

Université de Montréal

**SUPRACONDUCTIVITÉ NON  
CONVENTIONNELLE ET IMPURETÉS LOCALES  
DANS LES SEMI-MÉTAUX DE LUTTINGER**

par

**Louis Godbout**

Département de physique  
Faculté des arts et des sciences

Mémoire présenté en vue de l'obtention du grade de  
Maître ès sciences (M.Sc.)  
en physique

20 décembre 2021



**Université de Montréal**

Faculté des arts et des sciences

---

Ce mémoire intitulé

**SUPRACONDUCTIVITÉ NON CONVENTIONNELLE  
ET IMPURETÉS LOCALES DANS  
LES SEMI-MÉTAUX DE LUTTINGER**

présenté par

**Louis Godbout**

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes :

*François Schiettekatte*

---

(président-rapporteur)

*William Witzak-Krempa*

---

(directeur de recherche)

*Andrea Bianchi*

---

(membre du jury)



# Résumé

---

Ce mémoire présente les résultats sur l'étude de la supraconductivité et de la réponse à des impuretés locales électrique et magnétiques des semi-métaux de Luttinger. Ces semi-métaux correspondent à des matériaux tri-dimensionnels dont la relation de dispersion électronique est caractérisée par des bandes quadratiques qui se touchent, en présence d'un fort couplage spin-orbite caractérisé par une pseudo-spin-3/2.

Expérimentalement, certains semi-métaux de Luttinger supraconducteurs possèdent une température critique ne pouvant être expliquée par les théories conventionnelles (BCS) se référant principalement au mécanisme des phonons. Le volet supraconductivité de notre travail s'intéresse à la résolution numérique de l'équation d'Eliashberg, une théorie microscopique de la supraconductivité, avec interactions Coulombiennes écrantées comme mécanisme d'appariement des paires de Cooper. Nos résultats concernant la température critique montrent une dépendance linéaire avec la température de Fermi du matériau et nous constatons un accord entre température critique expérimentale et de notre modèle pour divers semi-métaux de Luttinger à base de bismuth, comme YPtBi, YPdBi, LuPtBi et LuPdBi.

La réponse en densité de charge et spin à des impuretés locales électriques et magnétiques est aussi étudiée à température nulle analytiquement et à température non-nulle numériquement et est comparée aux résultats connus du gaz d'électron libre et des semi-métaux de Dirac. Contrairement à ces derniers, une réponse magnétique anisotrope est observée pour les semi-métaux de Luttinger et la susceptibilité magnétique de spin résultante se trouve être diamagnétique. Un Hamiltonien d'interaction entre deux impuretés magnétiques médié par le mécanisme RKKY, l'interaction entre des impuretés magnétiques obtenue par l'intermédiaire des électrons libres du matériau, est aussi présenté et discuté pour différents semi-métaux. Cette interaction par couplage RKKY pourrait être à l'origine de phases magnétiques exotiques, comme dans le cas du pyrochlore  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ .

Nous terminons en soulignant les explorations possibles concernant nos résultats, en ajoutant ou modifiant des termes brisant une symétrie dans l'Hamiltonien initial.

**Mots clés : semi-métaux de Luttinger, couplage spin-orbite, supraconductivité non-conventionnelle, équation d'Eliashberg, potentiel Coulombien écranté, interaction RKKY, susceptibilité de spin.**



# Abstract

---

In this master thesis, I review my work on the superconductivity and on the inhomogeneities induced by impurities in Luttinger semimetals. Luttinger semimetals are characterized by a quadratic band-touching between electron and hole bands, at a time-reversal-invariant point of the Brillouin zone, and that describes effectively pseudo-spin  $3/2$  fermions.

The superconductivity in some Luttinger semimetals can be peculiar due to the increase of the optical dielectric constant through interband excitations. For example, in YPtBi, the superconducting critical temperature is at odds with theoretical expectations from the BCS theory where Cooper pairs are induced by lattice vibrations, the phonons. We thus explore another mechanism of superconductivity, through the microscopic theory of Eliashberg that we solve numerically and where Cooper pairs are induced by the screened Coulomb interaction. In particular we compute the critical temperature and show that it scales linearly with the Fermi temperature of electrons, and compare our results to experimental observations.

The multiple bands in Luttinger semimetals also affect the inhomogeneities in charge and in spin due to a charged or a magnetic impurity. We mainly study this phenomenon at zero temperature through analytical calculations and explore the influence of temperature numerically. We compare our results with inhomogeneities in a normal and in a Dirac electron gas. In particular, our results indicate that Luttinger semimetals tend to be diamagnetic on the contrary to normal and Dirac electron gases. We also derive the effective Hamiltonian of two magnetic impurities, where their mutual interaction is mediated by conduction electrons, also known as the RKKY mechanism. This interaction by RKKY coupling could be at the origin of exotic magnetic phases, as in the case of the pyrochlore  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ .

We finish by highlighting possible explorations of our results, by adding or modifying terms in the initial Hamiltonian.

**Keywords:** Luttinger semimetals, spin-orbit coupling, unconventional superconductivity, Eliashberg equation, screened Coulomb potential, RKKY interaction, spin susceptibility.



