

with $\lambda = \frac{2mqq'}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}$ and $e = \frac{2mE}{\hbar^2}$ where E is the energy. $\lambda > 0$ corresponds to the repulsive potential, $\lambda < 0$ to the attractive one. The boundary conditions will be specified later on. This is referred to as the *one-dimensional Coulomb potential problem*. Although it has recently been studied [1], we find it necessary to analyze it using a somewhat different approach. As it turns out, there are some subtleties involved, which might affect some of the conclusions reached in [1].

One of the main advantages encountered in the quantum Coulomb problem is that the exact wavefunctions are computable. In three dimensions, it was shown 80 years ago [2] that the asymptotic behavior of the wavefunctions is somewhat distinct from that of plane waves. This property has been shown to be valid also in one dimension [3].

It proves useful to follow, first, the standard reduction of the Coulomb problem in three dimensions into a radial one-dimensional equation, and to point out the differences between this equation and equation (1). Starting from the three-dimensional Schrödinger equation, carrying out the partial wave expansion $\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\psi_l(r)P_l(\cos\theta)$ and writing the radial wavefunction as $\psi_l(r) = r^{-1}\phi_l(r)$, one obtains the radial Schrödinger equation for $\phi_l(r)$, with $0 < r < \infty$,

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{\lambda}{r} \right] \phi_l(r) = e\phi_l(r). \quad (2)$$

For $l = 0$ (s wave scattering), equation (2) has the same form as equation (1). The two basic solutions of equation (2) are the regular one, satisfying $\phi_l(0) = 0$, and the singular one, satisfying $\phi_l(0) \neq 0$. The singular solution should be discarded: if not, for $l > 0$, the probability of finding the particle in a sphere of radius R , $P_l(R) = \int_0^R \rho_l(r) 2\pi r^2 dr$ becomes infinite for any R ; for $l = 0$, the situation is more subtle, $P_0(R)$ remains finite, but the radial current $J_0(R) = \int_0^R j_0(r) 2\pi r^2 dr > 0$ becomes nonzero, which is impossible for an s state [4, 5].

A couple of difficulties arise when equation (1) is considered as compared with equation (2):

- (i) The solutions of equation (1) are required on \mathbb{R}^* , and not only on its positive part \mathbb{R}_+^* . Note that H is invariant under space inversion.
- (ii) The arguments used in the three-dimensional case to discard singular solutions of equation (2) are not valid [6] for the original problem specified by equation (1), and the imposition of scattering boundary conditions requires them to be included as well. The standard techniques used for matching the wavefunction at $x = 0$ require either the calculation of $\psi'(\varepsilon)$ or of $\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V(x) dx$ and both quantities diverge logarithmically when $\varepsilon \rightarrow 0$. One must then cope with ultraviolet divergences, which need to be regularized.

These difficulties lead us to the *connection problem*, which can be defined as follows: let us decompose equation (1) into two equivalent coupled equations, one defined on \mathbb{R}_+^* with $\tilde{V}(x) = \frac{\lambda}{x}$, the general solutions of which read

$$\psi_+(x) = Af(kx) + Bg(kx), \quad (3a)$$

and the second defined on \mathbb{R}_-^* with $\tilde{V}(x) = -\frac{\lambda}{x}$, the general solutions of which read

$$\psi_-(x) = a\bar{f}(kx) + b\bar{g}(kx). \quad (3b)$$

Here, $f(x > 0)$ and $\bar{f}(x < 0)$ are regular solutions, while $g(x > 0)$ and $\bar{g}(x < 0)$ are singular solutions, defined on the appropriate domains; the relations between f, g and \bar{f}, \bar{g} will be clarified later on. The connection problem consists in the calculation of the 2×2 matrix expressing (A, B) in terms of (a, b) . Since the derivative of the singular solution diverges at $x = 0$, it is impossible to match both ψ and ψ' at $x = 0$. It is also not possible to use the

method [7, 8] employed in a problem of scattering by a potential $V(x) = \lambda\delta(x)$ since the latter potential is integrable at $x = 0$, $\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} V(x) dx = \lambda$, whereas the Coulomb potential is not. Apparently, the connection problem cannot be solved in terms of simple linear relations, and one needs to consider bilinear constraints (an example of such a constraint is the current conservation $J(O^-) = J(O^+)$ around $x = 0$).

Our first task is to properly formulate and solve the scattering problem, corresponding to $e > 0$. To carry this out, we use two independent regularization methods. One is based on bilinear constraints, which can be formulated in such a way that ultraviolet divergences are canceled. The other method consists in calculating the exact transmission for a truncated Coulomb potential V_ε , with $V_\varepsilon(x) = 0$ for $|x| < \varepsilon$, $V_\varepsilon(x) = \lambda/|x|$ for $|x| > \varepsilon$ and letting $\varepsilon \rightarrow 0$. With both methods, we arrive at the conclusion that the transmission coefficient vanishes, $T = 0$. The potential is perfectly reflective. Moreover, this property of total reflection also holds for the attractive potential ($\lambda < 0$), whereas classically the reflection vanishes; it is a novel manifestation of perfect *quantum reflection* from an attractive potential. It is distinct from the standard example of quantum reflection from an infinite attractive square well: in the latter case, the divergence of $\int V(x) dx$ is faster than logarithmic, and the corresponding spectrum is not bounded from below.

Our second goal is to calculate bound state energies and wavefunctions for an attractive potential ($\lambda < 0$) (the one-dimensional ‘hydrogen atom’ problem). The ensuing discrete part of the spectrum ($e < 0$) appears to be rather intriguing, as it is composed of two interlacing spectra. The first one (reported also in [1]⁴) is the usual Rydberg spectrum, with energies $E_n = -\frac{E_0}{n^2}$, with $n = 1, 2, \dots$. The corresponding wavefunctions are the *regular* solutions of the differential equation (1). The energies of the second part of the spectrum are shifted from the first one through $n \rightarrow n + 1/2$, that is, $\tilde{E}_n = -\frac{E_0}{(n+\frac{1}{2})^2}$, with $n = 0, 1, \dots$. The corresponding wavefunctions will be referred to as *anomalous* states, and are constructed in terms of the singular solutions of equation (1). These solutions are square integrable but not orthogonal. A proper incorporation of such states might require further insight into the basic principles of quantum mechanics.

We organize the rest of the paper as follows: In section 2, we will first study the scattering problem, and then explain, in section 3, the two regularization methods used to solve the connection problem. The bound state problem will be analyzed in section 4, where regular and anomalous states are introduced. Finally, a short discussion of our results is carried out in section 5. Calculations requiring technical manipulations are collected in the appendices.

2. The scattering problem

2.1. Scattering states

2.1.1. Basic solutions. For the scattering problem, we have $e > 0$ in equation (1). It is convenient to recast equation (1) so that all quantities are dimensionless. Let $k = \sqrt{e}$, $u = kx$, $\eta = \lambda/(2k) = \frac{qq'}{4\pi\epsilon_0\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}}$ and $\varphi(u) = \psi\left(\frac{u}{k}\right)$. Then the equation for φ is

$$-\frac{d^2\varphi}{du^2}(u) + 2\frac{\eta}{|u|}\varphi(u) = \varphi(u), \quad u \in \mathbb{R}^*, \quad (4)$$

with regular and singular solutions $f_\eta(u)$ and $g_\eta(u)$. Equation (4) is equivalent to the following couple of equations:

⁴ It is not clear why the analytic continuation avoiding zero did not give all solutions.

$$-\frac{d^2\varphi}{du^2}(u) + 2\frac{\eta}{u}\varphi(u) = \varphi(u) \quad \text{for } u > 0; \tag{5a}$$

$$-\frac{d^2\varphi}{du^2}(u) - 2\frac{\eta}{u}\varphi(u) = \varphi(u) \quad \text{for } u < 0. \tag{5b}$$

The solutions of equation (5a) are known as Coulomb's wavefunctions [2, 9] with $L = 0$. We will write $F_\eta(u)$ for the regular solution and $G_\eta(u)$ for the singular (logarithmic) one:

$$F_\eta(u) = C_\eta u e^{-iu} M(1 - i\eta, 2, 2iu); \tag{6a}$$

$$\begin{aligned} G_\eta(u) &= \text{Re} \left(2\eta \frac{u e^{-iu} \Gamma(-i\eta)}{C_\eta} U(1 - i\eta, 2, 2iu) \right) \\ &= 2\eta \frac{u e^{-iu} \Gamma(-i\eta)}{C_\eta} U(1 - i\eta, 2, 2iu) - i(-1 + \pi\eta + 2\iota_\eta) F_\eta(u) / C_\eta^2, \end{aligned} \tag{6b}$$

where

$$C_\eta = e^{-\frac{\pi\eta}{2}} \sqrt{\frac{\pi\eta}{\sinh(\pi\eta)}} \quad \text{and} \quad \iota_\eta = \eta \text{Im}(\Gamma(1 - i\eta)).$$

In these equations, M is the regular confluent hypergeometric function, also written as ${}_1F_1$, and U is the logarithmic (also called irregular) confluent hypergeometric function⁵. Both F_η and G_η are real. Thus, the solutions of equation (4) for $u > 0$ are $f_\eta(u) = F_\eta(u)$ and $g_\eta(u) = G_\eta(u)$, $\forall \eta$.

Consider now the domain $u < 0$. In principle, finding the solutions of equation (5b) can be achieved by direct continuation of $F_\eta(u)$ and $G_\eta(u)$. Practically, this requires some care, especially for G_η . F_η can be continued analytically since it is regular at $u = 0$, while for $G_\eta(u)$ one has to avoid the divergence of G'_η at $u = 0$. Since (5a) is valid for any sign of η , we simply need to change $\eta \rightarrow -\eta$ in the previous expressions, to get the solutions of (5b), thus we get $f_\eta(u) = F_{-\eta}(u)$ and $g_\eta(u) = G_{-\eta}(u) \forall u < 0$ and $\forall \eta$. It should be pointed out that in the imaginary part of (6b), the factor before F_η does not follow the $\eta \rightarrow -\eta$ transformation⁶. The right expression is (note that $C_{-\eta} = e^{\pi\eta} C_\eta$), $\forall u < 0$,

$$g_\eta(u) = -2\eta \frac{u e^{-iu} \Gamma(i\eta)}{C_{-\eta}} U(1 + i\eta, 2, 2iu) - i(-1 + \pi\eta + 2\iota_\eta) F_{-\eta}(u) / C_{-\eta}^2. \tag{6c}$$

One should also note that relations (14.1.14)–(14.1.20) of [9] extend for $\rho < 0$ as soon as one replaces $\log(2\rho)$ by $\log(-2\rho)$ in (14.1.14).

Basic solutions $f_\eta(u)$ and $g_\eta(u)$ are defined on \mathbb{R}^* and shown in figure 1. These solutions are constructed so that equations (5a) and (5b) are satisfied for both $u > 0$ and $u < 0$, yet the matching condition at $u = 0$ is not addressed. This will be carried out when we solve the connection problem.

2.1.2. The general solution. Having defined the *basic solutions*, we can now form the *general solution* as a linear combination of $f_\eta(u)$ and $g_\eta(u)$, on each side of $u = 0$. We use expressions (3a) for $u > 0$ and (3b) for $u < 0$. Now, the relation between f and \bar{f} and that between g and \bar{g} are well established, so that the bar can be omitted. With these notations, the general solution is written

$$\varphi(u, \eta) = \begin{cases} Af_\eta(u) + Bg_\eta(u) & \text{for } u > 0; \\ af_\eta(u) + bg_\eta(u) & \text{for } u < 0. \end{cases} \tag{7}$$

⁵ Note that relation (13.1.3) in [9] fails here so one should use instead (13.1.6).

⁶ The origin of which we did not elucidate.

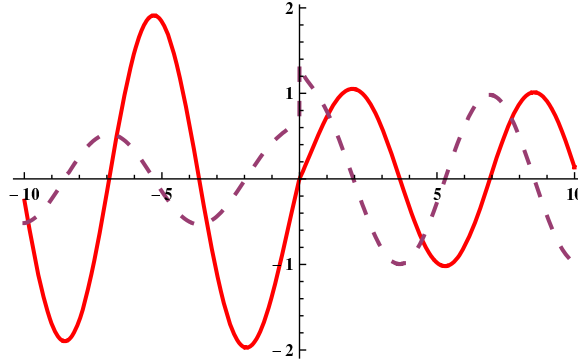


Figure 1. f_η (full line) and g_η (dashed line) for $\eta = 1/5$.

The linearity of the Schrödinger equation implies that the connection problem eventually reduces to finding the 2×2 matrix D , which obeys

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \text{with} \quad \det(D) \neq 0. \quad (8)$$

2.1.3. *The transfer matrix.* It should be stressed that D is *not* the transfer matrix T because T transforms incoming and outgoing (distorted) plane waves at $u \rightarrow -\infty$ to those at $u \rightarrow \infty$. In order to identify these asymptotic waves, we need first to examine the asymptotic behavior of the function $\varphi(u, \eta)$ when $u \rightarrow \pm\infty$.

The asymptotic behaviors of $F_\eta(u)$ and $G_\eta(u)$ for $u \rightarrow +\infty$ were established a long time ago in [2]:

$$F_\eta(u) = \left(1 + \frac{\eta}{2u} + \frac{5\eta^2 - \eta^4}{8u^2} + \dots \right) \sin(u - \Theta_\eta(u)) + \left(\frac{\eta^2}{2u} - \frac{2\eta - 4\eta^3}{8u^2} + \dots \right) \cos(u - \Theta_\eta(u)) \underset{u \rightarrow \infty}{\sim} \sin(u - \Theta_\eta(u)); \quad (9a)$$

$$G_\eta(u) = \left(1 + \frac{\eta}{2u} + \frac{5\eta^2 - \eta^4}{8u^2} + \dots \right) \cos(u - \Theta_\eta(u)) - \left(\frac{\eta^2}{2u} - \frac{2\eta - 4\eta^3}{8u^2} + \dots \right) \sin(u - \Theta_\eta(u)) \underset{u \rightarrow \infty}{\sim} \cos(u - \Theta_\eta(u)); \quad (9b)$$

with

$$\Theta_\eta(u) = \eta \log(2u) - \arg[\Gamma(1 + i\eta)]. \quad (10)$$

Derivation of the asymptotic behaviors of $F_\eta(u)$ and $G_\eta(u)$ for $u \rightarrow -\infty$ is more subtle. Their determination in (6c) and (6d) of [1] is to be reconsidered⁷. In appendix A, we find

$$F_\eta(u) = e^{-\pi\eta} \left(1 + \frac{\eta}{2u} + \frac{5\eta^2 - \eta^4}{8u^2} + \dots \right) \sin(u - \Theta_\eta(u)) + e^{-\pi\eta} \left(\frac{\eta^2}{2u} - \frac{2\eta - 4\eta^3}{8u^2} + \dots \right) \cos(u - \Theta_\eta(u)) \underset{u \rightarrow -\infty}{\sim} e^{-\pi\eta} \sin(u - \Theta_\eta(u)); \quad (11a)$$

⁷ We believe there is a mistake in the analysis in section after relation (A18) of [1].

$$G_\eta(u) = e^{\pi\eta} \left(1 + \frac{\eta}{2u} + \frac{5\eta^2 - \eta^4}{8u^2} + \dots \right) \cos(u - \Theta_\eta(u)) - e^{\pi\eta} \left(\frac{\eta^2}{2u} - \frac{2\eta - 4\eta^3}{8u^2} + \dots \right) \sin(u - \Theta_\eta(u)) \underset{u \rightarrow -\infty}{\sim} e^{\pi\eta} \cos(u - \Theta_\eta(u)). \quad (11b)$$

Thus, the asymptotic form of the solution $\varphi(u, \eta)$ is

$$\begin{aligned} \varphi(u, \eta) &\underset{u \rightarrow \infty}{\sim} A \sin(u - \Theta_\eta(u)) + B \cos(u - \Theta_\eta(u)) \\ &= \frac{B - \mathbf{i}A}{2} e^{\mathbf{i}(u - \Theta_\eta(u))} + \frac{B + \mathbf{i}A}{2} e^{\mathbf{i}(\Theta_\eta(u) - u)}; \end{aligned} \quad (12a)$$

$$\begin{aligned} \varphi(u, \eta) &\underset{u \rightarrow -\infty}{\sim} a e^{\pi\eta} \sin(u + \Theta_\eta(u)) + b e^{-\pi\eta} \cos(u + \Theta_\eta(u)) \\ &= \frac{b e^{-\pi\eta} - \mathbf{i}a e^{\pi\eta}}{2} e^{\mathbf{i}(u + \Theta_\eta(u))} + \frac{b e^{-\pi\eta} + \mathbf{i}a e^{\pi\eta}}{2} e^{-\mathbf{i}(\Theta_\eta(u) + u)}. \end{aligned} \quad (12b)$$

The transfer matrix \mathcal{T} relates the coefficients of the distorted plane waves at $u \rightarrow \infty$ with those at $u \rightarrow -\infty$:

$$\begin{pmatrix} B - \mathbf{i}A \\ B + \mathbf{i}A \end{pmatrix} = \mathcal{T} \begin{pmatrix} b e^{-\pi\eta} - \mathbf{i}a e^{\pi\eta} \\ b e^{-\pi\eta} + \mathbf{i}a e^{\pi\eta} \end{pmatrix}. \quad (13)$$

The solution of the scattering problem is equivalent to the elucidation of the transfer matrix.

2.2. Scattering

2.2.1. Transmission and reflection amplitudes. Alternatively, we define transmission t and reflection r amplitudes in terms of a wave φ_α propagating from $-\infty$ ($\alpha = L$), or from ∞ ($\alpha = R$). Explicitly,

$$\varphi_L(u, \eta) \begin{cases} \underset{u \rightarrow -\infty}{\sim} e^{\mathbf{i}(u + \Theta_\eta(u))} + r_L e^{-\mathbf{i}(u + \Theta_\eta(u))}; \\ \underset{u \rightarrow \infty}{\sim} t_L e^{\mathbf{i}(u - \Theta_\eta(u))}; \end{cases}$$

and

$$\varphi_R(u, \eta) \begin{cases} \underset{u \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\mathbf{i}(u - \Theta_\eta(u))} + r_R e^{\mathbf{i}(u - \Theta_\eta(u))}; \\ \underset{u \rightarrow -\infty}{\sim} t_R e^{-\mathbf{i}(u + \Theta_\eta(u))}. \end{cases}$$

Time reversal invariance implies $t_R = t_L \equiv t$ and reflection symmetry $H(-x) = H(x)$ implies $r_R = r_L \equiv r$ (to demonstrate it properly, one must note that, if $\varphi(u, \eta)$ is a solution, $\varphi(-u, \eta)$ is another solution, *a priori* independent of the first one). Some useful relations expressing A, B, a, b in terms of t, r are given in appendix B.

The corresponding transmission and reflection coefficients are

$$T = |t|^2, \quad R = |r|^2, \quad (14)$$

and fulfil $R + T = 1$ (see equation (B.2a)). For $t \neq 0$, it is instructive to express the ratio of some coefficients a, A in terms of T , once for φ_L , and once for φ_R (see appendix B):

$$\begin{aligned} \frac{a_L e^{\pi\eta}}{A_L} = \epsilon' - 2\mathbf{i}\epsilon \sqrt{\frac{1}{T} - 1} &\Rightarrow \left| \frac{a_L e^{\pi\eta}}{A_L} \right| = \sqrt{\frac{4}{T} - 3} \geq 1; \\ \frac{a_R e^{\pi\eta}}{A_R} = \frac{1}{\epsilon' - 2\mathbf{i}\epsilon \sqrt{\frac{1}{T} - 1}} &\Rightarrow \left| \frac{a_R e^{\pi\eta}}{A_R} \right| = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{T} - 3}} \leq 1; \end{aligned}$$

these inequalities become equalities only for $T = 1$. This proves that the symmetry between the regular and the singular part of a wavefunction φ which occurs at $x = \pm\infty$ is broken at $x = 0$ and that connection relations are not trivial (except for $T = 1$ and also the special case $T = 0$).

2.2.2. *The S matrix.* The S matrix is related [10, 11] to T and R and is written as

$$S = \begin{pmatrix} r & t \\ t & r \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Using the unitarity of the S matrix, it is useful to parametrize its elements in terms of the transmission coefficient T and a couple of two independent numbers $\epsilon, \epsilon' = \pm 1$. First, we get the parametrization of all coefficients A_L, \dots, b_R , which we give in appendix B. Then, we can prove the representation

$$S = \begin{pmatrix} T - 1 + \mathbf{i}\epsilon\epsilon'\sqrt{T - T^2} & \epsilon'T + \mathbf{i}\epsilon\sqrt{T - T^2} \\ \epsilon'T + \mathbf{i}\epsilon\sqrt{T - T^2} & T - 1 + \mathbf{i}\epsilon\epsilon'\sqrt{T - T^2} \end{pmatrix} \quad (16)$$

which is unitary, as required. We stress that this representation is not universal⁸, namely, it is peculiar to the Coulomb scattering problem as discussed here.

We are now in a position to examine the connection problem.

3. The connection problem

The connection problem is to relate A, B to a, b either by finding matrix D in equation (8), or, equivalently, transfer matrix \mathcal{T} in equation (13), or, equivalently, the S matrix in equation (15). Since $\frac{\partial\varphi}{\partial u}$ diverges as $u \rightarrow 0$, it is not legitimate to use the continuity of φ and $\frac{\partial\varphi}{\partial u}$ at $u = 0$. Thus, the issue of the connection problem cannot be handled in solving linear equations of the wavefunction, and one must address bilinear relations, related either to conservation laws or to certain constraints. In the following analysis, the behaviors of $f_\eta(u), g_\eta(u)$ and of their derivatives, for $u \sim 0$, are required: they are studied in appendix C.

3.1. Conservation laws and other constraints

3.1.1. *Continuity of ρ_η .* The simplest physical relation that provides a connection at $x = 0$ is the continuity of the density of probability $\rho_\eta(u) = |\varphi(u, \eta)|^2$. With relations (C.1a) and (C.1b), one obtains

$$|B|^2 e^{\pi\eta} = |b|^2 e^{-\pi\eta} \iff \left| \frac{B}{b} \right| = e^{-\pi\eta}. \quad (17a)$$

In appendix B, we show that this relation actually simplifies as

$$B = \epsilon' e^{-\pi\eta} b, \quad (17b)$$

where $\epsilon' = \pm 1$ (note that the case $\epsilon' = -1$ implies a violation of the continuity of ψ).

3.1.2. *Current conservation.* The conservation of current $j(x) = -\text{Re}(\mathbf{i}\overline{\psi(x)} \frac{d\psi}{dx}(x))$ is equivalent to the unitarity of the S matrix which is already verified. Therefore, it does not help for the resolution of the connection problem.

⁸ The representation of (15) (matrix S), (19) (orthogonality constraints) and (21) (Hermiticity constraints) in terms of coefficients $T(\eta)$ is peculiar for the Coulomb problem discussed here, and is not valid for any one-dimensional scattering problem.

3.1.3. *Orthonormality of scattering states.* Since the complete set of scattering wavefunctions is known, it is in principle possible to examine the consequence of generalized orthogonality relations. Let us write $\psi(x, E, \alpha) = \varphi_\alpha(kx, \frac{\lambda}{2k})$ with $\alpha = R, L$ (wavefunctions coming from $+\infty$ or $-\infty$ have degenerate energies),

$$\int dx \overline{\psi(x, E_1, \alpha_1)} \psi(x, E_2, \alpha_2) = \delta(k_1 - k_2) P_{\alpha_1 \alpha_2}, \quad (18)$$

where P is an unitary 2×2 matrix in the (R, L) space.

In appendix D, using relations (B.5a), (B.5b), (B.5c), (B.5d), (B.5e), (B.5f), (B.5g), (B.5h), (12a) and (12b), we calculate⁹

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \int_{-L}^L \overline{\psi(x, E_1, \alpha_1)} \psi(x, E_2, \alpha_2) dx &= \left[\left(1 + \frac{\sqrt{R(\eta_2)T(\eta_1)} - \sqrt{R(\eta_1)T(\eta_2)}}{2} \mathcal{Z} \epsilon \epsilon' (1 + \mathbf{i}) \right) \right. \\ &\times \delta(k_1 - k_2) + \left(-\frac{R(\eta_1) + R(\eta_2)}{2} + \epsilon \epsilon' \frac{\sqrt{R(\eta_1)T(\eta_1)} + \sqrt{R(\eta_2)T(\eta_2)}}{2} \right. \\ &\left. \left. + \mathbf{i} \left(\frac{T(\eta_1) - T(\eta_2)}{2} - \epsilon \epsilon' \frac{\sqrt{R(\eta_1)T(\eta_1)} - \sqrt{R(\eta_2)T(\eta_2)}}{2} \right) \right) \delta(k_1 + k_2) + c \right] \delta_{\alpha_1 \alpha_2}, \end{aligned} \quad (19)$$

where c is a constant and \mathcal{Z} is a complex number given by

$$\mathcal{Z} = \sqrt{R(\eta_1)R(\eta_2)} + \sqrt{T(\eta_1)T(\eta_2)} + \mathbf{i} \epsilon \epsilon' (\sqrt{R(\eta_2)T(\eta_1)} - \sqrt{T(\eta_2)R(\eta_1)}). \quad (20)$$

Since $k_1, k_2 > 0$ here, we can drop $\delta(k_1 + k_2)$ in equation (19), which is irrelevant¹⁰. The established result in equation (19) that $P = I_2$ reflects the orthogonality of left and right moving states. Scattering states can be orthonormalized in the extended sense if and only if $(\sqrt{R(\eta_2)T(\eta_1)} - \sqrt{R(\eta_1)T(\eta_2)})\mathcal{Z} = 0$. This yields $T(\eta_1) = T(\eta_2)$ or $T(\eta_i) \in \{0, 1\}$. The second condition is actually a particular case of the first one, since otherwise, one could find some energy E such that $T(\eta^+) = 1 - T(\eta^-)$, which induces a non-physical discontinuity; however, this argument will not be needed in the following. Having T independent of E is already a very strong result (see footnote 8). Yet, in order to completely elucidate the connection problem, we will now address another constraint.

3.1.4. *Hermiticity of the Hamiltonian.* A successful issue for the connection problem is given by analyzing the Hermiticity of the Hamiltonian H . For $E_1 \neq E_2$, we consider two wavefunctions $\psi_1: x \mapsto \psi(x, E_1)$ and $\psi_2: x \mapsto \psi(x, E_2)$ (degeneracy is not relevant here, and R, L indices can be omitted). Since H is the Hermitian, the Hermitian product of $|\psi_1\rangle$ with $H|\psi_2\rangle$ must be conjugate with the Hermitian product of $|\psi_2\rangle$ with $H|\psi_1\rangle$. Explicitly,

$$\begin{aligned} \int dx \overline{\psi(x, E_1)} \left[-\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, E_2) + \frac{\lambda}{|x|} \psi(x, E_2) \right] \\ = \int dx \left[-\frac{\partial^2 \overline{\psi}}{\partial x^2}(x, E_1) + \frac{\lambda}{|x|} \overline{\psi}(x, E_1) \right] \psi(x, E_2) \\ \iff \int dx \overline{\psi(x, E_1)} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, E_2) - \frac{\partial^2 \overline{\psi}}{\partial x^2}(x, E_1) \psi(x, E_2) = 0, \end{aligned}$$

⁹ The essential Coulomb properties are implicitly contained in these relations.