# Table des matières

---

<b>Résumé</b> .....	5
<b>Abstract</b> .....	7
<b>Liste des tableaux</b> .....	13
<b>Liste des figures</b> .....	15
<b>Liste des sigles et des abréviations</b> .....	19
<b>Remerciements</b> .....	21
<b>Chapitre 1. Introduction: semi-métaux de Luttinger</b> .....	23
1.1. Modèle .....	24
1.2. Revue de littérature et orientation de nos travaux .....	27
1.2.1. Réponse à une impureté locale .....	27
1.2.2. Supraconductivité des demi-Heuslers à base de bismuth .....	29
<b>Chapitre 2. Impureté et écrantage</b> .....	31
2.1. Écrantage électronique et fonctions diélectriques modèles .....	32
2.1.1. Écrantage statique de Thomas-Fermi .....	33
2.1.2. Limite des grandes longueurs d'onde et plasmons .....	35
2.1.3. Approximation de la phase aléatoire RPA, ou de Lindhard .....	37
2.1.4. Polarisabilité RPA statique dans l'espace des vecteurs d'onde et gaz d'électrons libres 3-D: quelques notes .....	40
2.2. Réponse linéaire à une impureté de charge et de spin : susceptibilité généralisée	42
2.2.1. Formalisme .....	42
2.3. Application: réponses statiques du gaz d'électrons libres 3-D et oscillations de Friedel et RKKY .....	44
2.3.1. Oscillations de Friedel et interaction RKKY .....	46
2.4. Application : réponses statiques d'un semi-métal de Dirac .....	47

<b>Chapitre 3. Supraconductivité</b> .....	51
3.1. Caractéristiques et historique .....	51
3.2. Théorie BCS.....	54
3.2.1. Hamiltonien BCS .....	54
3.2.2. Résolution et approximations .....	54
3.3. Équation d’Eliashberg .....	56
3.3.1. Hamiltonien d’Eliashberg et fonctions de Green .....	56
3.3.2. Équations du mouvement des fonctions de Green.....	57
3.3.3. Transformée de Fourier & équation d’Eliashberg.....	60
3.3.4. Brève revue de littérature et méthodes de résolution.....	62
3.3.5. Équation d’Eliashberg symétrique linéarisée & résolution comme système à valeurs propres.....	63
<b>Chapitre 4. Impuretés dans les semi-métaux de Luttinger: oscillations de Friedel et RKKY</b> .....	65
4.1. Introduction .....	65
4.2. Rôle des différents auteurs .....	66
4.3. Impurities in 3D quadratic band-touching Luttinger semimetals: Friedel and RKKY oscillations.....	67
4.3.1. Abstract.....	67
4.3.2. Introduction .....	67
4.3.3. Model .....	68
4.3.4. Response to charge and spin impurities .....	69
4.3.4.1. Friedel oscillations.....	71
4.3.4.2. RKKY coupling .....	72
4.3.5. Effective RKKY Hamiltonian .....	75
4.3.6. Spin susceptibility .....	76
4.4. Discussion .....	76
4.5. Conclusion.....	79
4.6. Appendix A: Fourier transform of the thermal Green’s function .....	80
4.7. Appendix B: Explicit contributions to susceptibilities at $T = 0$ , $m > 0$ .....	81
4.7.1. Relationships to $m < 0$ , $\forall T$ .....	82

<b>Chapitre 5. Supraconductivité par le mécanisme d’interaction Coulombienne écranté dans les semi-métaux de Luttinger . . . .</b>	<b>83</b>
5.1. Introduction . . . . .	83
5.2. Rôle des différents auteurs . . . . .	84
5.3. Superconductivity from Coulomb repulsion in three-dimensional quadratic band touching Luttinger semimetals . . . . .	85
5.3.1. Abstract . . . . .	85
5.3.2. Introduction . . . . .	85
5.3.3. Superconducting pairing . . . . .	87
5.3.3.1. Model . . . . .	87
5.3.3.2. Eliashberg equation . . . . .	88
5.3.3.3. Numerical solution . . . . .	91
5.3.3.4. Structure of the gap function . . . . .	93
5.3.3.5. Superconductivity from polar phonon screening . . . . .	93
5.3.4. Sensitivity of the critical temperature to screening . . . . .	94
5.3.5. Discussion . . . . .	97
5.3.6. Conclusion . . . . .	98
5.3.7. Appendix A: Eliashberg equation for singlet superconductivity . . . . .	99
5.3.7.1. Self-energy in the normal phase . . . . .	102
5.3.7.2. Anomalous self-energy . . . . .	102
5.3.8. Appendix B: Random phase approximation . . . . .	107
5.3.9. Appendix C: Green function integrated over angles . . . . .	108
<b>Chapitre 6. Conclusion et travaux futurs . . . . .</b>	<b>111</b>
6.1. Travaux futurs . . . . .	112
6.1.1. Brisure de la symétrie électron-trou . . . . .	112
6.1.2. Brisure de la symétrie par inversion spatiale: couplage spin-orbite asymétrique . . . . .	113
<b>Références bibliographiques . . . . .</b>	<b>115</b>



## Liste des tableaux

---



# Liste des figures

---

1.1	Structure de bandes d'un semi-métal de Luttinger avec symétries détaillées dans le corps du texte pour (a) $m > 0$ et (b) $m < 0$ . Chaque bande est doublement dégénérée. Les flèches indiquent le couplage intrabande et le couplage interbande. La couleur de chaque bande indique son hélicité $\pm 1/2$ (en bleu) et $\pm 3/2$ en orange.	26
2.1	Polarisabilité RPA du gaz d'électrons libres 3-D, ou fonction de Lindhard. La dérivée première est discontinue à $k = 2k_F$ . À $k = 0$ , la polarisabilité devient simplement la densité d'état $N_\sigma(0)$ à un signe près.	41
2.2	Susceptibilité généralisée d'un gaz d'électron 3-D dans l'espace des positions ou oscillations de Friedel. La réponse entre charges et entre spins est la même dans ce modèle.	46
4.1	Spectrum of a Luttinger semimetal for (a) $m > 0$ and (b) $m < 0$ . The Fermi surface is in the lower band and, depending on the sign of the band mass $m$ , it crosses different eigenstates (a) $ \pm 1/2\rangle_{\mathbf{k}}$ and (b) $ \pm 3/2\rangle_{\mathbf{k}}$ of the helicity operator $\hat{\lambda} = \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}}/k$ . This influences the intraband and interband scattering in the presence of a magnetic impurity. We respectively refer to the lower and upper band as the conduction and valence band in the text, since we consider hole doping.	69
4.2	Friedel oscillations in response to an impurity that increases the potential at $\mathbf{r} = 0$ in a Luttinger semimetal with hole-like doping at (a) $T = 0$ with both intraband and interband contributions (b) $T \neq 0$ , showing the damping as the temperature increases. The intraband contribution dominates at both short and long range and the interband coupling is only apparent at short range.	70
4.3	Amplitude of the transverse, $\chi_T$ , and longitudinal, $\chi_L$ , RKKY coupling between two magnetic impurities for a single quadratic band ( $\chi_L = \chi_T$ , with $m < 0$ ) and a Luttinger semimetal (with hole-like doping). (a,b) At $T = 0$ with a $10\times$ zoomed inset, with (a) $m > 0$ and (b) $m < 0$ . (c,d) At finite temperature with (c) $m > 0$ and (d) $m < 0$ . On the contrary to a normal electron gas, a Luttinger semimetal has opposite transverse and longitudinal couplings at short distances.	

	This behaviour is preserved at larger temperatures where we also observe a change in the periodicity of the oscillations. ....	73
4.4	Magnetic susceptibilities as a function of temperature. The Pauli susceptibilities of a normal electron gas (in orange) is paramagnetic while it is diamagnetic in a Luttinger semimetal (plain line, in blue). Also shown is the Landau susceptibility in Luttinger semimetals [1] that we draw for a cutoff energy $E_0/E_F = 10$ (dashed line). ....	77
5.1	(a) Band-structure of the quadratic band touching Luttinger model; the gray plane is at the chemical potential. The upper (red) and lower (blue) bands are doubly degenerate, and we consider a singlet pairing within each band. (b,c) Behaviour of (b) $\xi_\sigma(i\omega_n, k) + \chi_\sigma(i\omega_n, k)$ and (c) $Z_\sigma(i\omega_n, k)$ for $r_s = 4$ with $\sigma = +$ in red and $-$ in blue. The Coulomb repulsion mostly affects the single-particle Hamiltonian at the Fermi energy (here, $\sigma = -$ and $(i\omega_n, k) = (0, k_F)$ ). ....	87
5.2	Critical temperature, $T_c$ , in units of $K^* = m/(m_e\epsilon^{*2})K$ , as a function of the Fermi temperature and the Wigner-Seitz radius, for the Luttinger semimetal (plain) and for the single quadratic band [2] (gray, dashed). As a reference, we show the Bose-Einstein condensation temperature $T_{B2}$ for free bosons with effective mass $2m$ and density $n/2$ . ....	90
5.3	Gap functions $\bar{\phi}_\pm(i\omega_n, k)$ (5.3.9) on the (a) lower and (b) upper band for $\ell = 0$ ( $s$ -wave) and $r_s = 5$ , they are normalized such that $\bar{\phi}_-(i\pi T_c, k_F) = 1/(\pi T_c)^2$ . The peak at $k = k_F$ indicates that pairing mostly occurs at the Fermi surface. ....	92
5.4	Functional derivative $\delta T_c/\delta\epsilon(i\Omega_n, q)$ of the critical temperature over the dielectric permittivity at $r_s = 20$ in percentage of $T_c/\epsilon^*$ (a) for a single quadratic band and (b) for the quadratic band touching Luttinger model. The black line is the dispersion relation of plasmons and the white dashed lines are the branches of the particle-hole excitation diagram. These lines are a guide to the eye, since they are computed for real frequencies. These figures indicate that the critical temperature is mostly sensitive to the long-range screening from plasma oscillations, and from the static scattering at $2k_F$ . ....	95
5.5	Proportion of $ \bar{\phi}_+(i\omega_n, k) $ in percentage of $ \bar{\phi}_-(i\omega_n, k)  +  \bar{\phi}_+(i\omega_n, k) $ for $\ell = 0$ ( $s$ -wave) and (a) $r_s = 1$ , (b) $r_s = 5$ and (c) $r_s = 15$ . The components of $\bar{\phi}_+$ that dominate over $\bar{\phi}_-$ are above the gray plane, at 50%, and this happens away from the Fermi surface where $k = k_F$ and $\omega_n \approx 0$ . ....	105

5.6 Asymptotic behaviour of the gap function for (a) large frequencies for different  $k/k_F$  and for (b) large wavevectors for different  $\omega_n/E_F$ , for  $\ell = 0$  and  $r_s = 5$ . The black line is a guide to the eye for the expected asymptotic behaviour. . . . . 106



## Liste des sigles et des abréviations

---

Théorie BCS	Théorie de la supraconductivité formulée par Bardeen, Cooper et Schrieffer en 1957
RPA	Approximation de la phase aléatoire dans le contexte de l'écrantage du potentiel coulombien, de l'anglais <i>Random phase approximation</i>



## Remerciements

---

J'aimerais remercier mon superviseur et mes collègues pour leur soutien, en particulier pendant la crise sanitaire. Je souhaite particulièrement remercier mon collègue et ami Sergueï Tchoumakov pour ses conseils et son support tout au long de ce travail.