¹⁰ More precisely, $\delta(k_1 + k_2)$ only contribute to $\psi(x, 0)$, which is not an important matter here. It is however interesting to note that the complete weight of this state, within $T = 0$, is found to be zero, which is exact.

so that

$$\left[-\overline{\psi(x, E_1)} \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, E_2) + \frac{\partial \overline{\psi}}{\partial x}(x, E_1) \psi(x, E_2) \right]_{-\infty}^{\infty} = 0. \quad (21)$$

In equation (21), we calculate the Cauchy principal value of the left term, which is written, in terms of dimensionless variables and function φ , as

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\lambda}{2} \left[-\frac{\overline{\varphi(u, \eta_1)}}{\eta_2} \frac{\partial \varphi}{\partial u}(u, \eta_2) + \frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial u}(u, \eta_1) \frac{\varphi(u, \eta_2)}{\eta_1} \right]_{-L}^L. \quad (22a)$$

Since $-\overline{\varphi(u, \eta_1)} \frac{\partial \varphi}{\partial u}(u, \eta_2) + \frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial u}(u, \eta_1) \varphi(u, \eta_2)$ is divergent at $u = 0$, one must use regularized integral around zero. Hence one should add the Cauchy principal value:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\lambda}{2} \left[\frac{\overline{\varphi(u, \eta_1)}}{\eta_2} \frac{\partial \varphi}{\partial u}(u, \eta_2) - \frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial u}(u, \eta_1) \frac{\varphi(u, \eta_2)}{\eta_1} \right]_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \quad (22b)$$

and equation (21) is written as (22a) + (22b) = 0. The contribution (22a) is found to vanish when $L \rightarrow \infty$ (detailed calculations, using relations (12a), (B.5e), (B.5f), (B.5g), (B.5h), are given in appendix E) so the net expression of equation (21) is determined by (22b) which yields

$$0 = \mathcal{Z} \left\{ \varepsilon \varepsilon' \left(\frac{C_{\eta_1}}{\eta_1 C_{\eta_2}} \sqrt{R(\eta_1)T(\eta_2)} - \frac{C_{\eta_2}}{\eta_2 C_{\eta_1}} \sqrt{T(\eta_1)R(\eta_2)} \right) + \frac{2}{C_{\eta_1} C_{\eta_2}} \operatorname{Re}(\Gamma(1+i\eta_2) - \Gamma(1+i\eta_1)) \sqrt{T(\eta_1)T(\eta_2)} \right\}.$$

Employing relations (B.5a), (B.5b), (B.5c), (B.5d), we get the very same equation. Note that $h_1(\eta_1, \eta_2) \equiv \frac{C_{\eta_1}}{C_{\eta_2}}$, $h_2(\eta_1, \eta_2) \equiv \frac{C_{\eta_2}}{C_{\eta_1}}$ and $h_3(\eta_1, \eta_2) \equiv \frac{1}{C_{\eta_1} C_{\eta_2}}$ are independent two-variable functions. Indeed, let us assume a linear combination

$$\gamma_1 h_1 + \gamma_2 h_2 + \gamma_3 h_3 = 0. \quad (23)$$

Since $\sqrt{\frac{x}{\sinh(x)}}$ and $\sqrt{\frac{\sinh(x)}{x}}$ are one-variable independent functions, if one keeps η_2 constant and considers equation (23) as an equation of variable η_1 , one gets $\gamma_1 = 0$; if one keeps η_1 constant and considers equation (23) as an equation of variable η_2 , one gets $\gamma_2 = 0$; thus, $\gamma_3 = 0$ and the independence of the three functions is proved. Now \mathcal{Z} , defined in (20), can never vanish. Hence one obtains

$$R(\eta_1)T(\eta_2) = 0; \quad T(\eta_1)R(\eta_2) = 0; \quad T(\eta_1)T(\eta_2) = 0.$$

The first two equations imply $T = 0, 1$, and the last one simply implies $T = 0$. This eventually proves (see footnote 8) that, indeed, $T(\eta) = 0$.

3.2. Regularization by truncation of the potential

Here we propose another approach, which gives the same result: the divergences are regularized by a truncation of the potential.

3.2.1. Truncated half-potential. In order to avoid the use of Coulomb wavefunctions for negative argument we calculate transmission and reflection amplitudes for a right half-barrier, defined for $x > 0$, and then use reflection symmetry to calculate them for a mirror symmetric

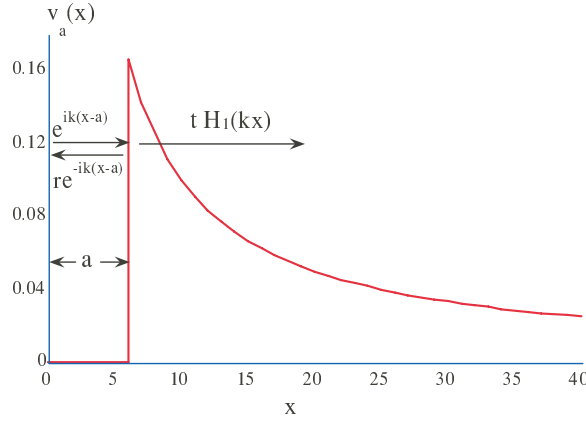


Figure 2. Right-half-truncated potential (24) and wavefunction in the two regions following equation (26).

barrier, defined for $x < 0$. Then left and right barriers are combined using a composition formula for the S matrix, as suggested for instance in [12].

The truncated right half-potential is, see figure 2,

$$V_\varepsilon(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x \leq \varepsilon; \\ \frac{\lambda}{x} & \text{for } x > \varepsilon, \end{cases} \quad (24)$$

and the Schrödinger equation with $V_\varepsilon(x)$ alone is written as $-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_\varepsilon(x)\psi(x) = k^2\psi(x)$.

In order to avoid the $1/|x|$ singularity, the potential is assumed to be zero for $0 < x < \varepsilon$, but we have also performed our calculations with $V_\varepsilon(x < \varepsilon) = \frac{\lambda}{\varepsilon}$, with no significant changes. The cutoff parameter $\varepsilon > 0$ is assumed small, and eventually the limit $\varepsilon \rightarrow 0$ is taken on the sum of left and right barriers, which corresponds to the complete Coulomb potential, since

$$\frac{2m}{\hbar^2} V(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} V_\varepsilon(x) + V_\varepsilon(-x). \quad (25)$$

To calculate transmission and reflection amplitudes for the right barrier consider a plane wave approaching the potential V_ε from $-\infty$. It is partially reflected by the barrier at $x = \varepsilon$, and the transmitted wave is a Coulomb wave tH_η , with $H_\eta(u) = F_\eta(u) + \mathbf{i}G_\eta(u)$. Its asymptotic behavior is

$$H_\eta(u) \underset{u \rightarrow \infty}{\sim} e^{\mathbf{i}(u - \Theta_\eta(u))}.$$

The scattering boundary conditions for the wave function are (see figure 2)

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{\mathbf{i}k(x-\varepsilon)} + r e^{-\mathbf{i}k(x-\varepsilon)} & \text{for } x \leq \varepsilon, \\ tH_\eta(kx) & \text{for } x > \varepsilon. \end{cases} \quad (26)$$

We want to calculate reflection and transmission amplitudes r and t for this right-half truncated Coulomb barrier $V_\varepsilon(x)$. Matching at $x = \varepsilon$ yields

$$1 + r = tH_\eta(k\varepsilon), \quad 1 - r = -\mathbf{i}t\dot{H}_\eta(k\varepsilon),$$

where \dot{H} stands for dH/du , and thus

$$t = \frac{2}{H_\eta(k\varepsilon) - \mathbf{i}\dot{H}_\eta(k\varepsilon)}; \quad r = \frac{H_\eta(k\varepsilon) + \mathbf{i}\dot{H}_\eta(k\varepsilon)}{H_\eta(k\varepsilon) - \mathbf{i}\dot{H}_\eta(k\varepsilon)}. \quad (27)$$

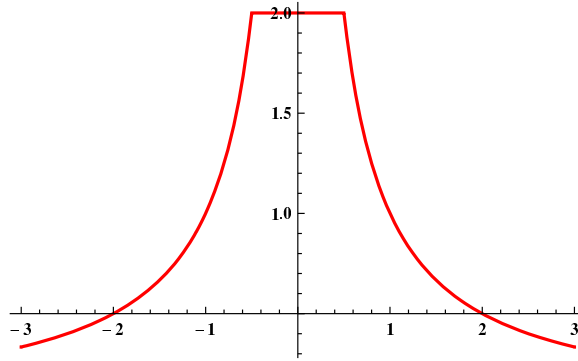


Figure 3. Truncated potential for $\eta = 1$, $\lambda = 1$ and $\varepsilon = 1$.

In the limit $\varepsilon \rightarrow 0$, this implies

$$t \rightarrow 0, \quad r \rightarrow -1.$$

However, the limit $\varepsilon \rightarrow 0$ will not be taken here, but rather, at a later step.

So far, we have considered transmission and reflection from the potential $V_\varepsilon(x)$ where the incoming wave approaches the barrier from the left region. If the wave were to have come from the right, been partially transmitted to the left and partially reflected back to the right, the transmission amplitude would be the same, but the reflection would have a different phase. However, when we combine the symmetric image of $V_\varepsilon(x)$ in order to account for the Coulomb problem as asserted in equation (25), we employ the reflection amplitude r , as a result of the analysis developed in [12]. This procedure of combining the two barriers should be used *before* the limit $\varepsilon \rightarrow 0$ is taken on equations (27). The transmission amplitude through the combined barrier $V_\varepsilon(x) + V_\varepsilon(-x)$ is

$$T_\varepsilon = \frac{t^2}{1 - e^{2i k \varepsilon} r^2} = \frac{4}{(1 - e^{2i k \varepsilon})[H_\eta(k\varepsilon)^2 - \dot{H}_\eta(k\varepsilon)^2] - 2i(1 + e^{2i k \varepsilon})H_\eta(k\varepsilon)\dot{H}_\eta(k\varepsilon)}. \quad (28)$$

This formula is exact and expresses the transmission amplitude for a symmetric combination of cutoff Coulomb barriers with a hole between $-\varepsilon$ and ε . It uses Coulomb wavefunctions solely with positive argument. Inspecting the two terms of the denominator in equation (28), the first term is found to vanish in the limit $\varepsilon \rightarrow 0$, and hence

$$T_\varepsilon \approx \frac{i}{H_\eta(k\varepsilon)\dot{H}_\eta(k\varepsilon)} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0.$$

The upshot is that transmission coefficient of combined left and right barriers, which comprise the Coulomb barrier as $\varepsilon \rightarrow 0$, vanishes, that is $T = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} T_\varepsilon = 0$.

3.2.2. *A second form of the truncated potential.* We also considered a truncated potential V_ε , represented in figure 3 and defined as follows: $\varepsilon > 0$ and $\forall |x| \leq \varepsilon, V_\varepsilon(x) = \frac{\lambda}{\varepsilon}, \forall |x| > \varepsilon, V_\varepsilon(x) = \frac{\lambda}{|x|}$.

The transmission T_ε can again be exactly calculated (the wavefunction ψ corresponding to given (E, ε) and its derivative ψ' are continuous; we use first-order Taylor expansion for the Coulomb wavefunctions at connection points $x = \pm\varepsilon$).

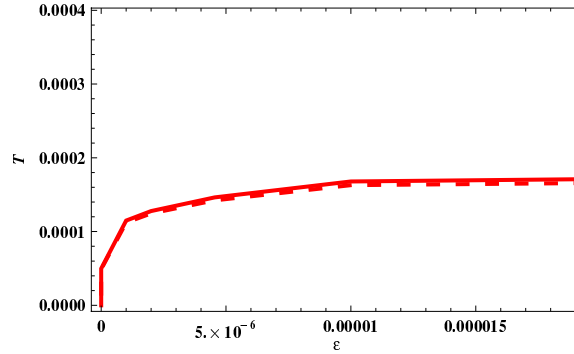


Figure 4. Transmission T_ε versus ε in the repulsive (plain line) or attractive (dashed line) case.

One finds in figure 4 the curves of T_ε versus ε , for repulsive or attractive cases.

We see that the transmission $T_\varepsilon \rightarrow 0$ as $\varepsilon \rightarrow 0$. This confirms our analytical result. We must clarify that for some points of these figures, we used about 1000 digit precision calculation, provided by a formal calculation with integers.

4. The discrete spectrum: bound states

We come now to the case of an attractive potential, and look for bound states of negative energies. As is shown below, analytical expressions can be obtained for the energies as well as for the wavefunctions¹¹.

4.1. Analytical solutions

For $e < 0$, equation (4) is modified so that its right term is written as $-\varphi(u)$ instead of $\varphi(u)$. Note that $u = kx$ holds but now $k = \sqrt{-e}$, since, for an attractive potential, $\eta < 0$. We will again consider separately $u > 0$ and $u < 0$, and hence get the corresponding two equations:

$$-\frac{d^2\varphi}{du^2}(u) + 2\frac{\eta}{u}\varphi(u) = -\varphi(u) \quad \text{for } u > 0; \quad (29a)$$

$$-\frac{d^2\varphi}{du^2}(u) - 2\frac{\eta}{u}\varphi(u) = -\varphi(u) \quad \text{for } u < 0. \quad (29b)$$

In order to solve equation (29a), we need to generalize equations (14.1.6), (14.1.14), (14.1.18), (14.1.19) and (14.1.20) of [9] (for $L = 0$). This is carried out in appendix G. Generalization of (14.1.3) in [9] is given below; relations (14.1.4), (14.1.5), (14.1.15), (14.1.17) remain valid by construction. Incidentally, the results of appendix G can be regarded as a hyperbolic version of the original relations in [9], since the solutions of equation (29a) now read:

$$J_\eta(u) \equiv u e^{-u} M(1 + \eta, 2, 2u), \quad K_\eta(u) \equiv 2u e^{-u} U(1 + \eta, 2, 2u).$$

¹¹ Mineev claims that it had already been solved many times, but gives no references, except [3], which does not give many details.

In analogy with the case of free states, the functions $J_{-\eta}$ and $K_{-\eta}$ are solutions of (29b) (the connection problem at $u = 0$ will be elucidated later on). A useful identity, which will be needed, is

$$J_{-\eta}(u) = -J_{\eta}(-u). \tag{30}$$

4.2. Quantization

For an arbitrary value of η , the solutions $J_{\eta}(u)$ and $K_{\eta}(u)$ of equation (29a) diverge as $u \rightarrow \infty$ and the solutions $J_{-\eta}(u)$ and $K_{-\eta}(u)$ of equation (29b) diverge as $u \rightarrow -\infty$. This is true for almost all values of η , which therefore should be discarded as non-physical, except for a set of quantized values η_n (equivalently e_n or E_n) such that $J_{\eta}(u > 0)$ and $J_{-\eta}(u < 0)$ are both square integrable, and for another set of values $\tilde{\eta}_n$ (equivalently \tilde{e}_n or \tilde{E}_n) such that $K_{\eta}(u > 0)$ and $K_{-\eta}(u < 0)$ are both square integrable. The complete spectrum, which is described below, is composed of the union of set $\{E_n\}$, which is exactly Rydberg's spectrum, and set $\{\tilde{E}_n\}$, the existence of which is indeed a surprise.

4.2.1. *The regular solutions.* Following the analysis of the hydrogen-like atoms, it is verified that regular solutions $J_{\eta}(u)$ and $J_{-\eta}(u)$ decay exponentially as $u \rightarrow \pm\infty$ only for a discrete set $\{\eta_n, \forall n \in \mathbb{N}^*\}$ given by

$$\eta = \eta_n \equiv -n \iff E = E_n \equiv -\frac{(qq')^2 m}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}. \tag{31}$$

The corresponding energies E_n form the Rydberg spectrum of hydrogen-like atoms. In particular, the lowest energy is $E_1 = -\frac{(qq')^2 m}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = -ZZ'E_I$, where E_I is the Rydberg energy.

The question whether the set η_n defined above can be used also for the singular solutions is answered negatively, although the demonstration is not immediate. While $K_{-\eta_n}(u)$ diverges as $u \rightarrow -\infty$, $K_{\eta_n}(u)$ does not diverge as $u \rightarrow \infty$. Therefore, one may consider a mixed solution $AJ_{\eta_n} + BK_{\eta_n}$ for $u > 0$ and $aJ_{-\eta_n}$ for $u < 0$. However, as we shall see immediately below, $J_{\eta_n}(0) = J_{-\eta_n}(0) = 0$, while $K_{-\eta_n}(0^+) = 1/C_{-\eta_n}$. Hence the continuity of the density ρ at $x = 0$ implies here $|B| = 0$, which proves that a combination of regular and singular solutions is not an eigenstate.

So far we have asserted the exponential decay of $J_{\pm\eta_n}$ as $u \rightarrow \pm\infty$. The complete regular solutions $\forall n \in \mathbb{N}^*$ can be constructed as $\zeta_n(u) = J_{\eta_n}(u) \forall u > 0$ and $\zeta_n(u) = -\mu J_{\eta_n}(-u) \forall u < 0$, with $\mu \in \mathbb{C}$, (due to equation (30) and the reflection symmetry between equations (29a) and (29b)). Explicitly (cf equation (13.6.9) of [9]),

$$\zeta_n(u) = -\frac{u}{n} e^{-|u|} L'_n(2|u|) \begin{cases} 1 & \text{for } u > 0, \\ \mu & \text{for } u < 0, \end{cases} \tag{32}$$

where $L_n(z)$ is the Laguerre polynomial of order n , and $L'_n(z) = \frac{dL_n(z)}{dz}$. It will be shown below that $\mu = \pm 1$.

The orthogonality and normalization of the corresponding wavefunctions $\psi(x, E_n) = \zeta_n(\frac{\lambda x}{2\eta_n}) = \zeta_n(\frac{\lambda|x|}{2n})$ can be inspected by carrying out integration on the positive semi-axis \mathbb{R}_+ . Thus, for the normalization we have

$$\int_0^\infty dx |\psi(x, E_n)|^2 = \int_0^\infty dx |\zeta_n(kx)|^2 = \frac{1}{k} \int_0^\infty du |\zeta_n(u)|^2 = \frac{2n}{|\lambda|} \frac{n}{4} = \frac{n^2}{2|\lambda|};$$

which, with $|\mu| = 1$, requires a normalization factor equal to $\frac{\sqrt{|\lambda|}}{n}$; while for the orthogonality we find

$$\int_0^\infty dx \overline{\psi(x, E_n)} \psi(x, E_{n'}) = \int_0^\infty dx \zeta_n \left(\frac{|\lambda|x}{2n} \right) \overline{\zeta_{n'} \left(\frac{|\lambda|x}{2n'} \right)} = 0 \quad \forall n \neq n',$$

due to orthogonality relations between Laguerre polynomials.

4.2.2. *Anomalous solutions.* Quite remarkably, the anomalous solutions $K_\eta(u)$ and $K_{-\eta}(u)$ both decay exponentially as $u \rightarrow \pm\infty$ only for a discrete set $\{\tilde{\eta}_n, \forall n \in \mathbb{N}\}$ given by

$$\eta = \tilde{\eta}_n = -n - \frac{1}{2} \iff E = \tilde{E}_n \equiv E_{n+\frac{1}{2}} = -\frac{(qq')^2 m}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 (n + \frac{1}{2})^2}, \tag{33}$$

where E_n is that of equation (31). The corresponding energies \tilde{E}_n form a separate spectrum interlacing the Rydberg one. From equation (33), one notes that $\tilde{E}_n = \frac{p^2}{(n+\frac{1}{2})^2} E_p, \forall p \in \mathbb{N}^*$, so that the minimum \tilde{E}_0 is lower than E_1 by a factor of 4.

Note that, for $\eta \neq \tilde{\eta}_n, K_{-\eta}(u)$ diverges exponentially for $u \rightarrow -\infty$, while $K_\eta(u)$ does not diverge for $u \rightarrow \infty$. Therefore, one should examine the possibility of a continuous spectrum, by constructing a solution $AK_\eta(u)$ for $u > 0$ and zero for $u < 0$ for any such $\eta \neq \tilde{\eta}_n$; however, one can calculate $K_\eta(0^+) = 1/C_\eta \neq 0$ for all $\eta < 0$, so the continuity of the density ρ at $x = 0$ implies $A = 0$. This possibility is eventually discarded.

So far we have asserted the exponential decay of $K_{\pm\tilde{\eta}_n}$ as $u \rightarrow \pm\infty$. In order to construct the complete anomalous solutions, one needs to examine first the properties of $K_{-\tilde{\eta}_n}(u)$ for $u < 0$ and $n \in \mathbb{N}$. The imaginary part is written as

$$\Im(K_{-\tilde{\eta}_n}(u)) = \frac{\sqrt{\pi}}{\gamma_n} J_{\tilde{\eta}_n}(u) \quad \text{with} \quad \gamma_n = (2n - 1)!!/2^{n+1};$$

while, for the real part, there is a relation analogous to (30):

$$K_{\tilde{\eta}_n}(-u) - \mathbf{i} \frac{\sqrt{\pi}}{\gamma_n} J_{\tilde{\eta}_n}(-u) = \nu_n K_{-\tilde{\eta}_n}(u) \quad \forall u > 0, \tag{34}$$

where $\nu_n = 2^{2n+1}/((2n+1)(2n-1)!!)^2$: $K_{\tilde{\eta}_n}$ has even parity (whereas $J_{\tilde{\eta}_n}$ has odd parity) if one omits the rescaling factor ν_n .

The complete anomalous solutions $\forall n \in \mathbb{N}$ can then be defined as $\xi_n(u) = K_{\tilde{\eta}_n}(u)$ for $u > 0$ and $\xi_n(u) = \nu K_{\tilde{\eta}_n}(-u)$ for $u < 0$, due to equation (34) and the reflection symmetry between equations (29a) and (29b). It is not necessary to include the factor ν_n here, since it is accounted for by the coefficient ν . The latter will be shown below to be $\nu = \pm 1$. In appendix H, we prove that the anomalous solutions are explicitly given by

$$\xi_n(u) = (p_n(|u|)\mathbf{K}_0(|u|) + q_n(|u|)\mathbf{K}_1(|u|)) \frac{|u|}{(-2)^n \sqrt{\pi}} \times \begin{cases} 1 & \text{for } u > 0, \\ \nu & \text{for } u < 0, \end{cases} \tag{35}$$

where polynomials $p_n(x)$ and $q_n(x)$ follow recurrence equations (H.3a) and (H.3b), and \mathbf{K}_n are the Bessel functions of the second kind. For instance, $p_0 = q_0 = 1, p_1(x) = 3 - 4x, q_1(x) = 1 - 4x, p_2(x) = 4x(4x - 9) + 15$ and $q_2(x) = 4x(4x - 7) + 3$ (more generally, these polynomials are proved to be real with integer coefficients in appendix H).

As for determining the constant ν , contrary to the regular case, $\xi_n(0) \neq 0$. Hence, from the continuity of the density ρ , we deduce that

$$|\xi_n(0^-)| = |\xi_n(0^+)|$$

in analogy with equation (17a). This implies $\nu = \pm 1$ (we study real solutions). Thus, the anomalous solution ξ_n is even for $\nu = 1$ and odd for $\nu = -1$.

Similarly to the case of regular solutions, the orthogonality and normalization of the corresponding wavefunctions $\psi(x, \tilde{E}_n) = \xi_n\left(\frac{\lambda x}{2\tilde{\eta}_n}\right) = \xi_n\left(\frac{|\lambda|x}{2n+1}\right)$ can be inspected by carrying out integration on the positive semi-axis \mathbb{R}_+ . Thus, for the normalization we have

$$\int_0^\infty dx |\psi(x, \tilde{E}_n)|^2 = \int_0^\infty dx |\xi_n(kx)|^2 = \frac{1}{k} \int_0^\infty du |\xi_n(u)|^2 = \frac{1}{|\lambda|} \left(\frac{(2n+1)\beta_n}{2^{2n+2}\pi} + \frac{\nu_n\pi}{2^{n+3}} \right).$$

The first coefficients β_n can easily be computed, $\beta_0 = 3, \beta_1 = 41, \beta_2 = 1063$. For large n , $\beta_n \sim 5(2n+1)!!$. Since we proved $\nu = \pm 1$, one can deduce the exact normalization factor.

Strikingly, the anomalous solutions are not orthogonal to each other. As a counter example, consider three Hermitian products between anomalous states ξ_n and ξ_p with $(n, p) = (0, 1), (0, 2)$ and $(1, 2)$, on the semi-axis \mathbb{R}_+ :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx \overline{\psi(x, \tilde{E}_0)} \psi(x, \tilde{E}_1) &= \int_0^\infty dx \overline{\xi_0\left(\frac{|\lambda|x}{3}\right)} \xi_1\left(\frac{|\lambda|x}{3}\right) \\ &= \frac{2}{|\lambda|} \left(\frac{3}{8\pi} - \frac{9(E(-8) - 3E\left(\frac{8}{9}\right) - 3K(-8) + K\left(\frac{8}{9}\right)) + 3 \ln(729)}{64} \right) \\ &\simeq \frac{2}{|\lambda|} 0.0210133 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx \overline{\psi(x, \tilde{E}_0)} \psi(x, \tilde{E}_2) &= \int_0^\infty dx \overline{\xi_0\left(\frac{|\lambda|x}{5}\right)} \xi_2\left(\frac{|\lambda|x}{5}\right) \\ &= \frac{2}{|\lambda|} \left(-\frac{35}{48\pi} + \frac{175(E(-24) - 5E\left(\frac{24}{25}\right) - 4K(-24) + \frac{4}{5}K\left(\frac{24}{25}\right)) + 27 \ln(5)}{1728} \right) \\ &\simeq -\frac{2}{|\lambda|} 0.0319898 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx \overline{\psi(x, \tilde{E}_1)} \psi(x, \tilde{E}_2) &= \int_0^\infty dx \overline{\xi_1\left(\frac{|\lambda|x}{3}\right)} \xi_2\left(\frac{|\lambda|x}{5}\right) \\ &= \frac{2}{|\lambda|} \left(\frac{45}{32\pi} - \frac{45(2705(3E\left(-\frac{16}{9}\right) - 5E\left(\frac{16}{25}\right)) - 2877(5K\left(-\frac{16}{9}\right) - 3K\left(\frac{16}{25}\right)) + 15 \ln(729))}{256} \right) \\ &\simeq \frac{2}{|\lambda|} 0.0188906, \end{aligned}$$

where K is the complete elliptic integral of the first kind and E is the complete elliptic integral of the second kind. It might be argued that these integrals were calculated on the semi-axis \mathbb{R}_+ , while the Hermitian product should be calculated on \mathbb{R} and might vanish by symmetry cancellation (in the case of odd parity, integrals on \mathbb{R}_+ and on \mathbb{R}_- have opposite sign). However, since we have already proved that all anomalous wave functions are either even or odd, then out of the three states (ξ_0, ξ_1, ξ_2) , two have necessarily the same parity; thus, the corresponding scalar product is nonzero, and these solutions are not orthogonal to each other.

This is a surprising result that requires more insight into the properties of wavefunctions in quantum mechanics, which we will discuss briefly afterward.

4.2.3. *Orthogonality between regular and anomalous solutions.* Regular and anomalous solutions have different energies so they are expected to be mutually orthogonal as well (see also the discussion below).

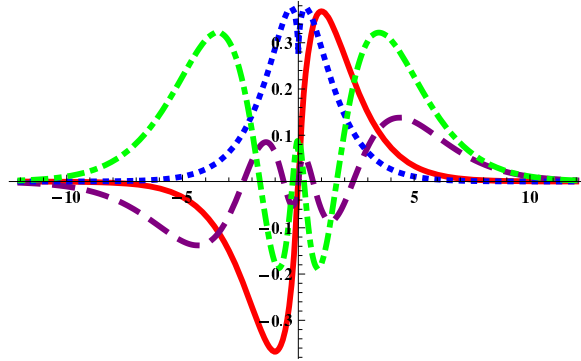


Figure 5. ζ_1 (red, full line), ζ_3 (purple, dashed line), ξ_0 (blue, dotted line) and ξ_2 (green, dot-dashed line).