# Chapitre 1

---

## Introduction: semi-métaux de Luttinger

Le travail original en 1956 de Kohn et Luttinger [3], décrivant un Hamiltonien général pour les semi-conducteurs en présence ou non de champ magnétique externe, s'inscrit dans une période où les différents phénomènes associés à la nature quantique et à basses températures commençaient seulement à être compris d'un point de vue théorique. On peut par exemple penser à la célèbre théorie sur l'origine microscopique de la supraconductivité de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) en 1957 [4]. Luttinger est aussi entre autres connu pour son apport au modèle de liquide d'électrons en interaction en une-dimension dit de Tomonaga-Luttinger en 1963 [5] et son travail sur la supraconductivité avec Kohn [6] mettant en lumière un mécanisme de la supraconductivité impliquant seulement les électrons et leur potentiel écranté, appelé mécanisme de Kohn-Luttinger.

Nos travaux s'intéressent justement à l'étude de diverses propriétés d'écrantage et topologiques et de la nature de la supraconductivité dans les semi-métaux dits de Luttinger: l'appellation de semi-métal est un terme courant en physique des matériaux, mais l'appellation semi-métal de Luttinger est récente, avec des mentions datant des années 2010, mais utilisant fondamentalement toujours le modèle de 1957 de Luttinger [3]. Tels les semi-métaux de Dirac, les semi-métaux de Luttinger présentent un fort couplage spin-orbite, mais au lieu d'une structure de bande linéaire comme dans les semi-métaux de Dirac, les semi-métaux de Luttinger ont une structure de bande quadratique et les quasi-particules en jeu sont décrites par un pseudo-spin  $j = 3/2$ . Ces dernières années, les semi-métaux de Luttinger sont étudiés de façon théorique et expérimentale sur diverses propriétés, dont la revue formelle est présentée à la section 1.2 suivante.

Le plan de ce mémoire est le suivant: d'abord nous introduisons le modèle mathématique et physique de Kohn et Luttinger [3] et faisons une revue de littérature concernant les divers phénomènes physiques étudiés dans les semi-métaux de Luttinger afin d'orienter nos travaux. Dans le deuxième chapitre, nous présentons une introduction à l'écrantage et des réponses correspondantes produites par des impuretés localisées. Ces concepts pourront être retrouvés

dans notre article intitulé *Impurities in three-dimensional quadratic band-touching Luttinger semimetals: Friedel and RKKY oscillations* [7] et présenté dans le présent document à la section 4.3. Nos travaux portent aussi sur la supraconductivité non-conventionnelle de certains semi-métaux de Luttinger et dans le chapitre 3 une introduction de ce phénomène et de notre méthode de résolution numérique est présentée. Similairement, notre travail intitulé *Superconductivity from Coulomb repulsion in three-dimensional quadratic band touching Luttinger semimetals* [8] est présenté à la section 5.3.

## 1.1. Modèle

Dans cette section nous soulignons le modèle utilisé pour décrire les électrons d'un semi-métal de Luttinger et ses particularités. L'Hamiltonien de Luttinger [3] est dérivé par des arguments de symétrie, mais ici nous préférons poser l'Hamiltonien et décrire les différents termes le composant. Nous nous plaçons dans le cadre de nos travaux à champ magnétique nul  $\mathbf{B} = 0$  et limitons les termes à un ordre quadratique en vecteurs d'onde  $\mathbf{k}$ , pour une surface de Fermi sphérique. Dans ce cas, l'Hamiltonien de Luttinger s'écrit [3, 9]:

$$H_{\text{Lutt}} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \left( \alpha - \frac{5}{4}\beta \right) \mathbf{k}^2 \mathbb{1}_4 + \beta (\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}})^2 + \delta \sum_i k_i \left( \hat{J}_{i+1} \hat{J}_i \hat{J}_{i+1} - \hat{J}_{i+2} \hat{J}_i \hat{J}_{i+2} \right) \right) - E_F. \quad (1.1.1)$$

Notons d'abord que le modèle de Luttinger décrit des particules de pseudospin total  $j = 3/2$  avec opérateur correspondant  $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$  et avec les différentes composantes  $\hat{J}_i$ ,  $i = (x, y, z)$  explicitement en forme matricielle

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_y = \frac{1}{2i} \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ -\sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{J}_z = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix}. \quad (1.1.2)$$

Les paramètres  $\alpha$  et  $\beta$  caractérisent la symétrie particule-trou du spectre en énergie correspondant. Le paramètre  $\delta$  représente l'amplitude d'un terme brisant la symétrie par inversion spatiale, couramment référé comme un terme de *asymmetrical spin-orbit coupling*, ASOC. Dans la littérature un tel terme est souvent associé au couplage spin-orbite de Rashba/effet de Rashba pouvant être déduit d'une théorie " $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ " et prenant la forme courante de  $\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma}$  dans le contexte de spins-1/2 [10]. La forme ici est obtenue en fonction du modèle de Luttinger.

Pour les matériaux tels les demi-Heuslers à base de bismuth YPtBi, LuPtBi, etc. les calculs *ab-initio* indiquent que ce terme est négligeable [9], ou peut être traité de façon perturbative comme nous le soulignons dans la conclusion 6.1.2: dans nos travaux, nous

négligeons simplement ce terme. Pour des raisons de simplicité, nous supposons une structure de bande avec symétrie particule-trou, ce qui implique  $\alpha = 0$  et  $\beta = 1$  et discutons similairement dans la conclusion, 6.1.1, comment traiter l'asymétrie particule-trou. Notons qu'alors l'Hamiltonien  $H_0$  est invariant par rotation, inversion spatiale et renversement du temps [11–13] et s'écrit explicitement comme

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( -\frac{5}{4} \mathbf{k}^2 \mathbb{1}_4 + (\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}})^2 \right) - E_F. \quad (1.1.3)$$

Il s'agit de l'Hamiltonien que nous utilisons dans le cadre de nos présents travaux.

Les quatre états propres correspondants  $|\pm 1/2\rangle_{\mathbf{k}}$  et  $|\pm 3/2\rangle_{\mathbf{k}}$  sont dénotés par les valeurs propres  $\lambda = \pm 1/2, \pm 3/2$  de l'opérateur hélicité  $\hat{\lambda} = \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}}/k$ . L'expression des vecteurs propres étant peu pratique, nous préférons une approche par le formalisme des fonctions de Green dans notre travail sur les réponses aux impuretés et introduisons la fonction de Green thermique correspondante

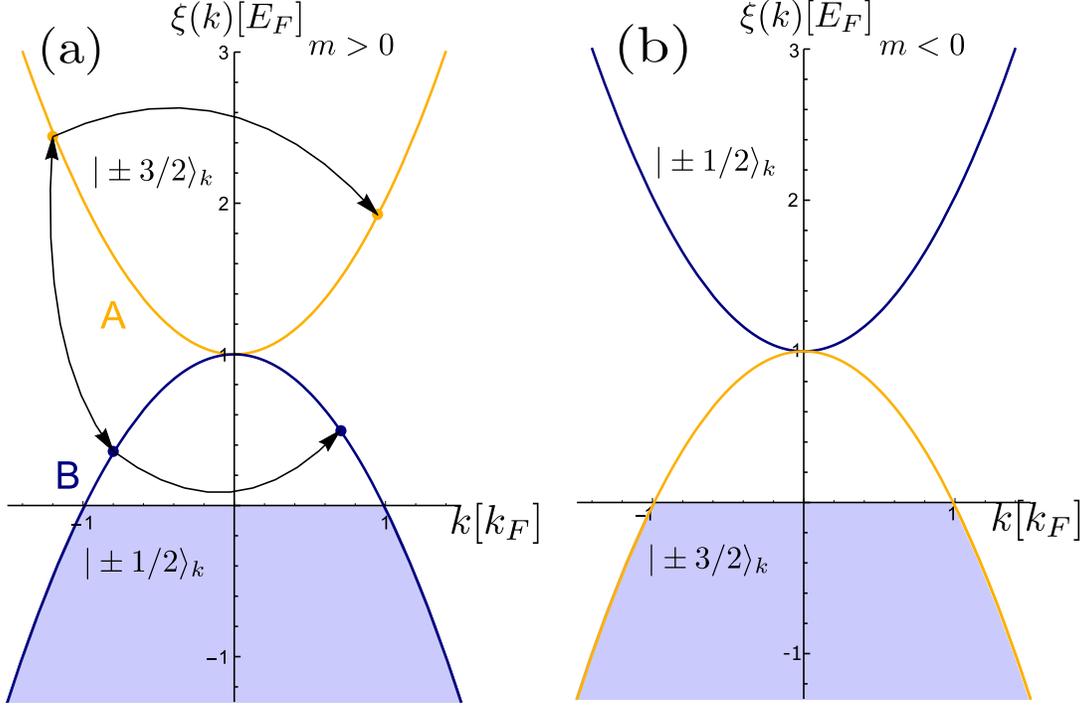
$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\frac{i\omega_n \mathbb{1}_4 + H_0(\mathbf{k})}{(\xi_+(\mathbf{k}) + i\omega_n)(\xi_-(\mathbf{k}) + i\omega_n)}, \quad (1.1.4)$$

où  $\hbar\omega_n = (2n + 1)\pi k_B T$  sont les fréquences de Matsubara fermionique à température  $T$  et avec  $n$  entier avec le spectre en énergie correspondant  $\xi_{\pm}(\mathbf{k})$ ,

$$\xi_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_F. \quad (1.1.5)$$

Ce dernier est illustré à la Fig.1.1 détaillée ci-bas, qui apparaît aussi dans notre article [7]. Dans ce qui suit, nous posons  $\hbar = k_B = 1$ , écrivons les énergies en unités de l'énergie de Fermi  $|E_F|$ , et vecteurs d'onde en unités du vecteur d'onde de Fermi  $k_F$ . Nous considérons que l'énergie de Fermi est toujours située dans la bande du dessous,  $E_F = -k_F^2/(2|m|) < 0$ . Gardons en tête que selon le signe de la masse  $m$ , la surface de Fermi est contenue dans un état propre d'hélicité  $\pm 1/2$  si  $m > 0$  ou  $\pm 3/2$  si  $m < 0$ . Pour une interaction purement électrique dans nos travaux, les résultats sont inchangés par le signe de la masse. Par contre, pour la réponse spin-spin de notre premier travail, le signe de la masse aura un impact sur la réponse RKKY correspondante et est discuté plus amplement dans nos résultats au Chap. 4.