Performing the Hermitian product on the semi-axis \mathbb{R}_+ of $\psi(x, E_n) = \zeta_n\left(\frac{|\lambda|x}{2n}\right)$ with $\psi(x, \tilde{E}_p) = \xi_p\left(\frac{|\lambda|x}{2p+1}\right)$ yields a nonzero result. For instance,

$$\int_0^\infty dx \overline{\psi(x, \tilde{E}_0)} \psi(x, E_1) = \int_0^\infty dx \overline{\xi_0(|\lambda|x)} \zeta_1\left(\frac{|\lambda|x}{2}\right) = \frac{2}{3\sqrt{\pi}|\lambda|};$$

similar expressions can be obtained for all $n \in \mathbb{N}^*$ and $p \in \mathbb{N}$, they can all be written as $r/(q\sqrt{\pi}|\lambda|)$, with integers r and q depending on p and n . Thus, orthogonality between regular and anomalous wavefunctions can be assured only by *symmetry cancellation* of the right part of the Hermitian product (on \mathbb{R}_+) with its left part (on \mathbb{R}_-).

This leads to the following constraints: first, like the anomalous solutions, all regular solutions must have a definite parity. This is satisfied for $\mu = \pm 1$. Second, all regular solutions must have the same parity, and all anomalous solutions must have the other parity. This means $\mu = \nu$ is fixed. There remains a global choice of sign; either one chooses all regular solutions to be odd and all anomalous solutions to be even or vice versa.

While we have no rigorous argument for either case, one notes that the choice $\mu = \nu = 1$ implies that ζ_n, ζ'_n and ξ_n are continuous. This seems to us the natural choice. Consequently, regular solutions ζ_n are odd and anomalous solutions ξ_n are even. The first few solutions are shown in figure 5. With this choice, all solutions are continuous at $u = 0$, whereas the first and second derivative of ξ_n are infinite at $u = 0$ (this point is actually a ramification point).

5. Discussion

Despite its apparent simplicity, this one-dimensional problem leads to many interesting results, some of them are unexpected. Concerning anomalous bound states, it requires further insight into the interpretation of quantum mechanics, as will be briefly discussed below.

5.1. Zero transmission through the barrier

The fact that $T = 0$ for a repulsive infinite potential is in agreement with classical mechanics. In contrast, for an attractive potential, it contradicts classical mechanics. An example of

pure reflection, which is called quantum reflection, is provided by the infinite square well potential:

$$V(x) = V_0 \times \begin{cases} 1 & \text{for } |x| \leq a, \\ 0 & \text{for } |x| > a, \end{cases} \quad V_0 \rightarrow -\infty,$$

where $2a$ is the width of the well. The Coulomb potential provides us with a new example of pure reflection. It differs from the infinite square well case by the width, which becomes narrower as one goes down in energy, and by the divergence of $\int V(x)dx$, which is logarithmic, while it is faster for the square well potential. Note that both the Coulomb potential and the infinite square well have an infinite number of bound states at negative energy. However, while the spectrum of the former is bounded from below, the spectrum of the latter is not. This is the only example of zero transmission and bounded spectrum that we know of.

As a consequence of $T = 0$, singular unbound wavefunctions are eventually discarded, but the demonstration is much more involved than in the three-dimensional case of equation (2). If one looks back to relations (B.5a), (B.5b), (B.5c), (B.5d), (B.5e), (B.5f), (B.5g), (B.5h), one finds that all B and b coefficients cancel: the logarithmic solution is completely suppressed, and therefore, the probability density is strictly zero at $x = 0$. In the case of ψ_L , it is zero for $x \geq 0$; in the case of ψ_R , it is zero for $x \leq 0$; the reflection process entirely takes place in one half-line. This suppression at $x = 0$ can be physically interpreted as a hard-core repulsion. This interpretation also holds for regular bound states, the probability density of which cancels at $x = 0$. But it is not the case for anomalous bound states, which show, here again, a special behavior.

5.2. New representation of the S matrix

We did not insist on the generality of the representation of all integration constants with only one parameter T . It actually only depends on relations (12a) and (12b) and on the reflection symmetry of the potential. For any symmetrical potential, one can choose a basis of solutions (f, g) such that (12a) holds; however, any generalization of relation (17a) may fix the ratio A/a or B/b so that (12b) will be changed.

With $T = 0$, one simply obtains $S = -I_2$.

5.3. Non-Hermiticity of H

The non-orthogonality between anomalous bound states implies that H is not perfectly Hermitian, because it is well established that the eigenstates of an Hermitian operator are orthogonal. This problem is raised by the same singularity than that, which is calculated in (22b). Indeed, the quantity Δ_{np} defined by

$$\begin{aligned} & \int dx \overline{\xi_n \left(x \frac{2n+1}{|\lambda|} \right)} \left[-\xi_p'' \left(x \frac{2p+1}{|\lambda|} \right) + \frac{|\lambda|}{|x|} \xi_p \left(x \frac{2p+1}{|\lambda|} \right) \right] \\ & - \int dx \left[-\xi_n'' \left(x \frac{2n+1}{|\lambda|} \right) + \frac{|\lambda|}{|x|} \xi_n \left(x \frac{2n+1}{|\lambda|} \right) \right] \xi_p \left(x \frac{2p+1}{|\lambda|} \right) \\ & = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} |\lambda| \left[\overline{\xi_n(u)} \frac{d\xi_p}{du}(u) - \frac{d\overline{\xi_n}(u)}{du} \frac{\xi_p(u)}{2n+1} \right]_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \end{aligned}$$

is not zero, for instance $\Delta_{01} = -\frac{8}{3\pi}$, $\Delta_{02} = \frac{28}{5\pi}$, $\Delta_{03} = -\frac{116}{7\pi}$, $\Delta_{12} = -\frac{4}{5\pi}$, $\Delta_{13} = \frac{23}{7\pi}$, $\Delta_{23} = \frac{27}{14\pi}$, etc.

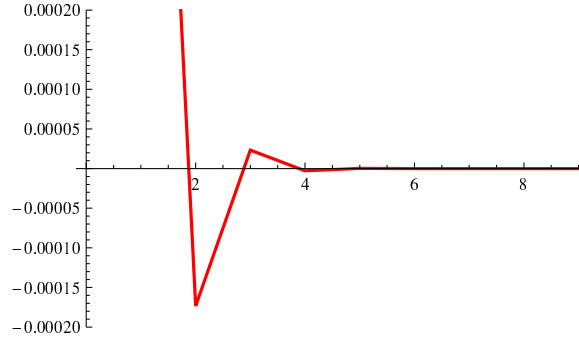


Figure 6. $P_{1,N}^{(N)}$ versus N .

But the situations are quite different. In the case of the unbound spectrum, eigenstates must be strictly orthogonal; otherwise, a quantum of a given energy E , coming from the frontiers of the universe and interacting with the system would not only create particles of the same energy, but also of other energies, so E becomes blurred; but this blurring would spoil into the whole universe, which is impossible. So, we have discarded this possibility (proving therefore $T = 0$) of a break of the Hermiticity of H .

In contrast, a bound state of energy E may relax into a coherent state, thanks to interacting overlaps between non-orthogonal eigenstates. Thus, it may be excited into a free state of different energies, with a certain probability, which we will examine; yet, this mechanism does not contradict any physical law, and is possible.

Moreover, H is still an observable: its spectrum is *real*, and canonical quantization theory is still valid, so a break of Hermiticity restrictedly for $E \in \{\tilde{E}_n, n \in \mathbb{N}\}$ does not yield any contradiction of quantum mechanics, although it exceeds its standard axiomatic formulation.

5.3.1. Coherent bound states. Anomalous bound states are not orthogonal, so they are not stable: the spontaneous transition $\tilde{E}_n \rightarrow \tilde{T}_p$ is allowed, without any interaction term in the Hamiltonian, which contradicts the standard properties of quantum mechanics. Therefore, a state of energy \tilde{E}_n is not stable. However, the transfer probability between two states of energies \tilde{E}_n and \tilde{E}_p is very small and decreases as $|\tilde{E}_n - \tilde{E}_p|$ is increased, so, anomalous states are almost stable, and their actual energy is only slightly blurred. In order to calculate stable states, one simply needs to diagonalize the (infinite) matrix $M = ((\xi_m | \xi_n))_{m,n}$. M is replaced by the truncated matrix $M^{(N)}$, of size $N \times N$ corresponding to $0 \leq m, n \leq N - 1$, and we have diagonalized $M^{(N)}$ instead. By chance, the coefficients of $M^{(N)}$ rapidly converge when N is increased, so we can calculate numerically those of M .

Let $P^{(N)}$ be the corresponding change in the basis matrix. $P^{(N)}$ is indeed close to unity; we show, in figure 6 the rapid decrease of $P_{1,N}^{(N)}$ versus N , in figure 7 the diagonal coefficient $P_{1,1}^{(N)}$ versus N , and in figure 8 the convergence of $P_{1,q}^{(N)}$ versus N , for some values of q (these coefficients are divided by $P_{1,q}^{(q)}$ for convenience). One verifies that the diagonal coefficient deviation from 1 remains very small, and, correspondingly, that other coefficients are of several orders smaller.

The stable states that we have calculated are coherent states. Each coherent state can be labeled by the closest state of energy \tilde{E}_n and will be written as $\tilde{\xi}_n$. When a state of energy \tilde{E}_n is created, it will relax to $\tilde{\xi}_n$. The delay of this relaxation is of the order $\frac{\hbar}{\Delta \tilde{E}_n}$, where $\Delta \tilde{E}_n$ is the uncertainty of \tilde{E}_n due to the instability process and can be explicitly calculated.

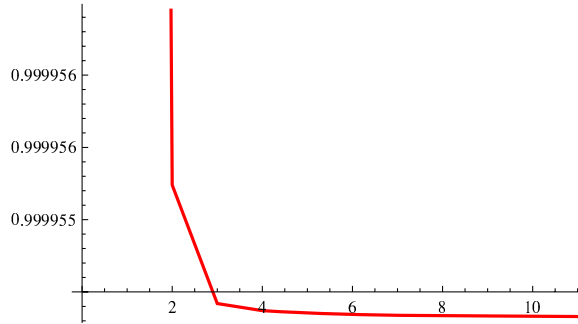


Figure 7. $M_{1,1}^{(N)}$ versus N (it is normalized to 1).

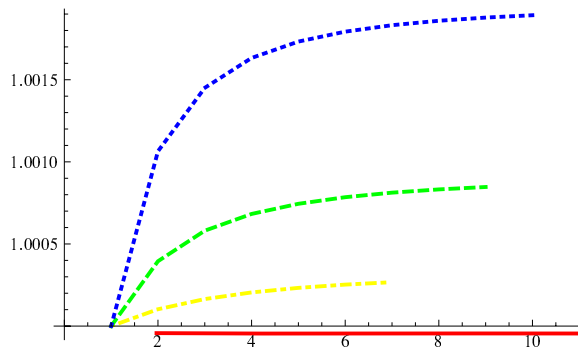


Figure 8. $M_{1,1}^{(N)}$ (red, full line), $M_{1,2}^{(N)}$ (blue, dotted line), $M_{1,3}^{(N)}$ (green, dashed line) and $M_{1,5}^{(N)}$ (yellow, dot-dashed line) versus N (coefficient $P_{1,q}^{(N)}$ is divided by $P_{1,q}^{(q)}$ to show the relative convergence).

On the other hand, consider an excited state of energy $E = -\tilde{E}_p$; even if the state was initially created as ξ_n with $n \neq p$, the probability of exciting state ξ_p , although small, is never zero.

5.3.2. Orthogonality between regular and anomalous states. Finally, we would like to insist on the orthogonality between regular and anomalous states. Otherwise, spontaneous relaxation between regular states, $E_n \rightarrow E_p$, might occur, through channel $E_n \rightarrow \tilde{E}_q \rightarrow E_p$, and the effective overlap between regular states would not be zero.

If one adds, in the Hamiltonian, an interaction term between the regular and anomalous terms, allowing transitions between them, the exact calculation of transfer probability would become more complicated, because of the relaxation process.

Eventually, in a real system, one should take into account the dynamical aspect of the problem, and consider, instead of a coherent state, an intermediate state, which would include the real dynamical relaxation process. Although it may seem complicated, this opens exciting fields of research for the future.

6. Conclusion

Simple quantum mechanics can always bring new and surprising results. Indeed, we have found that the Hermiticity of the Coulomb Hamiltonian may break exclusively for a closed

family of bound states, which we therefore called anomalous states. These states are not stable, and one can only observe, instead, coherent states. We have also found a new case of quantum reflection, by solving the one-dimensional Coulomb problem.

Acknowledgments

We would like to thank J-M Luck and R Balian for invaluable help and suggestions.

Appendix A. Asymptotic behavior of F_η and G_η when $u \rightarrow -\infty$

Here we analyze the asymptotic behavior of $F_\eta(u)$ and $G_\eta(u)$ for $u \rightarrow -\infty$. Our results are different from those in equations (6c) and (6d) in [1], (see footnote 7).

Let us first demonstrate (11a). First note that

$$t e^{\mathbf{i}t} M(1 + \mathbf{i}\eta, 2, -2\mathbf{i}u) = \overline{t e^{-\mathbf{i}t} M(1 - \mathbf{i}\eta, 2, 2\mathbf{i}u)}, \tag{A.1}$$

but, since it is real, one can omit the conjugation. For $u > 0$, writing $u = |u|$ and using (9a), one obtains

$$|u| e^{-\mathbf{i}|u|} M(1 - \mathbf{i}\eta, 2, 2\mathbf{i}|u|) \underset{|u| \rightarrow +\infty}{\sim} e^{\frac{\pi\eta}{2}} \kappa_\eta \sin(|u| - \Theta_\eta(u)).$$

For $u < 0$, writing $u = -|u|$ and using (A.1), one obtains

$$|u| e^{\mathbf{i}|u|} M(1 + \mathbf{i}\eta, 2, -2\mathbf{i}|u|) \underset{|u| \rightarrow +\infty}{\sim} e^{\frac{\pi\eta}{2}} \kappa_\eta \underbrace{\sin(|u| - \Theta_\eta(u))}_{= -\sin(u + \Theta_\eta(u))};$$

if one makes $\eta \rightarrow -\eta$ in the last relation, and multiplies by -1 , one obtains

$$-|u| e^{\mathbf{i}|u|} M(1 - \mathbf{i}\eta, 2, -2\mathbf{i}|u|) \underset{|u| \rightarrow +\infty}{\sim} e^{-\frac{\pi\eta}{2}} \kappa_\eta \sin(u - \Theta_\eta(u)),$$

which is exactly the expected relation

$$F_\eta(-|u|) \underset{|u| \rightarrow +\infty}{\sim} e^{-\pi\eta} \sin(u - \Theta_\eta(u)).$$

We only write here the leading order of (11a), we must be very careful of all sign compensations for the next orders. Eventually, if one makes again $\eta \rightarrow -\eta$ in the last relation, one obtains directly

$$F_{-\eta}(-|u|) \underset{|u| \rightarrow +\infty}{\sim} e^{\pi\eta} \sin(u + \Theta_\eta(u)),$$

which is the behavior of $f_\eta(u)$ for $u \sim -\infty$.

The demonstration is very similar for (11b). First note that

$$t e^{\mathbf{i}t} U(1 + \mathbf{i}\eta, 2, -2\mathbf{i}u) = \overline{t e^{-\mathbf{i}t} U(1 - \mathbf{i}\eta, 2, 2\mathbf{i}u)}; \tag{A.2}$$

here, conjugation cannot be omitted. For $u > 0$, writing $u = |u|$, using (9b) and keeping only the real part, one obtains

$$\operatorname{Re}(|u| e^{-\mathbf{i}|u|} U(1 - \mathbf{i}\eta, 2, 2\mathbf{i}|u|)) \underset{|u| \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{e^{-\frac{\pi\eta}{2}}}{2\eta \operatorname{Re}(\Gamma(-\mathbf{i}\eta))} \frac{\cos(|u| - \Theta_\eta(u))}{\kappa_\eta}.$$

For $u < 0$, writing $u = -|u|$, using (A.2) and still keeping only the real part, one obtains

$$\operatorname{Re}(|u| e^{\mathbf{i}|u|} U(1 + \mathbf{i}\eta, 2, -2\mathbf{i}|u|)) \underset{|u| \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{e^{-\frac{\pi\eta}{2}}}{2\eta \operatorname{Re}(\Gamma(\mathbf{i}\eta))} \frac{1}{\kappa_\eta} \underbrace{\cos(|u| - \Theta_\eta(u))}_{= \cos(u + \Theta_\eta(u))};$$

if one makes $\eta \rightarrow -\eta$ in the last relation, and multiply by -1 , one obtains

$$\operatorname{Re}(-|u| e^{\mathbf{i}|u|} U(1 - \mathbf{i}\eta, 2, -2\mathbf{i}|u|)) \underset{|u| \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{e^{\frac{\pi\eta}{2}}}{2\eta \operatorname{Re}(\Gamma(-\mathbf{i}\eta))} \frac{\cos(u - \Theta_\eta(u))}{\kappa_\eta},$$

which is exactly

$$G_\eta(-|u|) \underset{|u| \rightarrow +\infty}{\sim} e^{\pi\eta} \cos(u - \Theta_\eta(u)).$$

Eventually, if one makes again $\eta \rightarrow -\eta$ in the last relation, one obtains directly

$$G_{-\eta}(-|u|) \underset{|u| \rightarrow +\infty}{\sim} e^{-\pi\eta} \cos(u + \Theta_\eta(u)),$$

which is the behavior of $g_\eta(u)$ for $u \sim -\infty$.

Appendix B. Expression of t as a function of T

First, we get simple relations between (t_α, r_α) and $(A_\alpha, B_\alpha, a_\alpha, b_\alpha)$ ($\alpha = R, L$):

$$A_L = \mathbf{i}t_L; \tag{B.1a}$$

$$B_L = t_L; \tag{B.1b}$$

$$a_L = \mathbf{i} e^{-\pi\eta} (1 - r_L); \tag{B.1c}$$

$$b_L = e^{\pi\eta} (1 + r_L); \tag{B.1d}$$

$$A_R = -\mathbf{i}(1 - r_R); \tag{B.1e}$$

$$B_R = 1 + r_R; \tag{B.1f}$$

$$a_R = -\mathbf{i} e^{-\pi\eta} t_R; \tag{B.1g}$$

$$b_R = e^{\pi\eta} t_R. \tag{B.1h}$$

The unitarity of S is written as

$$|r|^2 + |t|^2 = 1; \tag{B.2a}$$

$$\bar{t}r + r\bar{t} = 0. \tag{B.2b}$$

From (B.2b) one deduces

$$\frac{t}{|t|} = \mathbf{i}\epsilon \frac{r}{|r|}, \tag{B.3}$$

where $\epsilon = \pm 1$. From relations (B.1b) and (B.1d), one obtains

$$\frac{b_L e^{-\pi\eta}}{B_L} = \frac{1 + r}{t}.$$

By use of relations (B.2a) and (B.2b), this is written as

$$\frac{b_L e^{-\pi\eta}}{B_L} = \frac{1 + \mathbf{i}\epsilon t \sqrt{\frac{1-T}{T}}}{t},$$

but equation (17a) implies the existence of $\theta \in \mathbb{R}$ such that

$$\frac{b_L e^{-\pi\eta}}{B_L} = e^{\mathbf{i}\theta},$$

so, using back relation (14), we obtain

$$\frac{1}{t} = e^{i\theta} - i\epsilon \sqrt{\frac{1}{|t|^2} - 1}.$$

We carefully multiply this equation by its conjugate and find

$$\frac{1}{|t|^2} = 1 + \frac{1}{|t|^2} - 1 - 2\epsilon \sin(\theta) \sqrt{\frac{1}{|t|^2} - 1},$$

which implies $\theta = 0$ or π . We will write $e^{i\theta} = \epsilon'$ then

$$\frac{1}{t} - \epsilon' = -i\epsilon \sqrt{\frac{1}{|t|^2} - 1}.$$

We carefully multiply this equation by its conjugate and find

$$\frac{1}{|t|^2} + 1 - \epsilon' \frac{2\Re(t)}{|t|^2} = \frac{1}{|t|^2} - 1 \iff \Re(t) = \epsilon'|t|^2,$$

but $|t|^2 = \Re(t)^2 + \Im(t)^2$, so we obtain

$$|t|^2 = |t|^4 + \Im(t)^2 \iff \Im(t) = \epsilon'' \sqrt{|t|^2 - |t|^4}.$$

By use of (14), we have $t = \Re(t) + i\Im(t) = \epsilon'T + i\epsilon''\sqrt{T - T^2}$. We eventually shall prove that $\epsilon'' = \epsilon$. We put the last expression of t into $(1+r)/t$ and obtain

$$\begin{aligned} \frac{1+r}{t} &= \frac{1 + i\epsilon t \sqrt{\frac{1}{T} - 1}}{t} = \frac{(1 - \epsilon\epsilon'' + T\epsilon(\epsilon'' + i\epsilon' \sqrt{\frac{1}{T} - 1}))(\epsilon'T - i\epsilon''\sqrt{T - T^2})}{T} \\ &= \epsilon' + i(\epsilon - \epsilon'') \sqrt{\frac{1}{T} - 1}. \end{aligned}$$

By taking the modulus of this expression, one would find indeed that $\epsilon = \epsilon''$. However, we already know that it is real (because $\theta = 0$ or π), so one has the result straight. Now, if we use back the different relations, we can get the final expression of T :

$$t = \epsilon'T + i\epsilon\sqrt{T(1-T)} \tag{B.4}$$

where $\epsilon' = \pm 1$ is independent of ϵ . By using relations (B.1e), (B.1f), (B.1g), (B.1h), (B.1a), (B.1b), (B.1c), (B.1d), (B.4) and (17a), after some calculations, one obtains

$$A_L = -\epsilon\sqrt{T(1-T)} + i\epsilon'T; \tag{B.5a}$$

$$B_L = \epsilon'T + i\epsilon\sqrt{T(1-T)}; \tag{B.5b}$$

$$a_L = e^{-\pi\eta}(\epsilon\epsilon'\sqrt{T(1-T)} + i(2-T)); \tag{B.5c}$$

$$b_L = e^{\pi\eta}(T + i\epsilon\epsilon'\sqrt{T(1-T)}); \tag{B.5d}$$

$$A_R = -\epsilon\epsilon'\sqrt{T(1-T)} - i(2-T); \tag{B.5e}$$

$$B_R = T + i\epsilon\epsilon'\sqrt{T(1-T)}; \tag{B.5f}$$

$$a_R = e^{-\pi\eta}(\epsilon\sqrt{T(1-T)} - i\epsilon'T); \tag{B.5g}$$

$$b_R = e^{\pi\eta}(\epsilon'T + i\epsilon\sqrt{T(1-T)}) \tag{B.5h}$$

and

$$r = T - 1 + i\epsilon\epsilon'\sqrt{T(1-T)}. \tag{B.5i}$$

Using these relations, one verifies all relations (14), (B.2a), (B.2b) and (17b).

An important collateral result from this demonstration is indeed that

$$\frac{b_L e^{-\pi\eta}}{B_L} = \epsilon';$$

from relations (B.1f), (B.1b), (B.1h), (B.1d), one obtains

$$\frac{b_R e^{-\pi\eta}}{B_R} = \frac{b_L e^{-\pi\eta}}{B_L} = \epsilon'$$

which proves, by linearity, relation (17b).

Appendix C. McLaurin expansions

Here we study the behavior of basic solutions $f_\eta(u)$, $g_\eta(u)$ and their derivatives when $u \rightarrow 0$. Let us consider first the expansions of F_η and G_η for $u \rightarrow 0^+$, which are given by [9]

$$F_\eta(u) \simeq e^{-\frac{\pi\eta}{2}} |\Gamma(1 + i\eta)| (u + \eta t^2) = C_\eta (u + \eta t^2);$$

$$G_\eta(u) \simeq \frac{1}{C_\eta} \left\{ 2\eta(u + \eta u^2)(\log(2u) - 1 + p(\eta) + 2\gamma_E) + \left(1 - \frac{1 + 6\eta^2}{2} u^2\right) \right\};$$

$$\frac{dF_\eta}{du}(u) \simeq C_\eta(1 + 2\eta u);$$

$$\frac{dG_\eta}{du}(u) \simeq \frac{1}{C_\eta} \{ 2\eta[(1 + 2\eta u)(\log(2u) + p(\eta) + 2\gamma_E) - \eta u] - (1 + 6\eta^2)u \};$$

$$\frac{d^2 F_\eta}{du^2}(u) \simeq C_\eta 2\eta;$$

$$\frac{d^2 G_\eta}{du^2}(u) \simeq \frac{1}{C_\eta} \left\{ 2\eta \left[2\eta(\log(2u) + p(\eta) + 2\gamma_E) + \eta + \frac{1}{u} \right] - (1 + 6\eta^2) \right\};$$

with $p(\eta) = \text{Re}\left(\frac{\Gamma'(1+i\eta)}{\Gamma(1+i\eta)}\right) = p(-\eta)$ and γ_E being Euler's constant. Thus, one obtains, at first order, for the complete solution φ ,

$$\varphi(u, \eta) \underset{u \rightarrow 0^+}{\sim} B \frac{1}{C_\eta}; \tag{C.1a}$$

$$\varphi(u, \eta) \underset{u \rightarrow 0^-}{\sim} b \frac{e^{-\pi\eta}}{c_\eta} = \frac{b}{C_{-\eta}}; \tag{C.1b}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial u}(u, \eta) \underset{u \rightarrow 0^+}{\sim} AC_{-\eta} + 2B\eta \frac{1}{C_{-\eta}} (\log(2u) + p(\eta) + 2\gamma_E); \tag{C.1c}$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial u}(u, \eta) \underset{u \rightarrow 0^-}{\sim} aC_{-\eta} - 2b\eta \frac{1}{C_{-\eta}} (\log(-2u) + p(\eta) + 2\gamma_E). \tag{C.1d}$$

Appendix D. Orthonormality relations

The purpose of this section is to calculate the limit, when $L \rightarrow \infty$, of $\int_{-L}^L \overline{\psi(x, E_1, \alpha_1)} \psi(x, E_2, \alpha_2) dx$. Consider a given L , this integral with all functions replaced

by their asymptote (12a) or (12b) becomes

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_0^L dx \cos \left(\frac{\lambda x}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} + \Theta_{\eta_1} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_2} \right) \right) A_{\alpha_1 \alpha_2}^+ \\ & - \cos \left(\frac{\lambda x}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} - \Theta_{\eta_1} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_2} \right) \right) A_{\alpha_1 \alpha_2}^- \\ & + \sin \left(\frac{\lambda x}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} - \Theta_{\eta_1} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_2} \right) \right) B_{\alpha_1 \alpha_2}^+ \\ & + \sin \left(\frac{\lambda x}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} + \Theta_{\eta_1} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_2} \right) \right) B_{\alpha_1 \alpha_2}^- \\ & + \frac{1}{2} \int_{-L}^0 dx \cos \left(\frac{\lambda x}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} - \Theta_{\eta_1} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_1} \right) + \Theta_{\eta_2} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_2} \right) \right) a_{\alpha_1 \alpha_2}^+ \\ & - \cos \left(\frac{\lambda x}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} + \Theta_{\eta_1} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_1} \right) + \Theta_{\eta_2} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_2} \right) \right) a_{\alpha_1 \alpha_2}^- \\ & + \sin \left(\frac{\lambda x}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} + \Theta_{\eta_1} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_1} \right) + \Theta_{\eta_2} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_2} \right) \right) b_{\alpha_1 \alpha_2}^+ \\ & + \sin \left(\frac{\lambda x}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} - \Theta_{\eta_1} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_1} \right) + \Theta_{\eta_2} \left(\frac{x\lambda}{2\eta_2} \right) \right) b_{\alpha_1 \alpha_2}^-, \end{aligned}$$

where we use

$$\begin{aligned} A_{\alpha_1 \alpha_2}^+ &= (\overline{A_{\alpha_1}} A_{\alpha_2} + \overline{B_{\alpha_1}} B_{\alpha_2}); & A_{\alpha_1 \alpha_2}^- &= (\overline{A_{\alpha_1}} A_{\alpha_2} - \overline{B_{\alpha_1}} B_{\alpha_2}); \\ B_{\alpha_1 \alpha_2}^+ &= (\overline{A_{\alpha_1}} B_{\alpha_2} + \overline{B_{\alpha_1}} A_{\alpha_2}); & B_{\alpha_1 \alpha_2}^- &= (\overline{A_{\alpha_1}} B_{\alpha_2} - \overline{B_{\alpha_1}} A_{\alpha_2}); \\ a_{\alpha_1 \alpha_2}^+ &= (\overline{a_{\alpha_1}} a_{\alpha_2} e^{\pi(\eta_1 + \eta_2)} + \overline{b_{\alpha_1}} b_{\alpha_2} e^{-\pi(\eta_1 + \eta_2)}); \\ a_{\alpha_1 \alpha_2}^- &= (\overline{a_{\alpha_1}} a_{\alpha_2} e^{\pi(\eta_1 + \eta_2)} - \overline{b_{\alpha_1}} b_{\alpha_2} e^{-\pi(\eta_1 + \eta_2)}); \\ b_{\alpha_1 \alpha_2}^+ &= (\overline{a_{\alpha_1}} b_{\alpha_2} e^{\pi(\eta_1 - \eta_2)} + \overline{b_{\alpha_1}} a_{\alpha_2} e^{-\pi(\eta_1 - \eta_2)}); \\ b_{\alpha_1 \alpha_2}^- &= (\overline{a_{\alpha_1}} b_{\alpha_2} e^{\pi(\eta_1 - \eta_2)} - \overline{b_{\alpha_1}} a_{\alpha_2} e^{-\pi(\eta_1 - \eta_2)}). \end{aligned}$$

The difference with the exact limit is finite and contributes to constant c in formula (19). Now, these integrations are easily performed when one notes that all $\Theta_\eta(u)$ functions can be treated as constant. Indeed, let us consider a simpler integral $\int_0^L \cos(su + \ln(u)) du$, where we will omit the problem at $u = 0$, and $\delta(L) \equiv \frac{1}{s} \sin(sL + \ln(L)) - \int_0^L \cos(su + \ln(u)) du$ is the difference of the approximate integral with the exact one. Then, $\delta'(L) = \frac{\sin(sL + \ln(L))}{sL}$ not only tends to zero when $L \rightarrow \infty$, but has a finite integral $\int_0^L \delta'(u) du$. This proves that all such approximations are valid and simply contribute to constant c .