Dans nos calculs, nous faisons souvent référence au couplage intrabande et interbande. Ces deux termes correspondent respectivement au recouvrement entre deux états d'une même bande ou entre deux bandes différentes, que l'on schématise par les flèches sur la Fig. 1.1 par des flèches soit dans une même bande, soit entre les deux bandes. Sur cette figure, la couleur de la bande est associée à l'état propre pour faciliter la compréhension visuelle et les étiquettes "A" et "B" font référence à des expressions dans notre travail sur les impuretés. À température nulle, il n'y a pas de couplage intrabande dans la bande du dessus, puisque celle-ci est vide.



**Fig. 1.1.** Structure de bandes d'un semi-métal de Luttinger avec symétries détaillées dans le corps du texte pour (a)  $m > 0$  et (b)  $m < 0$ . Chaque bande est doublement dégénérée. Les flèches indiquent le couplage intrabande et le couplage interbande. La couleur de chaque bande indique son hélicité  $\pm 1/2$  (en bleu) et  $\pm 3/2$  en orange.

Il est aussi utile d'introduire l'opérateur projection  $\hat{P}_\sigma(\mathbf{k})$  sur une bande  $\sigma = \pm$ , avec  $\hat{P}_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\mathbb{1}_4 + \hat{H}_0(\mathbf{k})/\xi_\sigma(\mathbf{k})]$ . Ce projecteur nous permet de décrire le facteur de forme ou de chevauchement [12, 14–18] qui apparaît dans l'expression de la polarisabilité dans notre travail sur la supraconductivité et est central pour la description du couplage interbande. Selon que nous discutons d'interaction entre charges ou spins, le facteur de forme prend la forme suivante pour deux bandes  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left[ \hat{P}_{\sigma_1}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \hat{J}_\mu \hat{P}_{\sigma_2}(\mathbf{k}) \hat{J}_\nu \right] &= |\langle \sigma_2, \mathbf{k} | \sigma_1, \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle_{\mu\nu}|^2 \\ &\stackrel{\mu=\nu=0}{=} \frac{1}{2} \left\{ 2 + \sigma_1 \sigma_2 \left[ 3 \cos^2(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}) - 1 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (1.1.6)$$

où  $\mu, \nu \in \{0, 1, 2, 3\}$ . Nous posons  $\hat{J}_0 = \mathbb{1}$  référant à une charge et  $\hat{J}_i$  pour les différentes composantes du spin. Dans notre travail sur la supraconductivité, n'impliquant que l'écrantage Coulombien, nous évaluons explicitement le facteur de forme correspondant avec  $\mu = \nu = 0$  à la deuxième égalité de l'expression précédente. Dans le reste des chapitres introductoires, nous négligeons généralement d'inclure ce facteur de forme par souci de clarté dans les diverses dérivations.

## 1.2. Revue de littérature et orientation de nos travaux

Les semi-métaux de Luttinger [3] tels  $\alpha$ -Sn [19–21], les demi-Heuslers à base de bismuth comme YPtBi, YPdBi, LuPtBi et LuPdBi [22–28], HgSe [29,30], HgTe [31,32] et  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  [33–36] jouent un rôle important dans le champ des matériaux topologiques tridimensionnels. Leurs bandes de valence et de conduction se touchent quadratiquement à un point invariant sous renversement de temps et d'inversion spatiale, typiquement le point  $\Gamma$ . Les quasi-particules en jeu sont caractérisées par un pseudo-spin  $j = 3/2$  avec fort couplage spin-orbite. La dégénérescence des bandes peut être levée, par application d'une contrainte mécanique par exemple, pour obtenir un semi-métal de Dirac ou de Weyl [37,38] ou un isolant topologique [39]. Dans les semi-métaux de Dirac et de Weyl, la topologie non-triviale est responsable de propriétés magnétiques inhabituelles [40–42], de surface [43–45] et de transport [40,46,47].

Il y a ainsi intérêt à étudier et comprendre les interactions électroniques, l'effet du fort couplage spin-orbite, etc. dans les semi-métaux de Luttinger. Des travaux récents d'intérêt variés étudient par exemple la réponse optiques des semi-métaux de Luttinger [16] en phase normale et supraconductrice, les propriétés de transport et thermiques qui pourraient être signature d'un non-liquide de Fermi dans les semi-métaux de Luttinger [48,49] et la compétition de phases topologiques dans les semi-métaux de Luttinger [50,51].

Dans nos travaux, nous nous intéressons entre autres à sonder le fort couplage spin-orbite en étudiant la réponse des matériaux à une impureté locale électrique ou magnétique. Nous faisons le lien avec les semi-métaux de Dirac dont le spectre en énergie est linéaire, produisant les fameux "cônes de Dirac" dans leur structure de bande, et sont décrits par des fermions de spin-1/2. Une plus ample description est présentée à la prochaine sous-section 1.2.1. Nous nous intéressons aussi à la supraconductivité non-conventionnelle de certains de ces matériaux, dont la revue est faite à la deuxième sous-section 1.2.2.