The $x = 0$ boundary only contributes to constant c (you may need to replace $x = 0$ with another boundary, in order to avoid any divergence, but this replacement simply gives another contribution to constant c) so we may skip it and eventually get

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\lambda} \left[\frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2} \sin \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} + \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) A_{\alpha_1 \alpha_2}^+ \right. \\ & \left. + \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2} \sin \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} - \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) A_{\alpha_1 \alpha_2}^- \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2} \cos \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} - \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) B_{\alpha_1 \alpha_2}^+ \\
 & -\frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2} \cos \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} + \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) B_{\alpha_1 \alpha_2}^- \\
 & -\frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2} \sin \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} - \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) + \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) a_{\alpha_1 \alpha_2}^+ \\
 & +\frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2} \sin \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} + \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) + \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) a_{\alpha_1 \alpha_2}^- \\
 & +\frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2} \cos \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} + \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) + \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) b_{\alpha_1 \alpha_2}^+ \\
 & +\frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2} \cos \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} - \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) + \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) b_{\alpha_1 \alpha_2}^- \Big].
 \end{aligned}$$

Now, both limits of $\frac{\sin(sL)}{s}$ and $\frac{\cos(sL)}{s}$ when $L \rightarrow \infty$ are equal to $\pi \delta(s)$ (with differential ds). The $\ln(u)$ correction has no influence (see appendix E). Then we write $\delta\left(\frac{1}{\eta_2} - \frac{1}{\eta_1}\right) = \delta\left(\frac{\lambda}{\lambda} \left(\frac{1}{\eta_2} - \frac{1}{\eta_1}\right)\right) = \frac{\lambda}{2} \delta(k_1 - k_2)$, so we eventually get factor $\frac{\pi \lambda}{2}$. We have forgotten the exact differential $\frac{dk}{2\pi}$ in one dimension, and we will include a last factor 2 which accounts for the equality between the limits of \int_0^L and \int_{-L}^0 . Altogether, we get formula (19), with the following coefficients of matrix P :

$$P_{\alpha\alpha'} = \frac{\overline{A_\alpha} A_{\alpha'} + \overline{B_\alpha} B_{\alpha'} + \overline{a_\alpha} a_{\alpha'} e^{2\pi\eta} + \overline{b_\alpha} b_{\alpha'} e^{-2\pi\eta}}{2}$$

and, with relations (B.5e), (B.5f), (B.5g), (B.5h), (B.5a), (B.5b), (B.5c), (B.5d), we eventually obtain

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

thus (18) is verified.

Appendix E. Hermiticity relations at infinity

The calculation of (22a) is similar to the previous orthonormality calculations, although simpler. Here $\alpha = R, L$ for the choice of φ_α and we use the notations of appendix D. One obtains

$$\begin{aligned}
 & \frac{\eta_1 + \eta_2}{2\eta_1 \eta_2} \sin \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} + \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) A_{\alpha\alpha}^+ \\
 & -\frac{\eta_1 - \eta_2}{2\eta_1 \eta_2} \sin \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} - \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) A_{\alpha\alpha}^- \\
 & -\frac{\eta_1 - \eta_2}{2\eta_1 \eta_2} \cos \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} - \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) B_{\alpha\alpha}^+ \\
 & +\frac{\eta_1 + \eta_2}{2\eta_1 \eta_2} \cos \left(\frac{\lambda L}{2 \frac{\eta_1 \eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} + \Theta_{\eta_1} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_1} \right) - \Theta_{\eta_2} \left(\frac{L\lambda}{2\eta_2} \right) \right) B_{\alpha\alpha}^-
 \end{aligned}$$

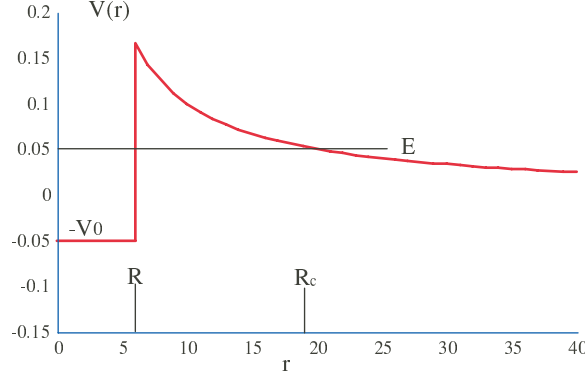


Figure F.1. Approximated potential $V(r) = V_N(r) + V_C(r)$ designed to calculate the fission probability within the WKB approximation.

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\eta_1 + \eta_2}{2\eta_1\eta_2} \sin\left(\frac{\lambda L}{2\frac{\eta_1\eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} - \Theta_{\eta_1}\left(\frac{L\lambda}{2\eta_1}\right) + \Theta_{\eta_2}\left(\frac{L\lambda}{2\eta_2}\right)\right) a_{\alpha\alpha}^+ \\
 & + \frac{\eta_1 - \eta_2}{2\eta_1\eta_2} \sin\left(\frac{\lambda L}{2\frac{\eta_1\eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} + \Theta_{\eta_1}\left(\frac{L\lambda}{2\eta_1}\right) + \Theta_{\eta_2}\left(\frac{L\lambda}{2\eta_2}\right)\right) a_{\alpha\alpha}^- \\
 & + \frac{\eta_1 - \eta_2}{2\eta_1\eta_2} \cos\left(\frac{\lambda L}{2\frac{\eta_1\eta_2}{\eta_1 + \eta_2}} + \Theta_{\eta_1}\left(\frac{L\lambda}{2\eta_1}\right) + \Theta_{\eta_2}\left(\frac{L\lambda}{2\eta_2}\right)\right) b_{\alpha\alpha}^+ \\
 & - \frac{\eta_1 - \eta_2}{2\eta_1\eta_2} \cos\left(\frac{\lambda L}{2\frac{\eta_1\eta_2}{\eta_1 - \eta_2}} - \Theta_{\eta_1}\left(\frac{L\lambda}{2\eta_1}\right) + \Theta_{\eta_2}\left(\frac{L\lambda}{2\eta_2}\right)\right) b_{\alpha\alpha}^-.
 \end{aligned}$$

One striking thing is that the coefficients $\frac{1}{\eta_1} \pm \frac{1}{\eta_2}$ are very different from the previous case. In order to match with the δ limit, one must divide by $\frac{1}{\eta_1} \mp \frac{1}{\eta_2}$, so there is a global supplementary factor $\frac{1}{\eta_1^2} - \frac{1}{\eta_2^2}$, which, when multiplied by $\delta\left(\frac{1}{\eta_1} \pm \frac{1}{\eta_2}\right)$, will always give zero.

Another important difference is that we have made no approximation in this case. It is worth studying the last limit more carefully than we did before. Using again a simpler case, we want to prove that $\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{s} \sin(sL - s \ln(L) - \kappa s^2 + \beta)$ is $\pi \delta(s)$ (κ and β are just constants here). The important thing is that $\tilde{L} \equiv L - \ln(L) \rightarrow \infty$ and can be used as a parameter, so the result is proved, and the limit of (22a) is strictly zero.

Appendix F. Digression: to WKB or not to WKB?

In a nuclear fission process, a light nucleus of mass m and charge $q = Zq_e > 0$ (e.g., an alpha particle with $Z = 2$) is trapped in a metastable state at energy E due to a potential ‘pocket’ $V(r) = V_N(r) + V_C(r)$ of a heavy nucleus of charge $q' = Z'q_e$ (here r is the distance between the centers of mass of the two nuclei). The potential is the sum of a strong short-range attractive nuclear potential $V_N(r)$ and a repulsive long-range Coulomb potential $V_C(r) = \frac{qq'}{r}$. The focus of interest is on the escape probability P from the metastable state. In a crude approximation, $V(r)$ is replaced by a deep potential well of range R and depth $-V_0$ and a Coulomb tail for $r > R$ (see figure F.1).

The escape probability is then calculated in the WKB approximation, integrating the local momentum $\kappa(r) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [V_C(r) - E]}$ between the turning points R and R_c (such that $V_C(R_c) = E$).

$$\Lambda = \int_R^{R_c} \kappa(r) dr = \int_0^{R_c} \kappa(r) dr - \int_0^R \kappa(r) dr \equiv \Lambda_G - \Lambda_R; \quad P = e^{-2\Lambda}.$$

When $R \ll R_c$ the result is written as

$$P = e^{-\frac{2\pi m q q'}{\hbar v}} e^{\frac{32m q q' R}{\hbar^2}} \equiv P_G T_R, \tag{F.1}$$

where v is the relative velocity and P_G is the *Gamow factor*, which contains the energy dependence of the escape probability. Relation (27), with $\varepsilon = R$, gives the *exact* escape amplitude $= |t|^2$ (for the special case $V_0 = 0$ but that can easily be modified). It also shows that the WKB expression (F.1) cannot be used as $R \rightarrow 0$ because it yields a finite escape probability while the exact result (within the naive model of figure F.1) gives the zero escape probability. The reason is that the conditions for the use of the WKB approximation are not met, strictly speaking.

Appendix G. Generalization of recurrence equations

We study the changes of relations (14.1) in [9] for the bound states ($e < 0$), in the case $L = 0$. Note first that (14.1.1) is also changed, it is now written as (29a).

Relation (14.1.6) is now written as (we omit the $L = 0$ exponent)

$$A_1 = 1; \quad A_2 = \eta; \quad (k + 1)(k + 2)A_{k+2} = 2\eta A_{k+1} + A_k.$$

Relation (14.1.14) is now written as (with our notations)

$$L_\eta(u) = 2\eta K_\eta(u) \left(\log(2u) - 1 + \frac{\Gamma'(1 + \eta)}{\Gamma(1 + \eta)} + 2\gamma_E \right) + \theta_\eta(u)$$

with (14.1.17) (relation (14.1.15) is useless here)

$$\theta_\eta(u) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k u^k$$

and relations (14.1.18)–(14.1.20) now become

$$a_0 = 1; \quad a_1 = -1; \quad (k + 1)(k + 2)a_{k+2} = 2\eta a_{k+1} + a_k - 2\eta(2k + 3)A_{k+2}.$$

Eventually, note that new relation (14.1.14) also holds for $u < 0$ as soon as we replace $\log(2u)$ by $\log(-2u)$.

Appendix H. Identities between confluent hypergeometric functions and modified Bessel ones

We found useful identities between confluent hypergeometric functions $M\left(\frac{1}{2} \pm n, 2, 2t\right)$ or $U\left(\frac{1}{2} \pm n, 2, 2t\right)$ and modified Bessel functions $\mathbf{I}_n(t)$ or $\mathbf{K}_n(t)$, for all $n \in \mathbb{N}$.

These identities appear to generalize some identity established only for $n = 0$ or $n = 1$; indeed, from relations (13.6.3) and (13.6.21) of [9], one shows

$$e^{-t} M\left(\frac{1}{2}, 2, 2t\right) = \mathbf{I}_0(t) - \mathbf{I}_1(t); \tag{H.1a}$$

$$e^{-t}U\left(\frac{1}{2}, 2, 2t\right) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}(\mathbf{K}_0(t) + \mathbf{K}_1(t)). \tag{H.1b}$$

Thus, it seems possible to generalize these relations and look for solutions of equations (29a) and (29b) in the form

$$f_n(t) = t(p_n(t)\mathbf{I}_0(t) - q_n(t)\mathbf{I}_1(t)) \tag{H.2a}$$

or

$$g_n(t) = t(p_n(t)\mathbf{K}_0(t) + q_n(t)\mathbf{K}_1(t)) \tag{H.2b}$$

(we took advantage of further relations between the polynomials (p_n, q_n) defined in equation (H.2a) and those defined in equation (H.2b) in order to save notations).

Although it works well, it proved more efficient to find directly the recurrence relations which define p_n and q_n . Using relation (13.4.11) of [9] for $M(\frac{1}{2} - n, 2, 2t)$, (13.4.10) for $M(\frac{1}{2} + n, 2, 2t)$, (13.4.26) for $U(\frac{1}{2} - n, 2, 2t)$ or (13.4.23) for $U(\frac{1}{2} + n, 2, 2t)$, and making the derivative of equations (H.2a) and (H.2b) using $\mathbf{I}'_0 = \mathbf{I}_1, \mathbf{I}'_1(t) = \mathbf{I}_0(t) - \mathbf{I}_1(t)/t, \mathbf{K}'_0 = -\mathbf{K}_1$ and $\mathbf{K}'_1(t) = -\mathbf{K}_0(t) - \mathbf{K}_1(t)/t$, and fixing $p_0 = q_0 = 1$, one finds, up to some normalization factors,

$$p_{n+1}(x) = (2n + 3)p_n(x) + 2x(p'_n(x) - p_n(x) - q_n(x)) \tag{H.3a}$$

$$q_{n+1}(x) = (2n + 1)q_n(x) + 2x(q'_n(x) - p_n(x) - q_n(x)). \tag{H.3b}$$

These definitions have one main advantage: these polynomials are real and have integer coefficients; let us write $p_n(x) = \sum_{i=0}^n a_i^n x^i$ and $q_n(x) = \sum_{i=0}^n b_i^n x^i$, we obtain $a_0^n = (2n + 1)!!, b_0^n = (2n - 1)!!, a_n^n = b_n^n = (-4)^n$.

Eventually, let us fix the normalization problem (note the symmetry between $M(\frac{1}{2} - n, 2, 2t)$ and $M(\frac{3}{2} + n, 2, 2t)$ or between $U(\frac{1}{2} - n, 2, 2t)$ and $U(\frac{3}{2} + n, 2, 2t)$ and that $(-1)!! = 1$): $\forall n \in \mathbb{N}$,

$$e^{-t}M\left(\frac{1}{2} - n, 2, 2t\right) = \frac{1}{(2n + 1)!!}(p_n(t)I_0(t) - q_n(t)I_1(t)); \tag{H.4a}$$

$$e^{-t}U\left(\frac{1}{2} - n, 2, 2t\right) = \frac{(-1)^n}{2^{n+1}\sqrt{\pi}}(p_n(t)K_0(t) + q_n(t)K_1(t)); \tag{H.4b}$$

$$e^{-t}M\left(\frac{3}{2} + n, 2, 2t\right) = \frac{1}{(2n + 1)!!}(p_n(-t)I_0(t) + q_n(-t)I_1(t)); \tag{H.4c}$$

$$e^{-t}U\left(\frac{3}{2} + n, 2, 2t\right) = \frac{2^n}{(2n + 1)!!(2n - 1)!!\sqrt{\pi}}(-p_n(-t)K_0(t) + q_n(-t)K_1(t)). \tag{H.4d}$$

References

[1] Mineev V S 2004 *Theor. Math. Phys.* **140** 1157
 [2] Yost F L, Wheeler J A and Breit G 1936 *Phys. Rev.* **49** 174
 [3] Moshinsky M 1993 *J. Phys. A: Math. Gen.* **26** 2445
 [4] Basdevant J and Dalibard J 2002 *Quantum Mechanics, Advanced Texts in Physics* (Berlin: Springer)
 [5] Shankar R 1994 *Principles of Quantum Mechanics* (New York: Plenum)
 [6] Bohm D 1951 *Quantum Theory (Prentice-Hall Physics Series)* ed D H Menzel (New York: Prentice-Hall) p 335

- [7] Takana Y and Kashiwaya S 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 3451
- [8] Lieb E H and Liniger W 1963 *Phys. Rev.* **130** 1605
- [9] Abramowitz M and Stegun I A 1965 *Handbook of Mathematical Functions* (New York: Dover)
- [10] Merzbacher E 1970 *Quantum Mechanics* 2nd edn (New York: Wiley)
- [11] Avishai Y and Band Y B 1985 *Phys. Rev. B* **32** 2674
- [12] Avishai Y and Luck J M 1992 *Phys. Rev. B* **45** 1074



OPEN

Incompatible Coulomb hamiltonian extensions

G. Abramovici

We revisit the resolution of the one-dimensional Schrödinger hamiltonian with a Coulomb $\lambda/|x|$ potential. We examine among its self-adjoint extensions those which are compatible with physical conservation laws. In the one-dimensional semi-infinite case, we show that they are classified on a $U(1)$ circle in the attractive case and on $(\mathbb{R}, +\infty)$ in the repulsive one. In the one-dimensional infinite case, we find a specific and original classification by studying the continuity of eigenfunctions. In all cases, different extensions are incompatible one with the other. For an actual experiment with an attractive potential, the bound spectrum can be used to discriminate which extension is the correct one.

The Coulomb problem addresses the non-relativistic Schrödinger equation with a 3-dimensional Coulomb potential, restricted to one dimension; it has inspired a vast corpus of scientific literature for the last seventy years^{1–11}. Some results have been much debated. Mathematical aspects are now fully understood, but physical ones want for more elaborated and robust interpretation, which we provide in details here.

In this article, we study the Coulomb potential, either restricted to a semi-infinite line, or else to a full infinite line. We will formally write the corresponding hamiltonian $H = -d^2/dx^2 + V$ in dimensionless units and \mathbb{D} will represent the domain on which wavefunctions are defined, so the first case corresponds to $\mathbb{D} = \mathbb{R}_+^*$, while the second to $\mathbb{D} = \mathbb{R}$. When necessary, we will write $H(\mathbb{D})$ instead of H . One may note that the Schrödinger equation for $\mathbb{D} = \mathbb{R}_+^*$ is equivalent, through a simple mapping, to the radial one for $\mathbb{D} = \mathbb{R}^3$ in 3-dimension with zero orbital momentum, $L = 0$.

This work lies at the frontier between physics and mathematics, because Coulomb hamiltonians $H(\mathbb{R}_+^*)$ and $H(\mathbb{R})$, although defined on a physical basis, reveal **non self-adjoint**. In such a case, one usually needs to study the self-adjoint **extensions** K of the hamiltonian. But, in this very case, the situation is even worse, because H is not even **symmetric**^{6,11} (that is, one can find two states φ and χ such that $\langle \varphi | H | \chi \rangle \neq \langle \chi | H | \varphi \rangle$). In such a situation, one must **restrict** the Hilbert space on which eigenstates are defined, in order to get a symmetric operator, the self-adjoint extensions K of which are well-defined. We call \mathcal{L} this restricted Hilbert space.

When the self-adjoint extension of an operator is unique, these mathematical manipulations are transparent because the spectral theorem applies, so the action of the operator is defined unambiguously on any function of \mathcal{L} . This is the case for almost all standard hamiltonians found in scientific literature, which are moreover generally well defined without any restriction (that is $\mathcal{L} = L^2(\mathbb{D})$), so one does not need to care about all these mathematical subtleties.

However, $H(\mathbb{R}_+^*)$ and $H(\mathbb{R})$ belong to the class of operators, which admit **several** self-adjoint extensions. Each extension is **incompatible** with the other, so one must **choose** only one extension at a time, where to define a complete set of eigenstates. From a physical point of view, the interpretation of the operator action on a wavefunction is ambiguous, since its definition **depends** on the extension which is chosen. *Deficiency coefficients* are defined, which indicate the number of degrees of freedom, for this choice. For $H(\mathbb{R}_+^*)$, authors have found^{12–15} one continuous degree of freedom.

Motivation

The interest of the Coulomb problem lies in its unusual properties: the fact that hamiltonian $H(\mathbb{R}_+^*)$ and $H(\mathbb{R})$ are not self-adjoint and not even symmetric, so that one must construct maximal restrictions \mathcal{L} and study their self-adjoint extensions K . Our aim is to find a **physical** interpretation of these extensions, in order to identify those which are compatible with standard physical laws and those which are not.

The boundary triples theory, which is proved for the Coulomb problem¹², establishes that any eigenfunction ψ of K is an eigenfunction of H with specific **boundary** conditions. This result, to which we will refer as the *boundary triples theorem*, provides a physical interpretation of all the self-adjoint extensions to be found. We will also

Université Paris-Saclay, CNRS, Laboratoire de Physique des Solides, 91405, Orsay, France. email: abramovici@lps.u-psud.fr

\Re/\Im	real/imaginary part of a complex number
i	the imaginary number. Its conjugate reads $\bar{i} = -i$
\mathbb{D}	generic physical space
\mathbb{R}	set of real numbers
$\mathbb{R}_+^*/\mathbb{N}$	set of positive real/integer numbers
E^c	the set E excluding 0 (for any set E)
H	hamiltonian
simple	without degeneracy
η	a dimensional Coulomb parameter
Rydberg states	eigenstates corresponding to $-\eta \in \mathbb{N}$
non Rydberg states	eigenstates corresponding to $-\eta \notin \mathbb{N}$
$L^1(\mathbb{D})$	set of Lebesgue integrable functions defined in \mathbb{D}
$L^2(\mathbb{D})$	set of Lebesgue square integrable functions defined in \mathbb{D}
L_n	Laguerre polynomial
\mathcal{D}	generic domain where eigenstates are defined for a given self-adjoint extension not to be confused with boundary conditions in real space, applied to $H(\mathbb{D})$
\mathcal{S}	generic set of negative eigenvalues for a given self-adjoint extension (we call it spectrum instead of discrete spectrum)
\mathcal{B}	generic set of bound eigenstates for a given self-adjoint extension
\mathcal{F}	generic set of free eigenstates for a given self-adjoint extension
ω	parameter which classifies the self-adjoint extensions in the semi-infinite real line case
$\varpi = (\omega, \theta)$	parameter which classifies the self-adjoint extensions in the real line case

Table 1. Notations and terminology.

benefit of all previous classifications of these extensions^{12–15} and repeat some of these calculations, taking into account physical considerations.

In what concerns the semi-infinite line, all self-adjoint extensions of $H(\mathbb{R}_+^*)$ reveal compatible with physical conservation laws, so the main contribution of this study on $H(\mathbb{R}_+^*)$ consists mainly in a more physical and pedagogical way to construct them. However, we provide an original description of the space parameter of these extensions, which is topologically equivalent to $U(1)$ in the attractive case and to (\mathbb{R}, ∞) in the repulsive one.

On the contrary, self-adjoint extensions of $H(\mathbb{R})$ are not all compatible with physical conservation laws. Indeed, their study brings a specific difficulty: the connection of the solution defined on \mathbb{R}_+^* with that defined on \mathbb{R}_-^* , since the continuity of eigenfunctions at $x = 0$ is not guaranteed. This has been very debated and we propose an original connection process, which is founded on physical conservation laws and gives **new**, although compatible, results.

Altogether, we prove a new classification of the self-adjoint extensions of $H(\mathbb{R})$, **excluding** those which are not compatible with physical conservation laws. Accordingly, this classification maps on a space of extension parameter, which is **reduced** compared to that of previous classifications¹⁵, but the deficiency coefficient remains equal to 2. The parameter space of our classification is the product of a one-dimensional closed line by a phase similar to a gauge degree of freedom.

In what concerns the 3-dimension space, in spite of the mapping between its Schrödinger equation with that of $H(\mathbb{R}_+^*)$, the corresponding classifications of self-adjoint extensions are different (see however Appendix in Supplementary Information), since the deficiency coefficient of $H(\mathbb{R}^3)$ is zero¹², that is $H(\mathbb{R}^3)$ is self-adjoint, when defined in $L^2(\mathbb{R}^3)$.

The present article is organized as follows: we will first focus on the $\mathbb{D} = \mathbb{R}_+^*$ case and classify all self-adjoint extensions of $H(\mathbb{R}_+^*)$, both for an attractive potential or a repulsive one. In particular, we define and exhibit the Dirichlet or Neumann extensions. Then, we study in details the continuation problem in the $\mathbb{D} = \mathbb{R}$ case. Next, we study physical applications of $\mathbb{D} = \mathbb{R}^3$, $\mathbb{D} = \mathbb{R}$ and $\mathbb{D} = \mathbb{R}_+^*$ cases. In a fifth part, we examine the spectral theorem. In the next one, we exhibit the extension parameter spaces. Finally, we will review the highlights of this work on the Coulomb problem. Some notations and terms are given afterwards in Table 1.

Self-adjoint extensions in the \mathbb{R}_+^* case

Operator $H(\mathbb{R}_+^*)$ is unbound and can not be defined on $L^2(\mathbb{R}_+^*)$, the Hilbert space of square-integrable functions. Eigenfunctions ϕ_e obey equation

$$-\frac{d^2\phi_e}{dx^2}(x) + \frac{\lambda}{x}\phi_e(x) = e\phi_e(x) \quad \forall x > 0 \tag{1}$$

where we have multiplied Schrödinger equation by $2m/\hbar^2$, so e is the reduced energy corresponding to $E = \hbar^2 e/(2m)$; we define $\lambda \equiv \frac{2mqq'}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}$, m is the mass of the particle, ϵ_0 vacuum permittivity, \hbar the reduced Planck constant and q, q' the electric charges. For $e > 0$ (free states of positive energy), the solutions of (1) read

$$\begin{aligned} \Psi_k(x) &= \alpha_k F_\eta(kx) + \beta_k G_\eta(kx), \quad \text{with momentum } k \equiv \sqrt{e}, \quad \eta \equiv \lambda/(2k) \text{ and} \\ F_\eta(u) &\equiv C_\eta u e^{-iu} M(1 - i\eta, 2, 2iu), \\ G_\eta(u) &\equiv \Re \left\{ 2\eta \frac{u e^{-iu} \Gamma(-i\eta)}{C_\eta} U(1 - i\eta, 2, 2iu) \right\}, \\ \text{with } C_\eta &\equiv e^{-\frac{\pi\eta}{2}} \sqrt{\frac{\pi\eta}{\sinh(\pi\eta)}}. \end{aligned} \tag{2}$$

Here, Γ is the gamma function, M the regular confluent hypergeometric function and U the logarithmic confluent hypergeometric function¹⁶. Both F_η and G_η are continuous and bounded, see ref.¹¹ for asymptotic behavior and other properties. The case $e = 0$ extends this case when the potential is attractive, see section ‘Solutions of zero energies’.

For $e < 0$ (bound states of negative energy), the solutions of (1) read

$$\begin{aligned} \varphi_k(x) &= \mu_k f_\eta(kx) + \nu_k g_\eta(kx), \quad \text{with momentum } k \equiv \sqrt{-e}, \quad \eta \equiv \lambda/(2k) \text{ and} \\ f_\eta(u) &\equiv 2D_\eta u e^{-u} U(1 + \eta, 2, 2u), \\ g_\eta(u) &\equiv 2\sqrt{|\lambda|} u e^{-u} M(1 + \eta, 2, 2u), \\ \text{with } D_\eta &\equiv \frac{|\Gamma(1 + \eta)| \sqrt{|\lambda|}}{\sqrt{1 - 2\eta + 2\eta^2} \psi'_{\text{dig}}(1 + \eta)}. \end{aligned} \tag{3}$$

Here, ψ'_{dig} is the digamma function. One finds $f_\eta \in L^1(\mathbb{R}_+^*) \cap L^2(\mathbb{R}_+^*) \cap C^\infty(\mathbb{R}_+^*)$ while $g_\eta \in C^\infty(\mathbb{R}_+^*)$ and diverges as $u \rightarrow \infty$. We have chosen $\|f_\eta\|_2 = 1$ in $L^2(\mathbb{R}_+^*)$.

For $\lambda < 0$ so $qq' < 0$ and the potential is attractive, the spectrum of any self-adjoint extension will reveal infinite and discrete. As we shall find, all solutions corresponding to $\eta = -n$, with $n \in \mathbb{N}^*$, belong to the same extension and read $f_\eta(u) = -u e^{-u} L'_n(2u) \sqrt{-2\lambda} n^{-3/2}$, the standard Rydberg solution, with L_n the Laguerre polynomial. They obey Dirichlet condition $f_{-n}(0) = 0$. On the other hand, for $-\eta \notin \mathbb{N}^*$, $f_\eta(0) \neq 0$, see ref.¹¹ for more details. We will call *Rydberg states*, those following $\eta = -n$ with $n \in \mathbb{N}^*$, and *non Rydberg states* the others. Note that the definition of g_η must be changed into

$$g_\eta(u) = -u e^{-u} L'_n(2u) \sqrt{-2\lambda} n^{-3/2}$$

since, in that very case $\eta = -n$, $u e^{-u} M(1 - n, 2, 2u)$ is proportional to $u e^{-u} U(1 - n, 2, 2u)$.

For $\lambda > 0$ so $qq' > 0$ and the potential is repulsive, the spectrum of any self-adjoint extension will reveal discrete, with a unique bound state of strictly negative energy, but in a specific case that we will explain further on.

Existence of self-adjoint extension. The existence of self-adjoint extensions for the Coulomb potential has been fully established in several references¹²⁻¹⁵ and needs not to be discussed here again. Indeed, the deficiency coefficients m_\pm are found equal to 1, although not explicitly calculated in ref.¹³. We will construct all self-adjoint extensions as follows.

We will write $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ the self-adjoint extensions of $H(\mathbb{R}_+^*)$, parametrized by ω , a symbolic index, the meaning of which will be explained later on. The boundary triples theorem implies that $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ is the restriction of $H(\mathbb{R}_+^*)$ on some domain \mathcal{L} of eigenfunctions, which we write $\mathcal{L} = \mathcal{D}_\omega$. We will first construct all possible symmetric extensions of $H(\mathbb{R}_+^*)$ with different boundary conditions and find self-adjoint ones $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ as **maximal** symmetric extensions¹⁵.

Description of a self-adjoint extension. In this part, we consider the attractive case. Let $e_\omega < 0$ be in the spectrum of $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$, that is φ_{k_ω} , with momentum $k_\omega = \sqrt{-e_\omega}$, is an eigenfunction of $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ and belongs to \mathcal{D}_ω . There is such e_ω , otherwise the spectrum of $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ would be included in \mathbb{R}_+ , which case we exclude later on. φ_{k_ω} is proportional to $x \mapsto f_{\eta_\omega}(k_\omega x)$ (writing $\eta_\omega = \lambda/(2k_\omega)$) because of (3); indeed, $f_{\eta_\omega} \in L^2(\mathbb{R}_+^*)$, so does φ_{k_ω} by definition, while g_{η_ω} diverges, letting $\nu_{k_\omega} = 0$. The other factor reads then $\mu_{k_\omega} = e^{i\theta_\omega}$, a constant phase factor which can be fixed arbitrarily.

One observes that not all functions φ_k belong to \mathcal{D}_ω , because the scalar product $\langle F_{\eta_1} | F_{\eta_2} \rangle$, which we calculate in Appendix (see Supplementary Information), with arbitrary momenta $k_i = \lambda/(2\eta_i)$, is not always zero. Let us establish this result: we note γ_E the Euler constant and define function g_E :

$$g_b(x) \equiv \psi_{\text{dig}}(1+x) - \ln|x| - \frac{1}{2x} + 2\gamma_E;$$

then, the scalar products reads

$$\langle f_{\eta_1} | f_{\eta_2} \rangle = \frac{D_{\eta_1} D_{\eta_2} \lambda^2}{k_1^2 - k_2^2} \times \frac{g_b(\eta_2) - g_b(\eta_1)}{\Gamma(1+\eta_1)\Gamma(1+\eta_2)}; \tag{4}$$

(this expression is valid when $\eta_1 \rightarrow \eta_2$ and the limit is 1); therefore an operator admitting all such eigenfunctions would not be symmetric^{6,11}.

Let $\mathcal{S}_\omega \equiv \{e \in \mathbb{R}_+^* / \langle \varphi_{k_\omega} | \varphi_{\sqrt{-e}} \rangle = 0\} \cup \{e_\omega\}$. We will prove that the set of bound states of $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ corresponds to functions generated by $\mathcal{B}_\omega \equiv \{\varphi_k \in L^2(\mathbb{R}_+^*) / -k^2 \in \mathcal{S}_\omega\}$, so the spectrum of $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ will exactly be $\mathcal{S}_\omega \cup \mathbb{R}_+$. Let us characterize \mathcal{S}_ω . The condition $\langle \varphi_{k_1} | \varphi_{k_2} \rangle = 0$ reduces to

$$g_b(\eta_1) = g_b(\eta_2) \tag{5}$$

so $\mathcal{S}_\omega = \left\{ e / g_b\left(\frac{\lambda}{2\sqrt{-e}}\right) = g_b(\eta_\omega) \right\}$. We study the zeros of $g_b(\eta) - g_b(\eta_\omega)$ further on. (5) implies that any function φ_k orthogonal to φ_{k_ω} obeys $g_b(\eta) = g_b(\eta_\omega)$ so all functions in \mathcal{B}_ω are either proportional or orthogonal to each other. By construction, \mathcal{B}_ω is maximal, because any function orthogonal to φ_{k_ω} belongs to it; there cannot be any other eigenfunction in \mathcal{D}_ω corresponding to a bound state, so $\{\phi_e \in \mathcal{D}_\omega / e \in \mathcal{S}_\omega\} \subseteq \mathcal{B}_\omega$. However, we cannot claim yet that this inclusion is an equality, because the scalar product of a bound state with a free one could be different from zero.

Let us discard this possibility and thus prove $\{\phi_e \in \mathcal{D}_\omega / e \in \mathcal{S}_\omega\} = \mathcal{B}_\omega$. Let us examine free states. Let \mathcal{F}_ω be the set of functions $\phi_e = \Psi_k$, with $e > 0$ and momentum $k = \sqrt{e}$, such that

$$\langle \varphi_{k_\omega} | \Psi_k \rangle = 0. \tag{6}$$

Each $\phi_e \in \mathcal{F}_\omega$ reads $\phi_e(x) = \alpha_\eta^\omega F_\eta(kx) + \beta_\eta^\omega G_\eta(kx)$ using (2). Let us define g_f :

$$g_f(x) \equiv \Re(\psi_{\text{dig}}(1+ix)) + 2\gamma_E - \ln|x|,$$

then the scalar products $\langle f_{\eta_1} | F_{\eta_2} \rangle$ and $\langle F_{\eta_1} | G_{\eta_2} \rangle$ calculated in Appendix (see Supplementary Information) read

$$\langle f_{\eta_1} | F_{\eta_2} \rangle = \frac{D_{\eta_1} C_{\eta_2}}{4\eta_2 \Gamma(1+\eta_1)} \times \frac{\lambda^{3/2}}{k_1^2 + k_2^2}; \quad \langle f_{\eta_1} | G_{\eta_2} \rangle = \frac{D_{\eta_1} g_b(\eta_1) - g_f(\eta_2)}{C_{\eta_2} 2\Gamma(1+\eta_1)} \times \frac{\lambda^{3/2}}{k_1^2 + k_2^2}. \tag{7}$$

We define $\zeta_\eta^\omega \equiv \alpha_\eta^\omega / \beta_\eta^\omega$. For $-\eta_1 \notin \mathbb{N}^*$ (non Rydberg states), using (6) with (7), one finds

$$\forall e_1 = -k_1^2 \in \mathcal{S}_\omega \quad \zeta_k^\omega = \frac{2\eta}{C_\eta^2} (g_f(\eta) - g_b(\eta_1)) = \frac{2\eta}{C_\eta^2} (g_f(\eta) - g_b(\eta_\omega)) \text{ using (5)}. \tag{8}$$

For $-\eta_1 \in \mathbb{N}^*$ (Rydberg states), one finds $\langle f_{\eta_1} | F_{\eta_2} \rangle = 0$ and $\langle f_{\eta_1} | G_{\eta_2} \rangle = (-1)^{\eta_1} \frac{\Gamma(-\eta_1) D_{\eta_1} \lambda^{3/2}}{C_{\eta_2} k_1^2 + k_2^2}$ so one must choose $\beta_{k_2} = 0$ and gets $\zeta_{k_2} = \infty$. (8) extends in this case, since $g_b(\eta_\omega) \rightarrow \infty$ when $\eta_\omega \rightarrow -n$ with $n \in \mathbb{N}^*$. (8) implies that Ψ_k is orthogonal to any function $\varphi_{k_1} \in \mathcal{B}_\omega$ as soon as it is orthogonal to φ_{k_ω} . All free eigenfunctions of $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ must belong to \mathcal{F}_ω , so they respect (8); thus, they are all orthogonal to any $\varphi_{k_1} \in \mathcal{B}_\omega(\mathbb{R}_+^*)$; this ends our demonstration.

Conversely, all elements in \mathcal{F}_ω are eigenfunctions of $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$. In that purpose, let us establish the generalized orthonormality of all elements in \mathcal{F}_ω . Let ϕ_{e_1} and ϕ_{e_2} be in \mathcal{F}_ω , with $e_1 \neq e_2$. The scalar products $\langle F_{\eta_1} | F_{\eta_2} \rangle$, $\langle F_{\eta_1} | G_{\eta_2} \rangle$, $\langle G_{\eta_1} | F_{\eta_2} \rangle$ and $\langle G_{\eta_1} | G_{\eta_2} \rangle$, calculated in Appendix (see Supplementary Information) read

$$\begin{aligned} \langle G_{\eta_1} | G_{\eta_2} \rangle &= \frac{\lambda}{C_{\eta_1} C_{\eta_2}} \frac{g_f(\eta_2) - g_f(\eta_1)}{k_1^2 - k_2^2} + \delta(k_1 - k_2); \\ \langle F_{\eta_1} | F_{\eta_2} \rangle &= \delta(k_1 - k_2); \\ \langle F_{\eta_1} | G_{\eta_2} \rangle &= \frac{\lambda C_{\eta_1}}{2\eta_1 C_{\eta_2}} \frac{1}{k_1^2 - k_2^2}. \end{aligned} \tag{9}$$

For $e_1 \neq e_2$, we span the scalar product $\langle \phi_{e_1} | \phi_{e_2} \rangle$ using (2) and (8), which gives

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_{e_1} | \phi_{e_2} \rangle &= \overline{\alpha_{\eta_1}^{\omega}} \alpha_{\eta_2}^{\omega} \langle F_{\eta_1} | F_{\eta_2} \rangle + \overline{\alpha_{\eta_1}^{\omega}} \beta_{\eta_2}^{\omega} \langle F_{\eta_1} | G_{\eta_2} \rangle + \overline{\beta_{\eta_1}^{\omega}} \alpha_{\eta_2}^{\omega} \langle G_{\eta_1} | F_{\eta_2} \rangle + \overline{\beta_{\eta_1}^{\omega}} \beta_{\eta_2}^{\omega} \langle G_{\eta_1} | G_{\eta_2} \rangle \\
 &= \frac{\eta_1^2 \eta_2^2}{\lambda C_{\eta_1} C_{\eta_2}} \frac{\overline{\beta_{\eta_1}^{\omega}} \beta_{\eta_2}^{\omega}}{\eta_1^2 - \eta_2^2} \left(0 - 2\eta_1 (g_f(\eta_1) - g_b(\eta_{\omega})) \frac{2}{\eta_1} + 2\eta_2 (g_f(\eta_2) - g_b(\eta_{\omega})) \frac{2}{\eta_2} - 4(g_f(\eta_2) - g_f(\eta_1)) \right) \\
 &\quad + (|\alpha_{\eta_1}^{\omega}|^2 + |\beta_{\eta_1}^{\omega}|^2) \delta(k_1 - k_2) \\
 &= \delta(k_1 - k_2),
 \end{aligned}$$

where $\overline{\zeta_{\eta_1}} = \zeta_{\eta_1}$ follows (8). ■

We have proved that all bound eigenfunctions of $H_{\omega}(\mathbb{R}_+^*)$ are in \mathcal{B}_{ω} while all free ones are in \mathcal{F}_{ω} . Therefore, we get $\mathcal{D}_{\omega} = \mathcal{B}_{\omega} \cup \mathcal{F}_{\omega}$. We define \tilde{H}_{ω} the restriction of $H(\mathbb{R}_+^*)$ on \mathcal{D}_{ω} . We will prove now that \tilde{H}_{ω} is symmetric, that is $\langle (\tilde{H}_{\omega} \psi) | \varphi \rangle = \langle \psi | (\tilde{H}_{\omega} \varphi) \rangle$ for all $\psi, \varphi \in \mathcal{D}_{\omega}$. Let (e_1, e_2) be such that $\psi = \phi_{e_1}$ and $\varphi = \phi_{e_2}$ (depending on whether ψ belongs to the free or the bound spectrum, either $e_1 \in \mathbb{R}^+$ or $e_1 \in \mathcal{S}_{\omega}$, and idem for φ with e_2). One writes then

$$\langle (\tilde{H}_{\omega} \psi) | \varphi \rangle - \langle \psi | (\tilde{H}_{\omega} \varphi) \rangle = \overline{e_1} \langle \psi | \varphi \rangle - e_2 \langle \psi | \varphi \rangle = (e_1 - e_2) \langle \psi | \varphi \rangle = 0$$

The last equality is proved by discussing whether $e_1 \neq e_2$, so $\psi = \phi_{e_1} \perp \phi_{e_2} = \varphi$, following all previous discussions, or else $e_1 = e_2$. ■

Let us prove that \tilde{H}_{ω} is maximal ad absurdum. Since it is symmetric, it admits a self-adjoint extension K , which is defined on $\mathcal{C} \cup \mathcal{D}_{\omega}$, where \mathcal{C} is some non empty space, by hypothesis. Let us write $K_{\mathcal{C}}$ the restriction of K on \mathcal{C} . Let $\{\phi_i, i \in \mathcal{I}\}$ be a basis of \mathcal{D}_{ω} , and $\{\psi_j, j \in \mathcal{J}\}$ a basis of \mathcal{C} . One writes

$$K | \phi_i \rangle = \tilde{H}_{\omega} | \phi_i \rangle = \sum_{k \in \mathcal{I}} a_i^k | \phi_k \rangle \quad K | \psi_j \rangle = \sum_{k \in \mathcal{I}} b_j^k | \phi_k \rangle + \sum_{l \in \mathcal{J}} c_j^l | \psi_l \rangle.$$

Multiplying the first line by $\langle \psi_j |$ and the second by $\langle \phi_i |$, one gets $b_j^i = 0$, so $\langle \phi_i | \psi_j \rangle = 0 \forall i, j$. K is symmetric, so $\langle \psi_j | K | \psi_j \rangle = \overline{\langle \psi_j | K | \psi_j \rangle}$, which implies $c_j^j = \overline{c_j^j} \forall j$. Eventually, we have established that $K_{\mathcal{C}}$ is symmetric. From standard algebra¹⁷, there exists at least an eigenfunction $\phi_0 \in \mathcal{C}$, and its eigenvalue e_0 is real.

Applying the boundary triples theorem, the function ϕ_0 is a solution of the differential equation $H(\mathbb{R}_+^*) \phi_0(x) = e_0 \phi_0(x)$, with particular boundary conditions. If $e_0 < 0$, one finds immediately that $\phi_0 \in \mathcal{B}_{\omega}$. If $e_0 \geq 0$, one must first write that $\langle \varphi_k | \phi_0 \rangle = 0$ for all k (φ_k are the elements of \mathcal{B}_{ω}); following the previous construction, one eventually finds that $\phi_0 \in \mathcal{F}_{\omega}$. We have proved $\phi_0 \in \mathcal{D}_{\omega}$, which contradicts $\phi_0 \in \mathcal{C}$, so the maximality of \tilde{H}_{ω} is proved. ■

\tilde{H}_{ω} is symmetric and maximal, that is, it is a self-adjoint extension. Furthermore, \tilde{H}_{ω} is simple. Concerning bound states, this results from the elimination of functions proportional to g_{η} . Concerning free states, it follows (8). Now, let ϕ_e be any eigenfunction included in the domain of $H_{\omega}(\mathbb{R}_+^*)$. This domain includes $\phi_{e_{\omega}}$, so ϕ_e must be either orthogonal to $\phi_{e_{\omega}}$ or have eigenvalue e_{ω} . In the first case, ϕ_e belongs to \mathcal{D}_{ω} . In the second case, it is proportional to $\phi_{e_{\omega}}$ (still resulting from the elimination of functions proportional to g_{η}). This proves that the domain of $H_{\omega}(\mathbb{R}_+^*)$ is included in that of \tilde{H}_{ω} , so \tilde{H}_{ω} is an extension of $H_{\omega}(\mathbb{R}_+^*)$. Self-adjoint extensions are maximal, so $\tilde{H}_{\omega} = H_{\omega}(\mathbb{R}_+^*)$, which is therefore completely determinate. ■

Classification in the attractive case. Set \mathcal{S}_{ω} contains the zeros of $\eta \mapsto g_b \left(- \left(\frac{\lambda}{2\eta} \right)^2 \right) - g_b(e_{\omega})$, which we represent for several values of ω in Fig. 1. To characterize each set \mathcal{B}_{ω} , we follow the results in ref. ¹² and define $\tilde{\mathcal{B}}_{\omega} = \{ \varphi_k \in L^2(\mathbb{R}_+^*) / \frac{\partial \varphi_k(x)}{|\lambda| \partial x} + \varphi_k(x) \ln(|\lambda|x) = \omega \varphi_k(x) \}$. This condition differs from the more usual one $\frac{\partial \phi(kx)}{\partial x} = \omega \phi(kx)$. Another possible characterization is given in ref. ¹³. For a given number $\omega \in \mathbb{R}$, we define η_{ω} to be any solution of $g_b(\eta) = -\omega$ (one can chose the highest η , as we will prove further on that this set has a maximum).

Let us prove $\mathcal{B}_{\omega} = \tilde{\mathcal{B}}_{\omega}$. First, we will show that two functions in $\tilde{\mathcal{B}}_{\omega}$ are either proportional or orthogonal. One finds, for non Rydberg eigenfunctions ($-\eta \notin \mathbb{N}^*$),

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial f_{\eta} \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)}{\partial x} &= \frac{\lambda}{2\eta} f_{\eta} \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) \quad \text{so } \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial f_{\eta} \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)}{|\lambda| \partial x} + f_{\eta} \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) \ln(|\lambda|x) = - \frac{g_b(\eta) D_{\eta}}{\Gamma(1 + \eta)} \\
 \text{while } \lim_{x \rightarrow 0} f_{\eta} \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) &= \frac{D_{\eta}}{\Gamma(1 + \eta)} \quad \text{so } \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial f_{\eta} \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)}{|\lambda| \partial x} + f_{\eta} \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) \ln(|\lambda|x)}{f_{\eta} \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)} = - g_b(\eta).
 \end{aligned}$$

Thus, it comes that all elements in $\tilde{\mathcal{B}}_{\omega}$ verify $\omega = -g_b(\eta)$, so, using (5), the proposition is proved, except for Rydberg states such that $-\eta \in \mathbb{N}^*$. For these, the last limit gives ∞ . However, these eigenfunctions are well known and indeed orthogonal (see section ‘Dirichlet solutions’), so the result extends to this case immediately. Conversely, any index η corresponding to $\varphi_k \in \mathcal{B}_{\omega}$ verifies $g_b(\eta) = g_b(\eta_{\omega}) = -\omega$. Eventually, this proves $\tilde{\mathcal{B}}_{\omega} = \mathcal{B}_{\omega}$. ■

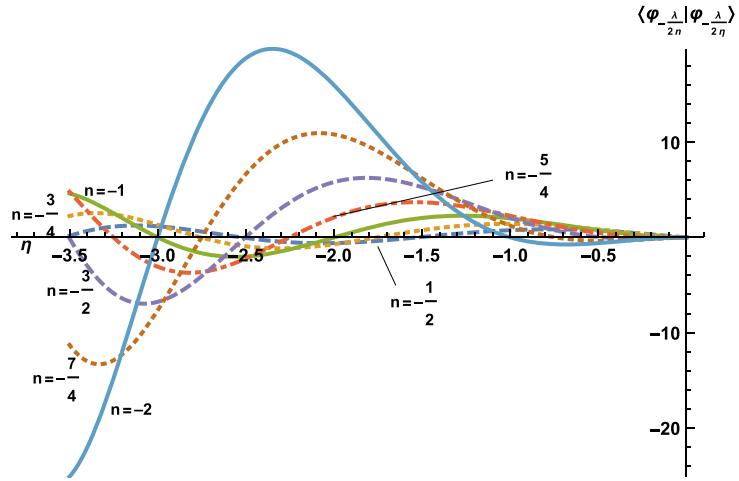


Figure 1. Here are the curves $\eta \mapsto \langle \varphi_{\frac{\lambda}{2n}} | \varphi_{\frac{\lambda}{2\eta}} \rangle$, for $n = -1/2$ (dashed line), $n = -3/4$ (dotted line), $n = -1$ (plain line), $n = -5/4$ (dot-dashed line), $n = -3/2$ (dashed line), $n = -7/4$ (dotted line) and $n = -2$ (plain line). The zeros of each curve read $\eta = \frac{\lambda}{2\sqrt{-e}}$ where $e \in \mathcal{S}_\omega$, with $\omega = -g_b(n)$, as explained further on. The curves seem to form pairs corresponding to $(n, n + 1)$, in particular, one could believe that each pair intersects on the η -axis (abscissa), but this is wrong, except for $(n, n + 1) = (-2, -1)$ which correspond to the same Rydberg set \mathcal{S}_∞ . All the other intersections are only close to zero, so that, indeed, $\mathcal{S}_{-g_b(n)} \neq \mathcal{S}_{-g_b(n+1)}$. $\eta = n$ is missing, because $\langle \varphi_{\frac{\lambda}{2n}} | \varphi_{\frac{\lambda}{2n}} \rangle \neq 0$.

Let's define $\tilde{\mathcal{F}}_\omega = \{ \Psi_k \in L^\infty(\mathbb{R}_+^*) / \frac{\partial \Psi_k(x)}{|\lambda| \partial x} + \Psi_k(x) \ln(|\lambda|x) = \omega \Psi_k(x) \}$. We will prove now that $\tilde{\mathcal{F}}_\omega = \mathcal{F}_\omega$. We first show $\mathcal{F} \subset \tilde{\mathcal{F}}_\omega$. One finds

$$\lim_{x \rightarrow 0} \lim_{\eta \rightarrow 0} F_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) = 0; \quad \lim_{x \rightarrow 0} F_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) \ln(|\lambda|x) = 0; \quad \frac{\partial F_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)}{|\lambda| \partial x} = \frac{C_\eta}{2\eta}$$

$$\text{the } n \lim_{x \rightarrow 0} G_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) = \frac{1}{C_\eta} \quad \text{and} \quad \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial G_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)}{|\lambda| \partial x} + G_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) \ln(|\lambda|x) = -\frac{g_f(\eta)}{C_\eta};$$

so, considering any $\phi_e(x) = \alpha_k^\omega F_\eta(kx) + \beta_k^\omega G_\eta(kx) \in \tilde{\mathcal{F}}_\omega$ with $\beta_k^\omega \neq 0$, one gets

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\alpha_k^\omega \frac{\partial F_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)}{|\lambda| \partial x} + \beta_k^\omega \frac{\partial G_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)}{|\lambda| \partial x}}{\alpha_k^\omega F_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) + \beta_k^\omega G_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)} + \ln(|\lambda|x) = \zeta_k^\omega \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial F_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)}{|\lambda| \partial x}}{G_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)} + \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial G_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)}{|\lambda| \partial x}}{G_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)} + \ln(|\lambda|x)$$

$$= 2\eta(g_f(\eta) - g_b(\eta_\omega)) \frac{1}{2\eta} - g_f(\eta) = -g_b(\eta_\omega).$$

while, for $\beta_k^\omega = 0$, which corresponds to Rydberg states, one gets

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial F_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)}{|\lambda| \partial x} + F_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) \ln(|\lambda|x)}{F_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right)} = \infty.$$

This proves exactly that ϕ_e belongs to $\tilde{\mathcal{F}}_\omega$. Reversely, let us show that any element $\phi_e \in \tilde{\mathcal{F}}_\omega$ belongs to \mathcal{F}_ω . Using (2), one writes $\phi_e = \alpha_k F_\eta + \beta_k G_\eta$. Then, from the definition of $\tilde{\mathcal{F}}_\omega$, one gets

$$\alpha_k \frac{C_\eta}{2\eta} - \beta_k \frac{g_f(\eta)}{C_\eta} = \beta_k \frac{\omega}{C_\eta} \Leftrightarrow \begin{cases} \text{if } \beta_k \neq 0 & \zeta_k = \frac{2\eta}{C_\eta} (\omega + g_f(\eta)); \\ \text{if } \beta_k = 0 & \zeta_k = \infty; \end{cases}$$

and the scalar product $\langle \varphi_{\eta_\omega} | \phi_e \rangle$ reads

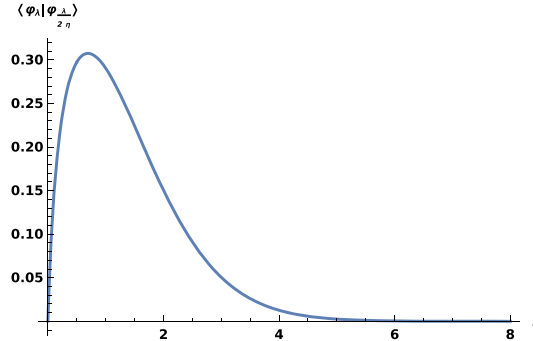


Figure 2. $\langle \varphi_\lambda | \varphi_{\lambda/2\eta} \rangle$ versus η in the repulsive case; the choice $\eta_1 = \frac{1}{2}$ is arbitrary, curves obtained for other values are similar.

$$\langle \varphi_{\eta_\omega} | \phi_e \rangle = \alpha_k \langle \varphi_{\eta_\omega} | F_\eta \rangle + \beta_k \langle \varphi_{\eta_\omega} | G_\eta \rangle = \frac{\mu_{k_\omega} \lambda^{3/2}}{2(k_\omega^2 + k^2) \Gamma(1 + \eta_\omega)} \left(\frac{\alpha_k C_\eta}{2\eta} + \frac{\beta_k}{C_\eta} (-\omega - g_f(\eta)) \right) = 0$$

so $\phi_e \in \mathcal{F}_\omega$. The case $\beta_k = 0$ corresponds to the Rydberg one, $\zeta_k = \infty = \omega$, and $|\varphi_{\eta_\omega}\rangle$ is orthogonal to all states in \mathcal{F}_∞ .