Notons aussi que le groupe de recherche s'est déjà intéressé aux propriétés diélectriques et électroniques des semi-métaux de Luttinger [17]. La description, entre autres, de la permittivité diélectrique sans se limiter à un certain régime (par exemple dans le cas de fréquence ou vecteur d'onde nul, etc.) y est faite et se présente comme une base orientant nos présents travaux sur les semi-métaux de Luttinger.

### 1.2.1. Réponse à une impureté locale

Une façon de sonder le couplage spin-orbite est par la réponse à une impureté localisée de charge ou de spin. Nous faisons référence à la réponse au couplage entre deux charges par "oscillations de Friedel" [52,53] et la réponse entre deux impuretés magnétiques par "oscillations RKKY", faisant référence au mécanisme de couplage magnétique indirect de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida [54–56]. Une introduction à ce formalisme est présentée

au chapitre 2. Notons aussi que dans un travail précédent de notre groupe de recherche il a été montré que le couplage charge-spin était absent dans ce modèle [17].

Les oscillations de Friedel et RKKY à température nulle d'un gaz d'électron 3-D sont connues [57, 58] et l'ajout d'un terme de couplage spin-orbite linéaire à un tel gaz a déjà été étudié [59]. Une étude similaire a aussi été réalisée pour un semi-métal de Luttinger, mais en 2-D [60], ainsi que pour les semi-métaux de Dirac et de Weyl [61–64]. Il est d'autant plus intéressant de comparer ces résultats aux nôtres, puisque les semi-métaux de Luttinger possèdent un spectre en énergie en  $\pm k^2$ , de dispersion similaire à celui d'un gaz d'électron 3-D, mais avec un couplage spin-orbite important, caractéristique entre autres des semi-métaux de Dirac. De plus, puisque la structure de bande des semi-métaux de Luttinger est engendrée à partir d'un semi-métal de Dirac, par application par exemple d'une tension physique ou d'un champ magnétique [38, 50, 65, 66], nos résultats devraient rester valides pour des échelles d'énergie surpassant celle des cônes de Weyl. Le matériau GdPtBi est un exemple de cette relation entre semi-métaux de Luttinger et semi-métaux de Weyl, avec des point de Weyl induits par le champ d'échange des terres rares, mais avec une dispersion de bande quadratique loin de la surface de Fermi [67, 68]. Notons aussi qu'un des matériaux d'intérêt, YPtBi, en plus d'être un supraconducteur non-conventionnel, comme détaillé à la prochaine section, est dit non-centrosymétrique, c'est-à-dire avec un terme brisant la symétrie par inversion spatiale. Par contre, l'amplitude du terme en question est proposée négligeable par des calculs *ab-initio* [9] ou peut-être considéré comme une perturbation comme dans le travail de Ref. [60]. Nous discutons plus en détails de la nature de ce terme à la section 1.1 et comment le traiter dans un travail futur à la conclusion 6.1.2.

Les réponses RKKY sont particulièrement intéressantes à obtenir: elles permettent par exemple le calcul de la susceptibilité de spin dans les semi-métaux de Luttinger. On peut comparer cette dernière à la susceptibilité orbitale paramagnétique dans les semi-métaux de Luttinger obtenue dans un autre travail [1], dont le signe est opposé à celui d'un gaz d'électrons 3-D. De plus, toujours avec la détermination des oscillations RKKY, un Hamiltonien effectif RKKY peut être dérivé, avec des contributions dites d'Ising et d'Heisenberg, et être ensuite utilisé dans un modèle sur réseau pour décrire les différentes phases magnétiques possibles.

Plus spécifiquement, dans le cas du pyrochlore  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ , le couplage magnétique se produit entre les orbitales  $4f$  de l'ion  $\text{Pr}^{3+}$ , décrit par un doublet magnétique  $J = 4$  avec  $J_z = \pm 4$  [35]. Notons que si le pseudospin du doublet en question  $\tau_z$  est aligné dans la direction  $\langle 111 \rangle$  du cristal, alors  $\tau_z$  est décrit comme un dipôle et se couple à la densité de spin des électrons, alors que les autres composantes  $\tau_{x,y}$  sont décrit comme des quadrupôles magnétiques se couplant à la densité de charge des électrons itinérants [69, 70]. Dans nos travaux, nous considérons seulement le cas du couplage d'un dipôle magnétique avec la densité de spin des électrons itinérant. L'échange quadrupolaire est par contre négligé dans certains

travaux portant sur le pyrochlore en question avec interactions RKKY [70,71]. Nos résultats sont donc un premier pas dans la description d'un modèle d'interaction RKKY complet de  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ , qui a été aussi étudié en considérant d'autres interactions et approximations pour explorer la structure de bande topologique résultante [37] ou l'exploration du diagramme de phase magnétique [69].

Nous cherchons donc à obtenir les différentes réponses linéaires d'un semi-métal de Luttinger dans l'espace des positions. Nous nous concentrons pour cette partie au cas statique (fréquence nulle), adéquat pour décrire une impureté. Nous explorons analytiquement le régime  $T = 0$  et numériquement le cas à température donnée.