Our classification is coherent with that of ref. ¹², all self-adjoint extensions of $H(\mathbb{R}_+^*)$ are classified by $\omega \in \mathbb{R}$. The topology of the parameter space is studied in section ‘Structure for $\mathbb{D} = \mathbb{R}_+^*$ in the repulsive case’.

Classification in the repulsive case. We now consider the repulsive case. The physical situation is very different to the previous one, for instance, one observes that there is no Rydberg state, that is no eigenfunction obeying $\phi_e(0) = 0$, however many steps of the calculations are similar, so we will only point out the differences.

Keeping the definition of g_b with $\eta > 0$, one finds (4) with the opposite sign. Then, (5) has no solutions, but the existence of a bound state will hold in the repulsive case, which means that it is a unique bound state. This is true for all ω , see for instance Fig. 2, and confirmed by the bijectivity of $\eta \mapsto \omega(\eta)$, as one observes on Fig. 3. However, (8) extends in the repulsive case, where η_ω stands for the unique bound state in $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ and the sign is also changed.

In the free spectrum, a similar sign difference occurs:

$$\langle G_{\eta_1} | G_{\eta_2} \rangle = \frac{\lambda}{C_{\eta_1} C_{\eta_2}} \frac{g_f(\eta_1) - g_f(\eta_2)}{k_1^2 - k_2^2} + \delta(k_1 - k_2),$$

where the definition of g_f is unchanged. The scalar product expression $\langle G_{\eta_1} | F_{\eta_2} \rangle$ is unchanged but mind that its real sign is also changed after that of η . Eventually, the demonstration that all functions in \mathcal{F}_ω respect $\langle \Phi_{e_1} | \Phi_{e_2} \rangle = 0$ holds, and, consequently, the determination of $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ is formally identical.

The characterization of \mathcal{F}_ω is performed with index

$$\omega(\eta) = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\frac{\partial \phi_e(\frac{\lambda x}{2\eta})}{\lambda \partial x} - \phi_e(\frac{\lambda x}{2\eta}) \ln(\lambda x)}{\phi_e(\frac{\lambda x}{2\eta})}$$

(note the sign difference). With this new definition, index $\omega(\eta)$ has the same expression than in the attractive case. The demonstration is straight forward for the bound states; for free ones, one finds

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\partial G_\eta(\frac{\lambda x}{2\eta})}{\lambda \partial x} - G_\eta(\frac{\lambda x}{2\eta}) \ln(\lambda x) = \frac{g_f(\eta)}{C_\eta} \text{ and } \lim_{x \rightarrow 0} G_\eta(\frac{\lambda x}{2\eta}) = -\frac{1}{C_\eta};$$

the expression obtained for F_η are unchanged, but mind that the real sign is changed after that of η . Eventually, there is no sign change for index $\omega(\eta)$ in all cases. We plot this function in Fig. 3 and observe another major difference: it maps \mathbb{R}_+^* on $[-\infty, 2\gamma_E]$. As a consequence, ω is bounded from above. The particular value $\omega = 2\gamma_E$ brings a very peculiar situation and must be studied elsewhere.

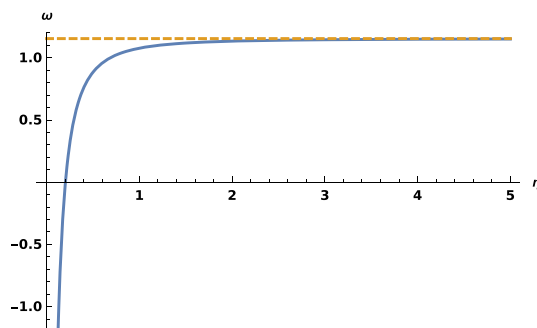


Figure 3. ω versus η in the repulsive case. The asymptote $\omega = 2\gamma_E$ is drawn with a dashed line.

Existence of a bound state. The classification of self-adjoint extensions of $H(\mathbb{R}_+^*)$ is achieved, except that we did not prove the existence of a bound eigenstate $|\varphi_{k_\omega}\rangle$ of $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ associated to the eigenvalue $e_\omega \leq 0$ in both attractive and repulsive cases.

We suppose ad absurdum that the spectrum is included in \mathbb{R}_+ . We consider two eigenfunctions Ψ_{k_1} and Ψ_{k_2} . We can choose momenta $k_1 \neq k_2$, otherwise $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ would only act on functions F_{η_1} and G_{η_1} , which norm are infinite; no integrable function could be constructed and this extension would not be physical. The same argument holds if there is only one eigenfunction.

Using (2) and (9), one gets

$$\langle \Psi_{k_1} | \Psi_{k_2} \rangle = \frac{\lambda}{k_1^2 - k_2^2} \left(-\frac{C_{\eta_1} \overline{\alpha_{k_1}} \beta_{k_2}}{2\eta_1 C_{\eta_2}} + \frac{C_{\eta_2} \alpha_{k_2} \overline{\beta_{k_1}}}{2\eta_2 C_{\eta_1}} + \frac{\overline{\beta_{k_1}} \beta_{k_2} (g_f(\eta_1) - g_f(\eta_2))}{C_{\eta_1} C_{\eta_2}} \right) = 0.$$

If $\beta_{k_1} = 0$ and $\beta_{k_2} \neq 0$, one gets $\alpha_{k_1} = 0$, which is impossible since $\Psi_{k_1} \neq 0$. So, either both β_{k_i} are zero, or both are different from zero. In the first case, this property extends to all free states, which are therefore all Rydberg free ones; thus, $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ can extend on all standard Rydberg solutions, including bound ones, which contradicts our hypothesis.

The remaining case leads to $\beta_{k_i} \neq 0 \forall i = 1, 2$, which means that momenta k_i correspond to non Rydberg states. Multiplying by $\frac{C_{\eta_1} C_{\eta_2}}{\beta_{k_1} \beta_{k_2}}$, one gets

$$-\frac{C_{\eta_1}^2 \overline{\zeta_{k_1}}}{2\eta_1} + \frac{C_{\eta_2}^2 \zeta_{k_2}}{2\eta_2} + g_f(\eta_1) - g_f(\eta_2) = 0. \tag{10}$$

One can assume β_{k_i} real, without loss of generality. Let us define the real and purely imaginary parts of eigenstates $\Psi_{k_i}, \Psi_{k_i}^r = \Re(\Psi_{k_i})$ and $\Psi_{k_i}^i = \Im(\Psi_{k_i})$. Since (1) is real, both $\Psi_{k_i}^r$ and $\Psi_{k_i}^i$ are eigenfunctions associated to the same momentum k_i . By construction (β_{k_i} real), $\Psi_{k_i}^i \propto F_{\eta_i}$, which corresponds to a Rydberg state (because $g_b\left(\frac{\lambda}{2k}\right) = \infty$, cf. section ‘Classification in the attractive case’, in which this item holds both for repulsive or attractive case) and is contradictory, unless $\Psi_{k_i}^i = 0$. Altogether, this implies that ζ_{k_i} is real $\forall i = 1, 2$. Eventually, one gets

$$\frac{C_{\eta_1}^2 \zeta_{k_1}}{2\eta_1} - g_f(\eta_1) = \frac{C_{\eta_2}^2 \zeta_{k_2}}{2\eta_2} - g_f(\eta_2), \tag{11}$$

so $\frac{C_{\eta_i}^2 \zeta_{k_i}}{2\eta_i} - g_f(\eta_i)$ is a real constant, which we write ϖ . From the classifications above, one observes that all functions Ψ_{k_i} are eigenfunctions of $H_{\varpi}(\mathbb{R}_+^*)$, which proves an extension of $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ and therefore contains bound eigenstates. We have reached a contradiction. In all cases, we have shown that there is at least one bound state. ■

In the repulsive case, it is the only one. In the attractive case, they are infinitely many; let us study that of highest energy.

Maximum of \mathcal{S}_ω . For the attractive case, $\eta < 0$, so one is interested in the maximal value $\eta_{\omega, \max}$ corresponding to the maximum of \mathcal{S}_ω . There exists such a maximum, this is visible on Fig. 4, which is a close focus of Fig. 1 in the interval $[-\frac{1}{2}, 0]$. To be more precise, the slope of curve $\eta \mapsto \langle \varphi_{\frac{\lambda}{2n}} | \varphi_{\frac{\lambda}{2n}} \rangle$ at $\eta = 0$ reads $\frac{2}{\Gamma(n)}$, which indicates that the curves corresponding to Rydberg eigenstates, $-n \in \mathbb{N}^*$, are flat, while the sign of the slope of the other curves is positive for $[n]_+$ even and negative for $[n]_+$ odd. Therefore, the maximal $\eta < 0$, related to an energy $e \in \mathcal{S}_\omega$ is the first zero from the right. The only difficult case would be that of the flat curves; these however correspond to the standard Rydberg solutions $n \in -\mathbb{N}^*$, the maximal value of which is indeed -1 . ■

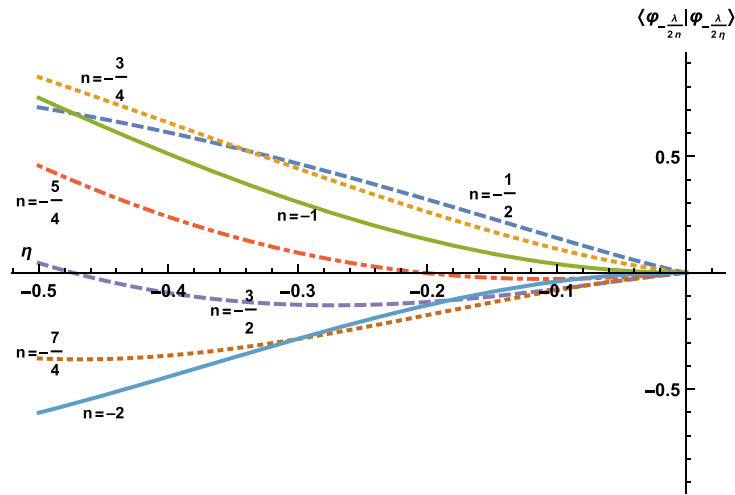


Figure 4. Here is a zoom of Fig. 1 in the interval $[-\frac{1}{2}, 0]$.

Infinite energy state. In what precedes we exclude value $\eta = 0$. Limit $\eta \rightarrow 0$ of eigenfunctions corresponding to bound states reads $f_0(u) = e^{-u}$, but using rescaled $\varphi_k(x) = f_j(kx)$ and renormalizing by D_η , one gets

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^\pm} \left(f_\eta \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) \right) = 0$$

for all $x \in \mathbb{R}_+^*$ but not for $x = 0$ ($\pm = +$ in the repulsive case, $\pm = -$ in the attractive one). The so called infinite energy $-\infty$ would correspond to a singular distribution with $\{0\}$ support. Looking for such a solution, one substitutes $\varphi_0 = \sum_{n=0}^\infty a_n \delta^{(n)}$ in (1). In the $\eta = 0$ limit, all coefficients a_n are found zero, which definitely discards such solution.

The limit $\eta \rightarrow 0$ of eigenfunctions corresponding to free states reads $F_0(x) = \sin(x)$ and $G_0(x) = \cos(x)$. Using rescaled $\Phi_0(x) = \alpha_\eta F_0(kx) + \beta_\eta G_0(kx)$ (but no renormalization is needed, since the limit of C_η is 1), one gets

$$\lim_{\eta \rightarrow \infty} F_{\pm\eta} \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) = 0 \text{ and } \lim_{\eta \rightarrow \infty} G_{\pm\eta} \left(\frac{\lambda x}{2\eta} \right) = 1.$$

The first is zero so the limit of eigenfunctions when $e \rightarrow +\infty$ is the constant function $\Psi(x) = 1$.

Eventually, we should compare these limits to the solutions of (1), where η is replaced by 0. They read $\phi_\infty(x) = ax + b$, but $a \neq 0$ gives divergent non physical functions, so, up to an arbitrary phase, one finds $b = 1$, which is the $e \rightarrow +\infty$ limit. ■

Incidentally, we are in position to discuss the long-standing claim¹ of a solution $|\phi_\infty\rangle$ with energy $-\infty$: we see that this solution does not exist, putting an end to this old story.

Discussion of some particular cases. Dirichlet solutions. We consider the attractive case. When $\omega \rightarrow \pm\infty$, one gets the Dirichlet condition $\phi_\pm(0) = 0$. For bound states, this can be shown by examining the limit $\varphi_k(0^\pm) = D_\eta \Gamma(1 + \eta)$, which we give in section ‘Classification in the attractive case’ and which is also valid in the repulsive case. For free states, this follows, firstly, from the fact that $\zeta_k \rightarrow \infty$, as shown in the same section, which implies $\beta_k \rightarrow 0$ so $\phi_\pm \propto F_\eta$, secondly from the limit $F_\eta(0^\pm) = 0$, still proved in that section. Then, the corresponding values of \mathcal{L}_∞ are exactly $-\lambda^2/(4n^2)$, for all $n \in \mathbb{N}^*$, which is the standard Rydberg spectrum (in dimensionless unit). Moreover, the function $\eta \mapsto \omega(\eta) = -g_\pm(\eta)$ respects $\omega(\eta + 1) = \omega(\eta)$ for all $\eta = -n$ with $n \in \mathbb{N}^*$ and only for these values.

In the repulsive case, one must recall that there is no Rydberg state, even in the limit $\omega \rightarrow -\infty$, so this discussion is not relevant for this case.

Neumann solutions. The case $\omega = 0$ will be called the Neumann solutions, because the finite part¹⁸ of $\phi_\pm' \in \mathcal{D}_0$, where the essential divergent function $\ln(kx)$ is left aside, is exactly zero at $x = 0$. These functions are very close to the anomalous solutions of ref. ¹¹, however those do not belong to a single extension: they are proportional to G_η in the free spectrum and correspond to $\zeta_k = 0$. We have shown previously that $\zeta_k = \frac{2\eta}{C_\eta^2} (g_f(\eta) - g_b(\eta))$, which zeros are not exactly periodic, on the contrary, each one belongs to a different extension. The very small difference between any such anomalous state and the closest Neumann one explains the small violation of orthogonality that

was calculated¹¹ (when $\eta \rightarrow \infty$, the difference between Neumann and anomalous solutions tends to zero, as well as the scalar products between anomalous solutions).

As is well understood now, the correct choice is to consider functions in \mathcal{B}_0 . On the contrary, it is not physical to consider any two anomalous states together¹⁹, because they do not belong to the same self-adjoint extension.

Physical interpretation of ω . We did not give any physical interpretation of ω yet. It is the limit of the ratio $\frac{\partial \phi(x)}{|\lambda| \partial x} / \phi(x)$ between the derivative of the wavefunction and the wavefunction itself when $x \rightarrow 0$, **after subtracting the divergent term $\pm \ln(|\lambda|x)$** ($\pm = +$ when the potential is attractive, $\pm = -$ when it is repulsive).

This ratio relates to the initial condition that one fixes at $x = 0$ when solving Schrödinger equation $H\phi = E\phi$. An infinite ratio corresponds to choosing Dirichlet conditions, a zero ratio to Neumann ones, and any finite value in-between means fixing an intermediate condition, that mixes ϕ and ϕ' .

Solutions of zero energy. Writing \mathbb{R}_λ , we have indicated that 0 must be included in the free spectrum. This is worth giving some details.

The solutions of (1) for $e = 0$ and $\lambda < 0$ read

$$\Psi_0(x) = \alpha j(x) + \beta y(x); \quad j(x) = \sqrt{|\lambda|x} J_1(2\sqrt{|\lambda|x}); \quad y(x) = \sqrt{|\lambda|x} Y_1(2\sqrt{|\lambda|x}),$$

where J_1 and Y_1 are Bessel functions of, respectively, the first and second kind. That for $\lambda > 0$ read

$$\Psi_0(x) = \alpha \iota(x) + \beta \kappa(x); \quad \iota(x) = \sqrt{|\lambda|x} i_1(2\sqrt{|\lambda|x}); \quad \kappa(x) = \sqrt{|\lambda|x} K_1(2\sqrt{|\lambda|x}),$$

where I_1 and K_1 are modified Bessel functions of, respectively, the first and second kind.

We have extended the notations we use for free states, because these solutions are indeed the limit of those ones, $j \propto F_{-\infty}$, $y \propto G_{-\infty}$, $\iota \propto F_\infty$ and $\kappa \propto G_\infty$. The attractive case $\eta < 0$ brings nothing special, solutions j and y have the standard properties of the eigenfunctions corresponding to free states; one may say that this limit is regular.

On the contrary, the repulsive case $\eta > 0$ is extraordinary. Instead of heavy mathematical considerations, let us explain the situation by hand. When one looks at the curves of functions $x \mapsto F_\eta(x)$ and $x \mapsto G_\eta(x)$, for increasing η , one observes that there are two regions $x \in [0, x_\eta]$ and $x \in [x_\eta, \infty[$, where x_η is a separating parameter which we do not care to define properly here. In region $[0, x_\eta]$, F_η resembles eigenfunction g_η (in other words, it grows considerably, as if it were diverging) and G_η resembles eigenfunction f_η (in other words, it becomes exponentially small). But, as these functions reach x_η , they rapidly change shape and behave like those corresponding to standard free states (bounded and oscillating).

This peculiar behavior, resembling bound states in a first region then free ones afterwards, reaches its climax when $\eta \rightarrow \infty$, where $x_\eta \rightarrow \infty$: indeed, solution ι is diverging, while $\kappa \in L^1(\mathbb{R}_+^*) \cap L^2(\mathbb{R}_+^*)$. In this very case, F_∞ must be discarded and the scalar products between G_∞ and eigenfunctions f_η reads

$$\langle \kappa | f_\eta \rangle = \frac{2\eta D_\eta}{\Gamma(1 + \eta)} (1 + 2\eta(\ln(\eta) - \Gamma(1 + \eta)))$$

and is non zero, as observed on Fig. 5. The orthogonal combination of eigenfunctions F_η and G_η is governed by ratio

$$\frac{\alpha_\eta^\infty}{\beta_\eta^\infty} = \frac{2\eta}{C_\eta^2} (\Re(\Gamma(1 - i\eta)) - \ln(\eta)).$$

Our guess is that, in the repulsive case, a singular contribution $\delta(E)$ appears in the density of states, contrary to the situation of the attractive case. This belief is founded by the existence of a bound eigenstate, to which corresponds an integrable function, with eigenvalue $e = 0$.

Eventually, one is interested in the corresponding value of index $\omega(\infty)$. One finds $\omega(\infty) = 2\gamma_E$. Moreover, the limit of regular bound eigenfunction φ_e , when $\eta \rightarrow \infty$, does not exist, so there is exactly one bound eigenstate of energy $e = 0$ corresponding to $\omega(\infty) = 2\gamma_E$, which is exactly that proportional to κ .

The real line problem

We discuss here the attractive case for $\mathbb{D} = \mathbb{R}$. We should point out that there was no need to use of any physical constraint in the previous cases, except when we have discarded the hypothesis of a unique energy $e > 0$ or that with only two energies $e_1 > e_2 > 0$. On the contrary, our determination of self-adjoint extensions for $\mathbb{D} = \mathbb{R}$ is much more involved with physical laws. Our aim is to classify self-adjoint extensions that are compatible with physical constraints.

We note ϕ_e eigenfunctions defined on \mathbb{D} , $\phi_e^>$ their restriction on \mathbb{R}_+^* and $\phi_e^<$ that on \mathbb{R}_-^* . $\phi_e^>$ obeys (1), while $\phi_e^<$ obeys

$$-\frac{\partial^2 \phi_e^<(x)}{\partial x^2} - \frac{\lambda}{x} \phi_e^<(x) = e \phi_e^<(x) \quad \forall x < 0. \tag{12}$$

The continuity of all functions ϕ_e as well as their derivatives is easily verified for all $x \neq 0$ from (1) and (12). The only difficulty lies at $x = 0$. Let us define the self-adjoint extensions of $H(\mathbb{R})$.

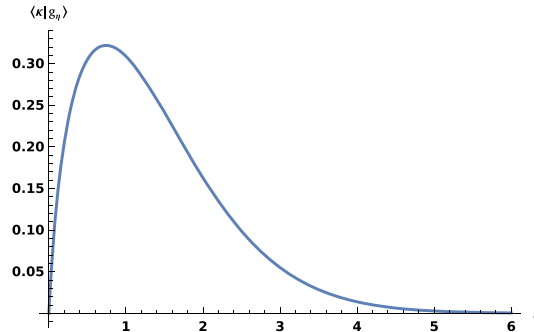


Figure 5. $\langle \kappa \# \chi_{2223} g_\eta \rangle$ versus η .

Self-adjoint extensions. The mathematical classification of all self-adjoint extensions, for $\mathbb{D} = \mathbb{R}$, has already been done¹² but no effort has been made yet to interpret these from a physical point of view. We want to select, among all extensions, only those, the eigenfunctions of which describe physical states.

Usually, authors impose continuous boundary conditions for all wavefunctions and their derivative^{20–23} but these conditions reveal often too restrictive and other boundary conditions have been suggested^{24,25}. So, we choose weaker and universal constraints, which are compatible with any of these conditions and fit with all experimental observations: the density of probability cannot vary discontinuously, therefore $\rho = |\phi|^2$ must be continuous. ρ also obeys the conservation of probability law (14). This implies eventually that dj/dx be defined at all $x \in \mathbb{R}$.

We introduce boundary condition $\mathcal{C}(\theta)$:

$$\left. \begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\phi(\varepsilon) - e^{i\theta} \phi(-\varepsilon)) &= 0; \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\phi'(\varepsilon)\phi(-\varepsilon) - e^{i\theta} \phi'(-\varepsilon)\phi(\varepsilon)) &= 0; \end{aligned} \right\} \theta \in [0, 2\pi[;$$

we will find that physical states do respect conditions $\mathcal{C}(\theta)$. We will therefore construct self-adjoint extensions, with these boundary conditions. More precisely, we will show that there are at maximum two values θ_1 and θ_2 , such that eigenfunctions obey $\mathcal{C}(\theta_i)$, with $i = 1, 2$.

As for $D = \mathbb{R}_+^*$, we will admit the existence of self-adjoint extensions and construct them as maximal symmetric operators. We write them $H_\varpi(\mathbb{R})$, where ϖ is a symbolic parameter, the meaning of which we will clarify further on. We write \mathcal{B}_ϖ the set of eigenfunctions in the bound spectrum, \mathcal{F}_ϖ that of eigenfunctions in the free spectrum, $\mathcal{D}_\varpi = \mathcal{B}_\varpi \cup \mathcal{F}_\varpi$ and \mathcal{L}_ϖ the corresponding bound spectrum.

Continuity of probability. Let ϕ_ε be an eigenfunction of self-adjoint extension $H_\varpi(\mathbb{R})$. We will first use the continuity of $\rho(x) = |\phi_\varepsilon(x)|^2$.

One put apart the case when $\phi_\varepsilon(0^+) = 0$ or $\phi_\varepsilon(0^-) = 0$. Indeed, the only eigenfunctions which have such limit are the Rydberg ones. In such case, the continuity of ρ gives $\phi_\varepsilon(0^+) = \phi_\varepsilon(0^-) = 0$ and ϕ_ε is eventually continuous on \mathbb{R} .

We recall that *non Rydberg* functions do not cancel at $x = 0$. For such functions, the continuity of ρ implies $|\phi_\varepsilon(0^-)| = |\phi_\varepsilon(0^+)| \Leftrightarrow \phi_\varepsilon(0^-) = e^{i\theta} \phi_\varepsilon(0^+)$ with $\theta \in [0, 2\pi[$.

Let ϕ_{e_1} and $\phi_{e_2} \in \mathcal{D}_\varpi$ be two independent eigenfunctions, $\phi_{e_1}(0^-) = e^{i\theta_1} \phi_{e_1}(0^+)$ and $\phi_{e_2}(0^-) = e^{i\theta_2} \phi_{e_2}(0^+)$. $|\phi_{e_1}\rangle$ and $|\phi_{e_2}\rangle$ are eigenstates of hermitian operator $H_\varpi(\mathbb{R})$, their combination is physical; one can consider state $|\psi\rangle = \alpha |\phi_{e_1}\rangle + \beta e^{i\zeta} |\phi_{e_2}\rangle$ with arbitrary coefficients $(\alpha, \beta) \in \mathbb{R}^2$ and $\zeta \in [0, 2\pi[$. The evolution in time of $|\psi\rangle$ is given by

$$|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-i\frac{e_1 \hbar t}{2m}} |\phi_{e_1}\rangle + \beta e^{i\zeta} e^{-i\frac{e_2 \hbar t}{2m}} |\phi_{e_2}\rangle.$$

$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ represents a density of probability and must be continuous with respect to x at all times. One finds

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= |\alpha|^2 |\phi_{e_1}(x)|^2 + |\beta|^2 |\phi_{e_2}(x)|^2 + 2\alpha\beta \Re [\overline{\phi_{e_1}(x)} \phi_{e_2}(x)] \cos \left[\frac{(e_1 - e_2) \hbar t}{2m} + \zeta \right] \\ &\quad - 2\alpha\beta \Im [\overline{\phi_{e_1}(x)} \phi_{e_2}(x)] \sin \left[\frac{(e_1 - e_2) \hbar t}{2m} + \zeta \right]. \end{aligned}$$

The continuity of $x \mapsto \rho(x, t)$, valid for all α, β, ζ and t , implies that of $\Re(\overline{\phi_{e_1}} \phi_{e_2})$ and $\Im(\overline{\phi_{e_1}} \phi_{e_2})$; so one gets

$$\overline{\phi_{e_1}(0^+)}\phi_{e_2}(0^+) = \overline{\phi_{e_1}(0^-)}\phi_{e_2}(0^-).$$

If one of $\{\phi_{e_1}, \phi_{e_2}\}$ is Rydberg and cancels at $x = 0$, this relation is always true. If they are both non Rydberg, it reads $e^{i(\theta_1 - \theta_2)} = 1 \Leftrightarrow \theta_1 = \theta_2(2\pi)$, where (2π) means modulo 2π .

Eventually, we have proved the existence of $\theta_{\omega} \in [0, 2\pi]$ such that, for all non Rydberg eigenfunctions,

$$\phi_e(0^-) = e^{i\theta_{\omega}}\phi_e(0^+). \tag{13}$$

θ -symmetry. We still consider $H_{\omega}(\mathbb{R})$. We still assume there exists a non Rydberg eigenfunction ϕ_e in the bound spectrum ($e < 0$). From (3), one can write $\phi_e^> = \mu_k^+ f_{\eta}$ and $\phi_e^< = \mu_k^- \overline{f_{\eta}}$, where the transposition is defined by $\widehat{\varphi}(x) = \varphi(-x)$. Then, (13) implies $\mu_k^- = e^{i\theta_{\omega}}\mu_k^+$. Thus, ϕ_e is said to be θ_{ω} -symmetrical, where θ -symmetry is also written $\mathcal{R}(\theta)$ and defined by

$$\mathcal{R}(\theta): \quad \phi_e = \phi_e^> + e^{i\theta}\widehat{\phi_e^>}.$$

We assume now that there are two or more non Rydberg eigenfunctions in the bound spectrum, let us write them φ_{k_1} and φ_{k_2} . Note that $\varphi_{k_1} \propto \varphi_{k_2} \Leftrightarrow \varphi_{k_1}^> \propto \varphi_{k_2}^>$ (where $\varphi_k^>$ is the restriction on \mathbb{R}_+^*). Their scalar product reads

$$\langle \varphi_{k_1} | \varphi_{k_2} \rangle = 2 \langle \varphi_{k_1}^> | \varphi_{k_2}^> \rangle.$$

When they are not proportional, φ_{k_1} and φ_{k_2} can be eigenfunctions of the same $H_{\omega}(\mathbb{R})$ only if $\varphi_{k_1}^>$ and $\varphi_{k_2}^>$, their restriction on \mathbb{R}_+^* , are orthogonal each other. From part ‘Self-adjoint extensions in the \mathbb{R}_+^* case’, we get $\omega(\eta_1) = \omega(\eta_2)$. Let us call ω_{ω} this constant. Altogether, we have established the existence of parameters ω_{ω} and θ_{ω} , such that all non Rydberg eigenfunctions ϕ_e in the bound spectrum, obey $\mathcal{R}(\theta_{\omega})$ and $g_b(\eta) = -\omega_{\omega}$, with $\eta = \lambda/(2\sqrt{-e})$, so $\phi_e^> = \varphi_k^> \in \mathcal{B}_{\omega_{\omega}}$.

We will examine now the situation, where there is also a Rydberg eigenstate in the domain of $H_{\omega}(\mathbb{R})$, and prove that this Rydberg states has the opposite symmetry to the non Rydberg one, in the following sense. Consider $\phi_{e_1} \in \mathcal{B}_{\omega_{\omega}}$, with $\phi_{e_1}(0) \neq 0$, and $\phi_{e_2} \in \mathcal{D}_{\omega_{\omega}}$, with $\phi_{e_2}(0) = 0$. ϕ_{e_1} obeys $\mathcal{R}(\theta_{\omega})$, which reads $\phi_{e_1}^< = e^{i\theta_{\omega}}\phi_{e_1}^>$. One can expand ϕ_{e_2} into a θ_{ω} -symmetrical and a $\theta_{\omega} + \pi$ -symmetrical parts, $\phi_{e_2} = \phi_{e_2}^{\theta_{\omega}} + \phi_{e_2}^{\theta_{\omega} + \pi}$, as demonstrated in Appendix (see Supplementary Information). Then, one finds $\phi_{e_2}^{\theta_{\omega}} = 0$, writing

$$0 = \langle \phi_{e_1} | \phi_{e_2} \rangle = \langle \phi_{e_1} | \phi_{e_2}^{\theta_{\omega}} \rangle + \underbrace{\langle \phi_{e_1} | \phi_{e_2}^{\theta_{\omega} + \pi} \rangle}_{=0} = 2 \langle \phi_{e_1}^> | \phi_{e_2}^{\theta_{\omega} + \pi} \rangle$$

(the second term is zero by symmetry, cf. appendix) so $\phi_{e_2}^{\theta_{\omega} + \pi}$ is orthogonal to $\phi_{e_1}^>$, which is impossible, since $\phi_{e_1}^> \in \mathcal{D}_{\omega_{\omega}}$ and $\phi_{e_2}^{\theta_{\omega} + \pi} \in \mathcal{D}_{\infty}$ because it is a Rydberg eigenfunction, unless $\phi_{e_2}^{\theta_{\omega} + \pi} = 0$. This proves that $\phi_{e_2}^{\theta_{\omega}} = 0$ so ϕ_{e_2} obeys $\mathcal{R}(\theta_{\omega} + \pi)$.

Let us examine now free states. We consider a non Rydberg eigenfunction ϕ_e with $e > 0$. We will find that ϕ_e obeys $\mathcal{R}(\theta_{\omega})$ and that $\phi_e^> = \Psi_k^> \in \mathcal{F}_{\omega_{\omega}}$, but the demonstration is more involved and relies also on the current continuity. To begin with, following (2), one can write $\phi_e^> = \alpha_k^+ F_{\eta} + \beta_k^+ G_{\eta}$ and $\phi_e^< = \alpha_k^- \overline{F_{\eta}} + \beta_k^- \overline{G_{\eta}}$. Applying (13), one gets $\beta_k^- = e^{i\theta_{\omega}}\beta_k^+$.

Conservation of current. We still consider $H_{\omega}(\mathbb{R})$ and two independent eigenfunctions ϕ_{e_1} and ϕ_{e_2} in the domain of $H_{\omega}(\mathbb{R})$ and calculate the current associated to the mixed state $|\psi(t)\rangle$ defined in section ‘Continuity of probability’. It becomes, after some calculation,

$$\begin{aligned} \mathbf{j} = & \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 + \frac{\hbar\alpha\beta}{m} \Re \left[\frac{\partial\phi_{e_2}}{\partial x}(x) - \phi_{e_2}(x) \frac{\partial\overline{\phi_{e_1}}}{\partial x}(x) \right] \times \sin \left[\frac{(e_1 - e_2)\hbar t}{2m} + \zeta \right] \\ & + \frac{\hbar\alpha\beta}{m} \Im \left[\frac{\partial\phi_{e_2}}{\partial x}(x) - \phi_{e_2}(x) \frac{\partial\overline{\phi_{e_1}}}{\partial x}(x) \right] \times \cos \left[\frac{(e_1 - e_2)\hbar t}{2m} + \zeta \right], \end{aligned}$$

where \mathbf{j}_1 and \mathbf{j}_2 are constant. The conservation of probability law

$$\frac{\partial\mathbf{j}}{\partial x} + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0 \tag{14}$$

applies independently on the sinus and cosine terms, so it eventually reads

$$\overline{\phi_{e_1}(x)} \frac{\partial^2\phi_{e_2}}{\partial x^2}(x) - \phi_{e_2}(x) \frac{\partial^2\overline{\phi_{e_1}}}{\partial x^2}(x) + (e_2 - e_1) \overline{\phi_{e_1}(x)}\phi_{e_2}(x) = 0$$

and must be verified $\forall x \in \mathbb{R}$. For $x \in \mathbb{R}_+^*$, (14) \Leftrightarrow (1); for $x \in \mathbb{R}_-^*$, (14) \Leftrightarrow (12); so, a particular attention must be paid to the determination of $\partial\mathbf{j}/\partial x$ when it is evaluated through $x = 0$. One has

$$\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial x}(0) = \lim_{\substack{\varepsilon_1 \rightarrow 0^+ \\ \varepsilon_2 \rightarrow 0^+}} \frac{\mathbf{j}(\varepsilon_2) - \mathbf{j}(-\varepsilon_1)}{\varepsilon_2 + \varepsilon_1}.$$

Let us continue the proof concerning non Rydberg free states, which was sketched in the previous section. We choose $|\phi_{e_1}\rangle$ a non Rydberg bound state and $|\phi_{e_2}\rangle$ a non Rydberg free one (we assume their existence; one observes that they are independent). So $\phi_{e_1}^> = \mu_{k_1}^+ f_{\eta_1}$, $\phi_{e_1}^< = \mu_{k_1}^- \tilde{f}_{\eta_1}$, $\phi_{e_2}^> = \alpha_{k_2}^+ F_{\eta_2} + \beta_{k_2}^+ G_{\eta_2}$ and $\phi_{e_2}^< = \alpha_{k_2}^- \tilde{F}_{\eta_2} + \beta_{k_2}^- \tilde{G}_{\eta_2}$, with $\mu_{k_1}^- = e^{i\theta} \mu_{k_1}^+$ and $\beta_{k_2}^- = e^{i\theta} \beta_{k_2}^+$. All terms in the previous limit read $\frac{h\alpha\beta}{m} \mathfrak{R}(\tilde{\alpha}\beta) \sin(\cdot) + (\mathfrak{R} \leftrightarrow \Im \ \& \ \sin \leftrightarrow \cos)$. One applies again the independence of sinus and cosine, and skips factor $\frac{h\alpha\beta}{m}$. The first order of the remaining term reads

$$\frac{D_{\eta_1} C_{\eta_2}}{2\eta_2 \Gamma(1 + \eta_1)} \lim_{\substack{\varepsilon_1 \rightarrow 0^+ \\ \varepsilon_2 \rightarrow 0^+}} \frac{\overline{\mu_{k_1}^+} \alpha_{k_2}^+ - \overline{\mu_{k_1}^-} \alpha_{k_2}^-}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}$$

and exists if and only if $\overline{\mu_{k_1}^+} \alpha_{k_2}^+ = \overline{\mu_{k_1}^-} \alpha_{k_2}^-$ which therefore gives $\alpha_{k_2}^- = e^{i\theta} \alpha_{k_2}^+$. The second order reads

$$-\frac{D_{\eta_1}(\eta_1^2 + \eta_2^2)}{4\eta_1^2 \eta_2^2 C_{\eta_2} \Gamma(1 + \eta_1)} \lim_{\substack{\varepsilon_1 \rightarrow 0^+ \\ \varepsilon_2 \rightarrow 0^+}} \frac{\overline{\mu_{k_1}^+} \beta_{k_2}^+ \varepsilon_2 + \overline{\mu_{k_1}^-} \beta_{k_2}^- \varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}$$

and exists if and only if $\overline{\mu_{k_1}^+} \beta_{k_2}^+ = \overline{\mu_{k_1}^-} \beta_{k_2}^-$ which therefore gives $\beta_{k_2}^- = e^{i\theta} \beta_{k_2}^+$. We have proved that all non Rydberg obey $\mathcal{R}(\theta_\infty)$, although we have not determined the set to which belongs $\phi_e^>$ when $e > 0$. ■

Before taking advantage of this result, let us conclude on the current of probability. For ϕ_{e_1} and ϕ_{e_2} non Rydberg, \mathbf{j} is odd and the limit of $\mathbf{j}(x)/x$ when $x \rightarrow 0$ becomes

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{j}}{dx}(0) &= \frac{\overline{\beta_{k_1}^+} \beta_{k_2}^+}{C_{\eta_1} C_{\eta_2}} \left(\frac{1}{(2\eta_2)^2} - \frac{1}{(2\eta_1)^2} \right) \quad \text{if } e_1 > 0 \text{ and } e_2 > 0; \\ &= \frac{\overline{\mu_{k_1}^+} \beta_{k_2}^+ D_{\eta_2}}{C_{\eta_1} \Gamma(1 + \eta_2)} \left(\frac{1}{(2\eta_2)^2} + \frac{1}{(2\eta_1)^2} \right) \quad \text{if } e_1 > 0 \text{ and } e_2 < 0; \\ &= \frac{\overline{\mu_{k_1}^+} \mu_{k_2}^+ D_{\eta_1} D_{\eta_2}}{\Gamma(1 + \eta_1) \Gamma(1 + \eta_2)} \left(\frac{1}{(2\eta_2)^2} - \frac{1}{(2\eta_1)^2} \right) \quad \text{if } e_1 < 0 \text{ and } e_2 < 0. \end{aligned}$$

This calculation is valid in both attractive or repulsive cases. For Rydberg states, the same three limits give zero (the case $e_1 < 0$ and $e_2 < 0$ extends exactly; the case $e_1 > 0$ and $e_2 < 0$ also extends, because the wrong normalisation vanishes in the zero limit; the case $e_1 > 0$ and $e_2 > 0$ is apart). Altogether, (14) is respected at all cases. ■

Self-adjoint extensions. We still consider self-adjoint extension $H_\infty(\mathbb{R})$. We assume first that there exists a non Rydberg bound eigenfunction ϕ_{e_1} . We have shown that there are two parameters ω_∞ and θ_∞ such that it reads $\phi_{e_1}^> = \varphi_{k_1}^>$ and $\phi_{e_1}^< = e^{i\theta_\infty} \hat{\varphi}_{k_1}^>$ with $g_b\left(\frac{\lambda}{2k_1}\right) = -\omega_\infty$ and $\varphi_{k_1}^> \in \mathcal{B}_{\omega_\infty}$. In other words, ϕ_{e_1} is a θ_∞ -symmetrical eigenfunction of $\mathcal{B}_{\omega_\infty}$.

Let us achieve the proof concerning non Rydberg free states; so we assume there is such an eigenfunction ϕ_{e_2} , with $e_2 > 0$. We know ϕ_{e_2} obeys $\mathcal{R}(\theta_\infty)$. So the scalar product $\langle \phi_{e_1} | \phi_{e_2} \rangle$ reads

$$0 = \langle \varphi_{e_1} | \phi_{e_2} \rangle = 2 \langle \phi_{e_1}^> | \phi_{e_2}^> \rangle;$$

it is zero because they are both eigenfunctions of the same operator $H_\infty(\mathbb{R})$. Now, the equality $\widetilde{\mathcal{F}}_{\omega_\infty} = \mathcal{F}_{\omega_\infty}$ implies $\{|\phi_{e_1}^>\rangle \perp |\phi_{e_2}^>\rangle \Leftrightarrow \phi_{e_2}^> \in \mathcal{F}_{\omega_\infty}\}$. This proves that ϕ_{e_2} obeys $\mathcal{R}(\theta_\infty)$ with $\phi_{e_2}^> \in \mathcal{F}_{\omega_\infty}$. Altogether, all non Rydberg states obey $\mathcal{R}(\theta_\infty)$ with $\phi_e^> \in \mathcal{D}_{\omega_\infty}$. ■

Let us eventually consider any Rydberg eigenfunction ϕ_{e_3} of the same operator $H_\infty(\mathbb{R})$. We know that this function is $\theta_\infty + \pi$ -symmetrical. Reversely, all $\theta_\infty + \pi$ -symmetrical Rydberg eigenfunctions are orthogonal to any (here non Rydberg) θ_∞ -symmetrical function (cf. Appendix in Supplementary Information), so $H_\infty(\mathbb{R})$ can be extended into a symmetric operator (one can choose a trivial action $H_\infty(\mathbb{R})|\phi_e\rangle = |0\rangle$), acting on all eigenstates ϕ_e obeying $\mathcal{R}(\theta_\infty)$ with $\phi_e^> \in \mathcal{D}_{\omega_\infty}$ and on all eigenstates ϕ_e obeying $\mathcal{R}(\theta_\infty + \pi)$ with $\phi_e^> \in \mathcal{D}_{\omega_\infty}$. This extension is maximal by construction and reads

$$\pi_{\theta_\infty}(H_{\omega_\infty}(\mathbb{R}_+^*) \times H_{\omega_\infty}(\mathbb{R}_+^*)) \oplus \pi_{\theta_\infty + \pi}(H_{\omega_\infty}(\mathbb{R}_+^*) \times H_{\omega_\infty}(\mathbb{R}_+^*)),$$

where π_θ is the projector on θ -symmetrical functions. Since $H_\infty(\mathbb{R})$ is maximal by definition, it is equal to this extension, and our classification is complete, within the assumption that there are non Rydberg eigenfunctions

(one at least in the bound spectrum, one at least in the free spectrum). In such case, we define $\varpi = (\omega_\varpi, \theta_\varpi)$ and our results prove that $\mathcal{D}_\varpi = \pi_\theta(\mathcal{D}_\varpi \cup \widehat{\mathcal{D}}_\varpi) \oplus \pi_{\theta+\pi}(\mathcal{D}_\varpi \cup \widehat{\mathcal{D}}_\varpi)$ and $\mathcal{S}_\varpi = \mathcal{S}_\varpi \cup \mathcal{S}_\varpi$. ■

Let us assume now that there are no non Rydberg states. In that case, all combinations of eigenstates are orthogonal, so the self-adjoint extension is defined on $\mathcal{D}_\infty \cup \widehat{\mathcal{D}}_\infty$ with no constraint. It is maximal by construction, so $H_\varpi(\mathbb{R})$ equals $H_\infty(\mathbb{R}_+^*) \times H_\infty(\mathbb{R}_-^*)$. We define $\varpi = \infty$ in that situation. Note that, however, $H_\infty(\mathbb{R})$ can be identified with $H_{(\omega, \theta)}(\mathbb{R})$ for any $\theta \in [0, 2\pi[$ and $\omega \rightarrow \infty$, because one can expand any eigenfunction as the sum of its θ -symmetrical and $\theta + \pi$ -symmetrical parts.

Existence of a non Rydberg bound state. We consider a self-adjoint extension $H_\varpi(\mathbb{R})$. We assume there is at least a non Rydberg eigenstate, otherwise $\varpi = \infty$, which situation exists and has been studied above.

We can rapidly exclude the situation, where there are no non Rydberg free eigenstates. Indeed, one knows that all non Rydberg bound states' energies belong to some set \mathcal{S}_ϖ and that their eigenfunctions obey $\mathcal{R}_{(\theta_\varpi)}$, with $\theta_\varpi \in [0, 2\pi[$; so they belong to $\mathcal{B}_\varpi = \pi_\theta(\mathcal{B}_\varpi \cup \widehat{\mathcal{B}}_\varpi)$. Thus, $H_\varpi(\mathbb{R})$ can be extended by $H_{(\omega, \theta_\varpi)}(\mathbb{R})$. Therefore, $H_\varpi(\mathbb{R}) = H_{(\omega, \theta_\varpi)}(\mathbb{R})$ and there are indeed non Rydberg free eigenstates.

On the contrary, the situation with non Rydberg free eigenstates and no bound ones can not be discarded so easily. The demonstration is close to that of section 'Existence of a bound state'.

We first study the case of a unique non Rydberg free eigenstate $|\phi_{e_1}\rangle$. There must be a Rydberg free one $|\phi_{e_2}\rangle$ with $e_2 \neq e_1$, otherwise, $H_\varpi(\mathbb{R})$ would not be physical. (2) reads $\phi_{e_1}^> = \alpha_{k_1}^+ F_{\eta_1} + \beta_{k_1}^+ G_{\eta_1}$, $\phi_{e_1}^< = \alpha_{k_1}^- \widehat{F}_{\eta_1} + \beta_{k_1}^- \widehat{G}_{\eta_1}$, $\phi_{e_2}^> = \alpha_{k_2}^+ F_{\eta_1}$ and $\phi_{e_2}^< = \alpha_{k_2}^- \widehat{F}_{\eta_2}$.

We have found that there exists θ_ϖ such that $\beta_{k_1}^- = e^{i\theta_\varpi} \beta_{k_1}^+$. Then, $\langle \phi_{e_1} | \phi_{e_2} \rangle = 0$ gives

$$\overline{\beta_{k_1}^+} \alpha_{k_2}^+ + \overline{\beta_{k_1}^-} \alpha_{k_2}^- = 0$$

so $\alpha_{k_2}^- = -e^{i\theta_\varpi} \alpha_{k_2}^+ = e^{i(\theta_\varpi + \pi)} \alpha_{k_2}^+$. Since the eigenspace associated to e_2 is of dimension 1 (because of the Dirichlet condition, since ϕ_{e_2} is Rydberg), one deduces that ϕ_{e_2} obeys $\mathcal{R}(\theta_\varpi + \pi)$. Thus, from the relation above, ϕ_{e_1} obeys $\mathcal{R}(\theta_\varpi)$. Therefore, $\alpha_{k_1}^+ / \beta_{k_1}^+ = \alpha_{k_1}^- / \beta_{k_1}^- \equiv \zeta_{k_1}$, one defines $\omega = -g_f(\eta_1) + \frac{\zeta_{k_1} C_{\eta_1}^2}{2\eta_1}$, then $H_\varpi(\mathbb{R})$ can be extended by $H_{(\omega, \theta_\varpi)}(\mathbb{R})$, which admits non Rydberg bound eigenstates. This is indeed contradictory and the case can be discarded. ■

Let us assume now there are two independent non Rydberg free states $|\phi_{e_1}\rangle$ and $|\phi_{e_2}\rangle$. (2) reads $\phi_{e_1}^> = \alpha_{k_1}^+ F_{\eta_1} + \beta_{k_1}^+ G_{\eta_1}$, $\phi_{e_1}^< = \alpha_{k_1}^- \widehat{F}_{\eta_1} + \beta_{k_1}^- \widehat{G}_{\eta_1}$, $\phi_{e_2}^> = \alpha_{k_2}^+ F_{\eta_1} + \beta_{k_2}^+ G_{\eta_2}$ and $\phi_{e_2}^< = \alpha_{k_2}^- \widehat{F}_{\eta_2} + \beta_{k_2}^- \widehat{G}_{\eta_2}$. We have already found that there exist θ_ϖ such that $\beta_{k_1}^- = e^{i\theta_\varpi} \beta_{k_1}^+$ and $\beta_{k_2}^- = e^{i\theta_\varpi} \beta_{k_2}^+$. We use the continuity of \mathbf{j} the same way as before, constructing a state $|\phi\rangle = \alpha |\phi_{e_1}\rangle + \beta |\phi_{e_2}\rangle$ and calculating $\lim_{\varepsilon_1 \rightarrow 0, \varepsilon_2 \rightarrow 0}$. One applies again the independence of sinus and cosine, and skips factor $\frac{\hbar \alpha \beta}{m}$. Then, the first order of the remaining term reads

$$\left(\frac{C_{\eta_2}}{\eta_1 C_{\eta_1}} (\overline{\beta_{k_1}^+} \alpha_{k_2}^+ - \overline{\beta_{k_1}^-} \alpha_{k_2}^-) + \frac{C_{\eta_1}}{\eta_2 C_{\eta_2}} (\overline{\beta_{k_2}^+} \alpha_{k_1}^+ - \overline{\beta_{k_2}^-} \alpha_{k_1}^-) \right) \times \frac{1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2},$$

so the existence of the limit $\varepsilon_1 \rightarrow 0$ and $\varepsilon_2 \rightarrow 0$ gives

$$\frac{\overline{\zeta_{k_1}^+} C_{\eta_1}^2}{\eta_1} - \frac{\overline{\zeta_{k_1}^-} C_{\eta_1}^2}{\eta_1} = \frac{\zeta_{k_2}^+ C_{\eta_2}^2}{\eta_2} - \frac{\zeta_{k_2}^- C_{\eta_2}^2}{\eta_2}. \tag{15}$$

The second order gives $\overline{\beta_{k_1}^+} \beta_{k_2}^+ = \overline{\beta_{k_1}^-} \beta_{k_2}^-$, which one already knows. The scalar product $\langle \phi_{e_1} | \phi_{e_2} \rangle$ reads

$$\begin{aligned} \langle \phi_{e_1} | \phi_{e_2} \rangle &= \frac{2\lambda}{k_1^2 - k_2^2} \left(\frac{C_{\eta_2}}{C_{\eta_1}} \frac{\overline{\beta_{k_1}^+} \alpha_{k_2}^+ - \overline{\beta_{k_1}^-} \alpha_{k_2}^-}{2\eta_1} - \frac{C_{\eta_1}}{C_{\eta_2}} \times \frac{\overline{\beta_{k_2}^+} \alpha_{k_1}^+ - \overline{\beta_{k_2}^-} \alpha_{k_1}^-}{2\eta_2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{g_f(\eta_1) - g_f(\eta_2)}{C_{\eta_1} C_{\eta_2}} (\overline{\beta_{k_1}^+} \beta_{k_2}^+ + \overline{\beta_{k_1}^-} \beta_{k_2}^-) \right) \end{aligned}$$

thus $\langle \phi_{e_1} | \phi_{e_2} \rangle = 0$ gives

$$\frac{\overline{\zeta_{k_1}^+} C_{\eta_1}^2}{\eta_1} + \frac{\overline{\zeta_{k_1}^-} C_{\eta_1}^2}{\eta_1} - 2g_f(\eta_1) = \frac{\zeta_{k_2}^+ C_{\eta_2}^2}{\eta_2} + \frac{\zeta_{k_2}^- C_{\eta_2}^2}{\eta_2} - 2g_f(\eta_2). \tag{16}$$

Adding (15) and (16) proves that $(\zeta_{k_1}^+, \zeta_{k_2}^+)$ obeys (10); thus, $\zeta_{k_i}^+$ are real and obey (11). Subtracting (15) and (16) proves that $(\zeta_{k_1}^-, \zeta_{k_2}^-)$ obeys (10); thus, $\zeta_{k_i}^-$ are real and obey (11). Then, (16) proves that the same ω can be associated to all functions $\phi_{k_1}^>, \phi_{k_1}^<, \phi_{k_2}^>$ and $\phi_{k_2}^<$. Therefore, notwithstanding we did not establish $\zeta_i^+ = \zeta_i^-$, one can introduce any bound state associated to φ_η with $g_b(\eta) = -\omega$, and extend the action of $H_\varpi(\mathbb{R})$ on these bound states, keeping the operator symmetric. This is contradictory, so the result is proved. ■

Discussion

Mathematical interpretation. We have determined all self-adjoint extensions. θ -symmetrical states obey $\mathcal{C}(\theta)$. So, all eigenfunctions ϕ_e of $H_{\omega,\theta}(\mathbb{R})$, respecting $\mathcal{R}(\theta)$, with $\phi_e^> \in \mathcal{D}_\omega$, obey $\mathcal{C}(\theta)$ and all eigenfunctions ϕ_e of $H_{\omega,\theta}(\mathbb{R})$, respecting $\mathcal{R}(\theta + \pi)$, with $\phi_e^> \in \mathcal{D}_\infty$, obey $\mathcal{C}(\theta + \pi)$. For $H_\infty(\mathbb{R})$, $\mathcal{C}(\theta)$ reduces to Dirichlet conditions (all eigenfunctions obey $\mathcal{C}(\theta)$ for any $\theta \in [0, 2\pi[$).

The Dirichlet case in one dimension. We focus on the case $\varpi = \infty$ and study eigenfunctions ϕ_e . Both attractive and repulsive case can be considered, but we will focus on the first one.

Let us consider the bound spectrum. From what precedes, μ in section ‘Description of a self-adjoint extension’ is entirely free. Therefore, $\{|\phi_e^>, |\phi_e^<\}$ is a basis of the eigenspace E_e corresponding to energy e . This is an exceptional violation of the general result, which asserts that an energy in the bound spectrum is non degenerated in one dimensional systems. Here, the eigenspace E_e has dimension 2. However, examining the standard demonstration²⁶, one observes that it is based on a Wronskian theorem, which can not apply here.

Another basis is composed of $\{|\phi_e^+, |\phi_e^-\}$, the even and odd extensions on \mathbb{R} . For $\omega = \infty$, one observes that $\phi_e^- \in C(\mathbb{R})$ for all $e \in \mathcal{S}_\infty \cup \mathbb{R}_+$. $H_\infty(\mathbb{R})$, defined on these basis, is closed and therefore self-adjoint. More generally, one can use $\{|\phi_e^\theta, |\phi_e^{\theta+\pi}\}$, for any $\theta \in [0, 2\pi[$.

Physical applications

We study different possible extensions of this work to real physical situations.

The hydrogenate case in three dimension. Let us focus on the case $\mathbb{D} = \mathbb{R}^3$, using the mapping $\Phi(r) = \phi(r)/r$, where ϕ is the one-dimensional solution and Φ the radial part of the three-dimensional wavefunction. We will only consider the attractive case here.

Let us connect our parametrization ω with that of ref.¹⁴, which parameter is written α . We will show the connection for bound states only, but this can be done for all states. The first order expansion of any state ϕ_e with $e < 0$ reads

$$\phi_e(x) = a + \lambda ax \ln(|\lambda|x) + bx;$$

this expression holds both in attractive and repulsive cases. ω can be expressed in terms of b/a , which reads

$$\omega = \frac{1}{|\lambda|} \left(\frac{b}{a} - \lambda \right).$$

In ref.¹⁴, where λ reads γ , one finds parameters $\phi_0 = a$ and $\phi_1 = b$, so one gets

$$\alpha = \frac{1}{4\pi} \frac{b}{a} \Leftrightarrow \omega = \frac{1}{|\lambda|} (4\pi\alpha - \lambda).$$

As it is well known²⁷, for $L > 0$, the solutions of the Schrödinger equation which do not cancel at $r = 0$ do not belong to $L^2(\mathbb{R}^3)$ and must therefore be discarded. On the contrary, that, corresponding to the case $L = 0$, belong to $L^2(\mathbb{R}^3)$ (all g_n solutions, which diverge at $r \rightarrow \infty$ are excluded from this discussion). This is the reason why the $L \neq 0$ subspaces appearing in (2.1.13) of ref.¹⁴ have no parametrization, contrary to the $L = 0$ one.

This helps us interpreting what these authors mean by $\ll H_{\gamma,\alpha,\varpi}$ describes the Coulomb interaction plus an additional point interaction \gg : the eigenfunctions for $\alpha < \infty$ are divergent eigenfunctions and not physical, although they belong to $L^2(\mathbb{R}^3)$, so they do not describe the physical Coulomb interaction. Most authors have similarly assumed that the only admissible Coulomb bound states are the Rydberg ones, given by the Laguerre polynomial

$$\Phi(r) = \sqrt{\frac{2\lambda}{n^{3/2}}} e^{-r} L_n'(2r)$$

with a specific normalization (assuming that the spherical function reads $1/\sqrt{4\pi}$ for kinetic momentum $L = 0$). This solution exactly corresponds to the $\omega = \infty$ Dirichlet case, which is also the $\alpha = \infty$ one.

Actually, no fundamental principle of quantum mechanics justifies discarding solutions that diverge for $r \rightarrow 0$, since the probability $\int |\Phi(r)|^2 r^2 dr$ is finite (in the basic meaning ‘not infinite’). However, experimental evidences, from the original Rydberg spectrum, are in excellent agreement with this assumption. We find that experimental data²⁸ are only compatible with $|\omega| > 27779$. We have simply compared the ratio $\frac{E_2 - E_m}{E_2 - E_n}$, for several (m, n) couples, as determined from these data, with that calculated from the exact values of \mathcal{S}_ω . Actually, $(m, n) = (5, 3)$ gives the highest (best) limit of possible values for ω .

Based on these physical grounds, we will follow the common choice and, dealing with the case $D = \mathbb{R}^3$, discard all divergent wavefunctions, therefore reducing the parameter range to $\omega = \infty$, the self-adjoint extension corresponding to Dirichlet solutions. We can justify this choice, from a mathematical point of view, by reminding that the deficiency coefficient of $H(\mathbb{R}^3)$ is zero. We will discuss this point further on.

Explicit spectra for a semi-infinite line. The calculated spectra $\mathcal{S}_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ vary significantly, for different values of ω . We show three of them in Fig. 6, corresponding to $\omega_1 = \infty$ (Rydberg spectrum), $\omega_2 = \omega(-1/4) \approx 2.3$ and $\omega_3 = \omega(-1/2) \approx -0.27$ (close to the Neumann case). As already pointed out, in any one-dimensional system

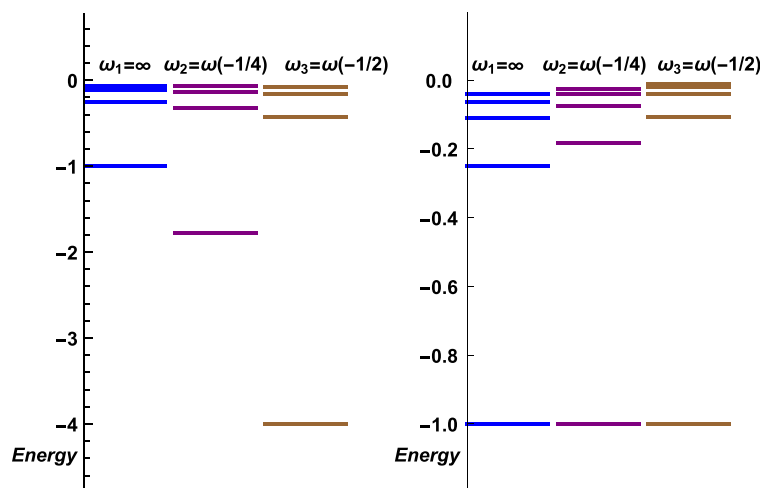


Figure 6. Spectra for ω_i ($i = 1, 2, 3$) defined in the text. On the left, we show the absolute values, on the right, we normalize energies so that the lowest energy is -1 . The variation of $E_{n+1} - E_n$, when n is increased, is steeper for ω_3 .

the experimental determination of this spectra would allow that of the limit $\phi'(0^+)/\phi(0^+)$ in the vicinity of the charge defect. Turning back to the one-dimensional attractive case, defined in $\mathbb{D} = \mathbb{R}_+^*$, one observes that the previous physical arguments used in the three-dimensional case cannot apply, because no wavefunction is ever diverging. Therefore, one must consider all parameters, $\omega \in [-\infty, \infty]$ in the attractive case, $\omega \in [-\infty, 2\gamma_E]$ in the repulsive one.

The determination of ω is highly system dependent. If any experimental spectrum, close enough to this case, can be measured in the future with high enough precision, like that of a one-dimensional quantum wire (like a carbon nanotube) with a charge defect at one extremity or an hydrogen atom in very intense magnetic field, then we argue that the limit condition $\phi'(0)/\phi(0)$, at that extremity, will be determined by examining the sequence of energies $E_1 < E_2 < E_3, \dots$ and in particular the sequence of their ratio.

Regularization of the potential. We consider here the regularized potential $V_\varepsilon = \lambda/\sqrt{x^2 + \varepsilon^2}$ in the attractive case, with $\mathbb{D} = \mathbb{R}$. This is a way to address the $1 + \varepsilon$ -dimensional case, since this potential describes the situation where the charge is lightly displaced from axis \mathbb{R} in the 3-dimensional space. When $\varepsilon \rightarrow 0$, it converges towards the Coulomb potential, $V_\varepsilon \rightarrow V$. We focus on the negative (bound) spectrum of the corresponding Hamiltonian $H_\varepsilon(\mathbb{R})$, which is self-adjoint.

This spectrum is found discrete and non degenerate $\forall \varepsilon \neq 0$. In this case, all eigenfunctions are orthogonal and form a complete basis, because they obey to $H(\mathbb{R}^3)$, which is self-adjoint, as explained before. They separate into two groups, odd functions χ_{2p}^ε with $p \in \mathbb{N}^*$, and even ones χ_{2p+1}^ε with $p \in \mathbb{N}$. We will note e_p^ε the energies corresponding to odd solutions, and $e_{p+\frac{1}{2}}^\varepsilon$ that of even solutions. Figure 7 shows the first (smallest) energies as a function of $\ln 1/\varepsilon$. When $\varepsilon \rightarrow 0$, even wavefunctions $\chi_{2p}^\varepsilon \rightarrow \chi_{2p}^0 = \phi_{-\lambda^2/(4p^2)}$ while their energy rapidly reaches $-\lambda^2/(4p^2)$ the corresponding Rydberg energy. Odd ones also $\chi_{2p+1}^\varepsilon \rightarrow \phi_{-\lambda^2/(4p^2)}$ while their energy reaches $-\lambda^2/(4p^2)$ the Rydberg energy. This is conform with the 2-degeneracy that is proved in the case $\varpi = \{\infty^+, \infty^-\}$, which shows that $H_\varepsilon(\mathbb{R}) \rightarrow H_\infty(\mathbb{R})$. An odd eigenfunction seems to be converging towards a zero energy eigenfunction, but it vanishes as $\varepsilon \rightarrow 0$, in conformity with our discussion about these functions.

Spectral theorem

We discuss the way one should write the spectral theorem, in the case of incompatible self-adjoint extensions.

Spectral theorem in \mathbb{R}_+^* . For each value ω , $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ is self-adjoint, so the spectral theorem is valid. Therefore, any function $\psi_i \in L^2(\mathbb{R}_+^*)$ can be developed on the basis $\mathcal{B}_\omega(\mathbb{R}_+^*) \cup \mathcal{F}_\omega(\mathbb{R}_+^*)$

$$\psi_i(x) = \sum_{\eta \in \mathcal{G}_\omega} b_k^i \varphi_k(kx) + \int_{\mathbb{R}_+} c_k^i \Psi_k(kx) \frac{dk}{\pi} \text{ with } b_k^i = \langle \varphi_k | \psi_i \rangle \text{ and } c_k^i = \langle \Psi_k | \psi_i \rangle.$$

* For $\omega = \infty$ and $\lambda < 0$ (attractive case), this formula is equivalent to Eq. 19.171, in ref. ²⁶ with a different normalization (we preferred to use k parameter, rather than E). We have checked this formula numerically on several examples, $x \mapsto e^{-x^2}$, $x \mapsto x e^{-x^2}$, etc. One can, in particular, expand a function φ_k with $\omega\left(\frac{\lambda}{2k}\right) \neq \omega_1$ on $\mathcal{B}_{\omega_1}(\mathbb{R}_+^*) \cup \mathcal{F}_{\omega_1}(\mathbb{R}_+^*)$, which we have done for functions $\psi_0 = \varphi_{-\lambda}$ (setting $\omega_0 = \omega\left(-\frac{1}{2}\right)$) or $\psi_0 = \varphi_{-\frac{\lambda}{3}}$ (setting $\omega_0 = \omega\left(-\frac{3}{2}\right)$), while choosing $\omega_1 = \infty$.

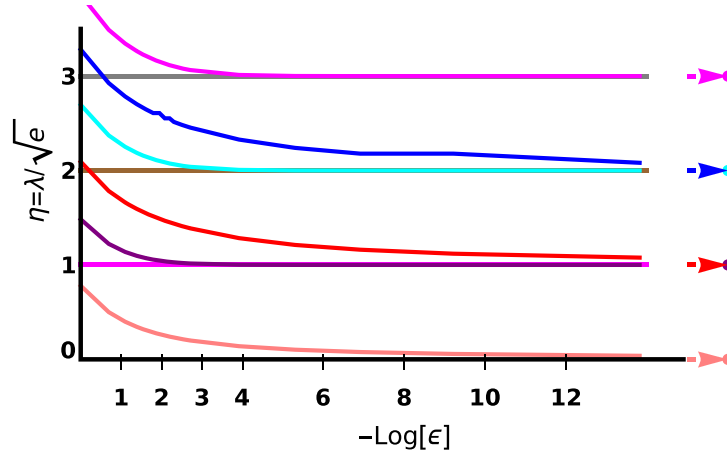


Figure 7. First energies of $\frac{p^2}{2m} + V_\epsilon (e_1^s, e_1^e, e_2^s, e_2^e, e_3^s, e_3^e)$ versus $\ln(1/\epsilon)$ in dimensionless y -scale. The asymptotic limit is indicated by an arrow on the right, for each curve and by the horizontal straight lines.

$\omega = \omega_0$ or $\omega = \omega_1$, is well defined by this expansion, writing for instance

$$H_{\omega_1}(\mathbb{R}_+^*)|\psi_0\rangle = - \sum_{-k_1^2 \in \mathcal{S}_{\omega_1}} k_1^2 b_{k_1}^0 \varphi_{k_1}(k_1 x) + \int_{\mathbb{R}_+} k_1^2 c_{k_1}^0 \Psi_{k_1}(k_1 x) \frac{dk_1}{\pi}.$$

This result differs from $H_{\omega_0}(\mathbb{R}_+^*)|\psi_0\rangle$, which reads

$$H_{\omega_0}(\mathbb{R}_+^*)|\psi_0\rangle = -k_0^2 |\psi_0\rangle = - \sum_{-k_1^2 \in \mathcal{S}_{\omega_1}} k_0^2 b_{k_1}^0 \varphi_{k_1}(k_1 x) - \int_{\mathbb{R}_+} k_0^2 c_{k_1}^0 \Psi_{k_1}(k_1 x) \frac{dk_1}{\pi}.$$

Finally, one should be aware that, as a formal derivative operator, the action of $H(\mathbb{R}_+^*)$ on ψ_0 is well defined. In particular, one is interested by its action on eigenfunctions ϕ_e . One eventually finds

$$H(\mathbb{R}_+^*)|\phi_e\rangle = e |\phi_e\rangle$$

which means that $H(\mathbb{R}_+^*)$ acts on ψ_e as $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ with $\omega = \omega(e)$, the index of energy e . However, $H(\mathbb{R}_+^*)$ is not a good operator, because it does not correspond to the same self-adjoint extension, for each state.

Technically, the last result can be understood as follows: d/dx does not commute with $\int dk$ in the former development. Indeed, when the derivation is performed inside the integral, it produces a factor $\eta \propto 1/k$ which makes it improper.

This analysis is common with that, which can be made for $H = -d^2/dx^2$; the divergence of the Coulomb potential is not entirely responsible of the loss of self-adjointness.

Spectral theorem in \mathbb{R} . The spectral theorem in \mathbb{R} can be formulated after that in \mathbb{R}_+^* . Each θ -symmetrical and $\theta + \pi$ -symmetrical part of any function can be expanded separately. Considering $H_\omega(\mathbb{R})$, with $\omega = (\omega, \theta)$, any function $\phi \in L^2(\mathbb{R})$ expands into $\phi = \phi^\theta + \phi^{\theta+\pi}$. Then ϕ^θ expands in $\mathcal{B}_\omega(\mathbb{R}) \cup \mathcal{F}_\omega(\mathbb{R})$ exactly as $\phi^{\theta>}$ in $\mathcal{B}_\omega(\mathbb{R}_+^*) \cup \mathcal{F}_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ but for a supplementary factor $1/\sqrt{2}$: one should take the expansion calculated for $\mathbb{D} = \mathbb{R}_+^*$ and allow $x \in \mathbb{R}$; similarly $\phi^{\theta+\pi}$ expands in $\mathcal{B}_\omega(\mathbb{R}) \cup \mathcal{F}_\omega(\mathbb{R})$ exactly as $\phi^{\theta+\pi>}$ in $\mathcal{B}_\omega(\mathbb{R}_+^*) \cup \mathcal{F}_\omega(\mathbb{R}_+^*)$ but for a supplementary factor $1/\sqrt{2}$.

It applies also in the particular case $\omega = \infty$, choosing any arbitrary θ . In this case, one can also write $f = f^> + f^<$ (where $f^>$ extends in \mathbb{R}^+ as zero and $f^<$ extends in \mathbb{R}_+^* as zero). $f^>$ expands in $\mathcal{B}_\infty(\mathbb{R}_+^*) \cup \mathcal{F}_\infty(\mathbb{R}_+^*)$ and $f^<$ expands in $\mathcal{B}_\infty(\mathbb{R}_-^*) \cup \mathcal{F}_\infty(\mathbb{R}_-^*)$. This is the right place to observe that μ , defined in section ‘Description of a self-adjoint extension’, is not determinate in this particular case. One can indeed choose $\mu = 0$ (i.e. $f = f^>$) or $\mu = \infty$ (i.e. $f = f^<$). We discuss this supplementary degree of freedom further.

Topological classification of the extension parameter space

Structure for $\mathbb{D} = \mathbb{R}_+^*$ in the repulsive case. The structure of the order parameter seems to be equivalent to the interval $[-\infty, 2\gamma_E]$ in the repulsive case, which is topologically equivalent to interval $[0, 1]$. This is notwithstanding the special case $H_{2\gamma_E}(\mathbb{R}_+^*)$, which we found for the zero energy. This case corresponds to $\omega = 2\gamma_E$, but, what should now be pointed out is that the regular limit $\omega \rightarrow 2\gamma_E$, which can be constructed, using g_η , does not exist. One finds indeed that eigenfunction g_η tends to a singular distribution with $\{0\}$ support. Looking for

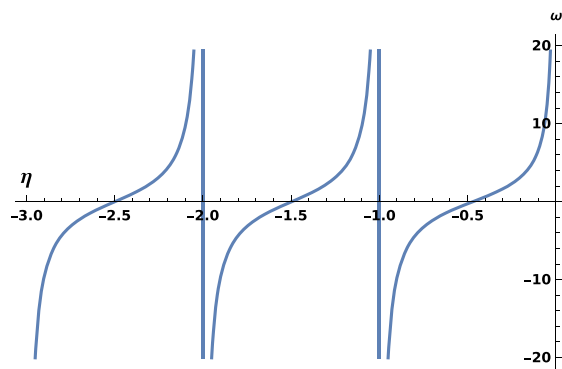


Figure 8. ω versus η in the attractive case.

such a solution, one substitutes again $\varphi_0 = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \delta^{(n)}$ in (1). When $\eta \rightarrow \infty$, one finds that all coefficients a_n are zero.

This indicates that the right boundary of $[-\infty, 2\gamma_E]$ is apart, one should write, instead, $[-\infty, 2\gamma_E] \cup \{2\gamma_E\}$ and draw --- to characterize this space, which is topologically equivalent to $(\mathbb{R}, +\infty)$.

$U(1)$ structure for $\mathbb{D} = \mathbb{R}_+^*$ in the attractive case. Let us observe on Fig. 8 the curve of index $\omega(\eta)$ in the attractive case. It is not periodic, but there is an infinity of vertical asymptotes at positions $\eta = -n, n \in \mathbb{N}^*$. Any interval $[-n-1, -n]$, for $n \in \mathbb{N}$, covers all in indices ω . In other words, any eigenfunction $\varphi_\eta \in L^2(\mathbb{R}_+^*)$, with index η , belongs to the bound spectrum of $H_\omega(\mathbb{R}_+^*)$, where $\omega(\eta)$ is determined by this curve. $\omega \rightarrow -\infty$ and $\omega \rightarrow \infty$ are identified (to the Rydberg solutions), which proves that the set of all extensions of $H(\mathbb{R}_+^*)$ is mapped on a space, which is topologically equivalent to the circle $U(1)$.

Structure for $\mathbb{D} = \mathbb{R}$. It is worth pointing out that, although the space of extension parameter is reduced, as a consequence of the continuity condition at $x = 0$, we get the same deficiency coefficients as Oliveira *et al.*¹² in that $\mathbb{D} = \mathbb{R}$ case, which are (2, 2).

Since there is no Rydberg state in the repulsive case, the structure due to parameters (ω, θ) is very simple, it is an infinite cylinder $(\mathbb{R}, +\infty) \times [0, 2\pi]$, with a closed boundary at one side, as represented in Fig. 9. The structure in the attractive case is more like a torus, with a strangling, that is a singular point of infinitely small narrowness, corresponding to $\omega = \pm\infty$, as seen on Fig. 9.

The θ -symmetry introduces a phase factor $\pm e^{i\theta}$ when a particle passes $x = 0$. Factor $e^{i\theta}$ is arbitrary but identical for all states associated to $H_{(\omega, \theta)}(\mathbb{R})$, similarly to standard gauge symmetry.

Conclusion

The one-dimensional Schrödinger equation with a Coulomb $\lambda/|x|$ potential brings unusual difficulties, for the physical interpretation of its solutions. Indeed, the corresponding hamiltonians $H(\mathbb{R}_+^*)$ and $H(\mathbb{R})$ admit an infinity of self-adjoint extensions, classified by a real parameter ω . In the case of $H(\mathbb{R}_+^*)$ with an attractive Coulomb potential, ω is defined in the space \mathbb{R} where $-\infty$ is identified with ∞ ; this space is topologically equivalent to the circle $U(1)$. In the case of $H(\mathbb{R}_+^*)$ with a repulsive Coulomb potential, ω is defined in $[-\infty, 2\gamma_E]$. In both cases, parameter ω must be chosen according to the limit $\frac{\partial \phi(x)}{\lambda |x| \partial x} / \phi(x) \pm \ln(|\lambda|x)$ when $x \rightarrow 0$, where \pm is the sign of λ . In the attractive case, the particular value $\omega = \infty$ brings the Dirichlet solutions, which obey $\phi(0) = 0$ and correspond to the standard Rydberg spectrum, while the other spectra are unusual and have never been observed yet. In the repulsive case, the particular value $\omega = 2\gamma_E$ gives a continuous spectrum R_+ , the zero energy eigenfunction of which is bounded.

In the case of $H(\mathbb{R})$, physical constraints yield a phase gauge θ , which describes the discontinuity of wavefunctions at $x = 0$. If the Coulomb potential is attractive, two situations may occur: either one finds two separate spectra, the eigenstates of which are orthogonal and obey, respectively, $\mathcal{R}(\theta)$ and $\mathcal{R}(\theta + \frac{\pi}{2})$ symmetry; or the spectrum is the standard Rydberg one, with an exceptional 2-degeneracy of all eigenfunctions. We did not study the repulsive case here, but we induce that there is also a supplementary symmetry $\mathcal{R}(\theta)$, giving the representation sketched in Fig. 9 (left).

This study brings up new considerations about quantum physics: in order to conciliate the classification of $H(\mathbb{R}_+^*)$ and $H(\mathbb{R})$ with standard experimental measures of the hydrogen electronic energy levels, one has to discard all **divergent** wavefunctions, but we could not justify this choice. So we suggest to add a postulate in quantum physics, stipulating that no divergent wavefunction can be admitted, in other words all wavefunctions are bounded. Indeed, this would give an explanation why one never observes any physical states with $\omega \neq \infty$.

This work shows that one must be very careful when using the spectral theorem for an unbounded hamiltonian. At a time when theoretical physics research includes new and mathematically unexpected objects (like

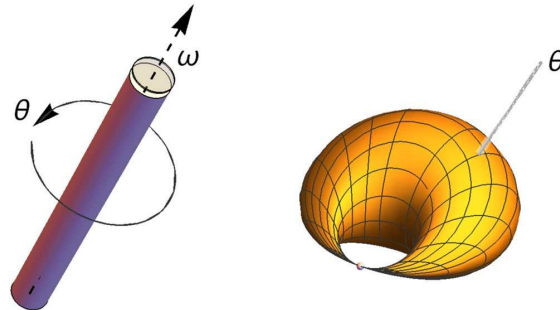


Figure 9. Representation of the order parameter space in the repulsive case (left) or attractive case (right). Left are represented the $\omega = 2\gamma_E$ closing circle, the ω axis (which is supposed to vary from $-\infty$ to $2\gamma_E$) and the gauge parameter θ . Right is represented the $\omega = \pm\infty$ point at the strangling point and a θ -circle is pointed out: all orthogonal lines to this circle vary with ω .

complex eigenvalues for hamiltonians, skyrmions, Majorana fermions), advanced studies of non self-adjoint hamiltonians are necessary, and, what seemed old-fashioned physics reveals an essential source of inspiration and comprehension, to determinate whether a self-adjoint extension is valid or not.

Received: 28 June 2019; Accepted: 5 March 2020;
Published online: 29 April 2020

References

- Loudon, R. One-Dimensional Hydrogen Atom. *Am. J. Phys.* **27**, 649–655 (1959).
- Haines, L. K. & Roberts, D. H. One-dimensional hydrogen atom. *Am. J. Phys.* **37**, 1145–1154 (1969).
- Andrews, M. Singular potentials in one dimension. *Am. J. Phys.* **44**, 1064–1066 (1976).
- Gesztesy, F. On the one-dimensional Coulomb Hamiltonian. *J. Phys. A: Math. Gen.* **13**, 867–875 (1980).
- Gostev, V. B. & Frenkin, A. R. Quantum mechanics of one-dimensional motion in a field with the singularity $\lambda|x|^{-\nu}$. *Theor. Math. Phys.* **74**, 161–170, [Engl. transl.] (1988).
- Tsutsui, I., Fülöp, T. & Cheon, T. Connection conditions and the spectral family under singular potentials. *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 275–287 (2003).
- Fischer, W., Leschke, H. & Müller, P. The functional-analytic versus the functional-integral approach to quantum Hamiltonians: The one-dimensional hydrogen atom. *J. Math. Phys.* **36**, 2313–2323 (1995).
- Gordeyev, A. N. & Chhajlan, S. C. One-dimensional hydrogen atom: a singular potential in quantum mechanics. *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 6893–6909 (1997).
- Mineev, V. S. The Physics of Self-Adjoint Extensions: One-Dimensional Scattering Problem for the Coulomb Potential. *Theor. Math. Phys.* **140**, 310–328 (2004).
- Núñez Yépez, H. N., Vargas, C. A. & Brito, A. L. Superselection rule in the one-dimensional hydrogen atom. *J. Phys. A: Math. Gen.* **21**, L651–L653 (1988).
- Abramovici, G. & Avishai, Y. J. The one-dimensional Coulomb problem. *Phys. A: Math. Theor.* **42**, 285302, Some normalization factors in §4 are wrong, due to a symbolic calculation error of *Mathematica* v. 6 (2009).
- De Oliveira, C. R. & Verri, A. A. Self-adjoint extensions of Coulomb systems in 1, 2 and 3 dimensions. *Ann. Phys.* **324**, 251–266 (2009).
- Bulla, W. & Gesztesy, F. Deficiency indices and singular boundary conditions in quantum mechanics. *J. Math. Phys.* **26**, 2520–2528 (1985).
- Albeverio, S., Gesztesy, F. Høegh-Krohn, R. & Holden, H. *Solvable Models in Quantum Mechanics*. (Springer-Verlag, New York, 1988).
- Gitman, D. M., Tyutin, I. V. & Voronov, B. L. *Self-adjoint Extension in Quantum Mechanics*. (Birkhäuser, Boston, 2012).
- Abramowitz, M. & Stegun, I. A. *Handbook of Mathematical Functions*. (Dover, New York, 1965).
- Akhiezer, N. I. & Glazman, I. M. *Theory of linear operators in Hilbert space*, [english translation]. See §54, p. 132 for the existence of an eigenvector, and **Theo2** p. 86 for the reality of symmetric operators (Dover, New York, 1993).
- Hadamard, J. The Finite Part of an Infinite Simple Integral. In *Lectures on Cauchy's problem in linear partial differential equations* 133–141 (Yale University press, New Haven, 1923).
- Núñez Yépez, H. N., Salas-Brito, A. L. & Solís, D. A. Comment on ‘The one-dimensional Coulomb problem’. *J. Phys. A: Math. Theor.* **46**, 208003 (2013).
- Hill, E. L. A Note on the General Solution of Schrodinger's Equation and the Uncertainty Principle. *Phys. Rev.* **38**, 2115–2121 (1931).
- Mitchell, K. The theory of the surface photoelectric effect in metals—I. *Proc. R. Soc. Lond. A* **146**, 442–464 (1934).
- Lent, C. S. & Kirkner, D. J. The quantum transmitting boundary method. *J. Appl. Phys.* **37**, 6353 (1990).
- Mukherji, D. & Nag, B. R. Band structure of semiconductor superlattices. *Phys. Rev. B* **12**, 4338–4345 (1975).
- Bastard, G. Superlattice band structure in the envelope-function approximation. *Phys. Rev. B* **24**, 5693–5697 (1981).
- Yu, P. Y. & Cardona, M. Confinement of Energy Levels of Electrons and Holes. In *Fundamentals of Semiconductors* 479–489 (Springer-Verlag, Heidelberg, 2010).
- Aslangul, C. *Mécanique quantique 2*. (de Boeck, Louvain, 2008).
- Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. and Laloe, F. Comportement à l'origine des solutions de l'équation radiale. in *Mécanique quantique* 791–792 (Hermann, Paris, 1977).
- Herzberg, G. *Atomic Spectra and Atomic Structure*. Unfortunately, no indications of uncertainties are given, we have used the data as given (Dover, New York, 1944).

www.nature.com/scientificreports/

Acknowledgements

The author thanks K. Pankrashkin for his mathematical explanations and clarifications, and A. Jagannathan and J.-N. Fuchs for their attentive reading.

Competing interests

The author declares no competing interests.

Additional information

Supplementary information is available for this paper at <https://doi.org/10.1038/s41598-020-62144-2>.

Correspondence and requests for materials should be addressed to G.A.

Reprints and permissions information is available at www.nature.com/reprints.

Publisher's note Springer Nature remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Open Access This article is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License, which permits use, sharing, adaptation, distribution and reproduction in any medium or format, as long as you give appropriate credit to the original author(s) and the source, provide a link to the Creative Commons license, and indicate if changes were made. The images or other third party material in this article are included in the article's Creative Commons license, unless indicated otherwise in a credit line to the material. If material is not included in the article's Creative Commons license and your intended use is not permitted by statutory regulation or exceeds the permitted use, you will need to obtain permission directly from the copyright holder. To view a copy of this license, visit <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.

© The Author(s) 2020