### 1.2.2. Supraconductivité des demi-Heuslers à base de bismuth

La supraconductivité des matériaux semi-conducteurs est étudiée expérimentalement depuis les années 1960 [72]. Pour la plupart de ces matériaux, tels que le diamant et le silicium, les données expérimentales et les calculs ab-initio [73–75] pointent vers un mécanisme d'appariement conventionnel médié par les phonons [4, 58]. Par contre, on ne peut pas en dire autant concernant certains semiconducteurs comme  $\text{SrTiO}_3$  [76–78],  $\text{PbTe}$  [79] et des demi-Heuslers à base de bismuth  $\text{YPtBi}$  [80], où d'autres mécanismes d'appariement sont suggérés [2, 12, 81, 82].

C'est justement les matériaux de la famille de  $\text{YPtBi}$  qui nous intéressent: plusieurs travaux proposent que  $\text{YPtBi}$ ,  $\text{YPdBi}$ ,  $\text{LuPtBi}$ ,  $\text{LuPdBi}$  et  $\text{LaPtBi}$  sont des semi-métaux de Luttinger [24–28] où une phase supraconductrice est observée expérimentalement à des températures critiques de  $T_c = 0.7 - 1.5\text{K}$ , avec une faible densité de porteurs de charge,  $n \approx 10^{19}\text{cm}^{-3}$  [83–86]. Bien que ne possédant pas une haute température critique comparativement à plusieurs autres matériaux supraconducteurs, les théories conventionnelles avec couplage électron-phonon comme mécanisme dominant de la supraconductivité ne parviennent pas à prédire cet ordre de grandeur de  $T_c$  pour une si faible densité de porteurs de charge [12, 80]: les prédictions sont de  $T_c \approx 10^{-3}\text{K}$  pour  $\text{YPtBi}$ , une différence de plusieurs ordres de grandeur avec la  $T_c = 0.77\text{K}$  observé en laboratoire!

Il faut ainsi se tourner vers un autre mécanisme de la supraconductivité, qui prend source dans l'interaction Coulombienne écrantée dynamique des électrons. Ceci n'est pas sans rappeler le travail de Kohn et Luttinger [6], qui ont cependant seulement considéré l'écrantage statique (à fréquence nulle) du potentiel Coulombien et ce dans des métaux, ledit mécanisme de Kohn-Luttinger. Dans notre travail, nous considérons plutôt un écrantage dynamique calculé dans l'approximation de la phase aléatoire, RPA, et ce dans un semi-métal de Luttinger. Cette approche prend ainsi compte à la fois des effets d'écrantage statique, typiques du mécanisme de Kohn-Luttinger, mais aussi de la dynamique de l'écrantage. Pour

une interaction répulsive, l'équation de la supraconductivité nécessite un gap qui change de signe que ce soit en fréquence, en vecteur d'onde ou entre les composantes orbitales. On peut alors montrer que le gap supraconducteur change de signe en fréquence pour une supraconductivité dite de type *s-wave* singulet, où le gap paramètre d'ordre est à symétrie sphérique [2, 82, 87].

Le mécanisme dynamique proposé est alors un couplage entre les électrons et les plasmons, un mouvement collectif de quasi-particules électroniques à la fréquence plasma, puisque le potentiel Coulombien écranté est négatif (donc attractif) sous cette fréquence plasma et au-dessus du continuum d'excitation électron-trou [88].

De telles approches ont déjà été étudiées pour des modèles à bandes quadratiques dégénérés, mais sans couplage spin-orbite, ce qui est adapté par exemple pour SrTiO<sub>3</sub> [2, 89], mais pas pour les semi-métaux de Luttinger comme YPtBi [80], avec leur fort couplage spin-orbite, la nature  $j = 3/2$  des quasi-particules et le couplage interbande.

De plus, il a été récemment suggéré que les semi-métaux de Luttinger comme YPtBi constituent une plate-forme pour les paires de Cooper de fermions de spin-3/2, incluant la supraconductivité topologique [12, 13, 25, 80, 90–93].

# Chapitre 2

---

## Impureté et écrantage

*Notons que les démarches mathématiques présentées ici sont fortement inspirées des manuels de Kittel [94], de Mahan [58] et de Giuliani [53]. Nous posons  $\hbar = k_b = 1$  et travaillons en unités CGS.*

L'écrantage et les effets de retard sont des concepts essentiels à la description d'un gaz de particules chargées, ici les électrons de conduction du matériau.

Les électrons de conduction étant très nombreux, nous ne sommes pas en mesure de décrire leur mouvement individuel et nous utilisons plutôt un ensemble de modèles effectifs. Par exemple, on peut décrire l'ensemble des électrons de façon macroscopique comme un gaz de particules chargées. A basse température, ce gaz est sensible aux phénomènes quantiques. Dans nos travaux, nous nous intéressons aux réponses à des impuretés locales de charge ou de spin et donc à comment les électrons du milieu sont influencés par une telle perturbation dans les semi-métaux de Luttinger. Similairement, notre travail sur la supraconductivité étudie le cas où les interactions Coulombiennes écrantées des électrons sont à l'origine de l'appariement en paires de Cooper. Puisque le potentiel Coulombien est de nature répulsive entre deux électrons seuls, l'écrantage peut donc même changer le signe de l'interaction électrique entre deux électrons dans un matériau. D'autres phénomènes exotiques ou contre-intuitifs peuvent émerger de l'écrantage, comme des modes collectifs de quasi-particules, tels que les plasmons.

Nous considérons d'abord deux modèles semi-classiques pour l'écrantage du champ électrique entre deux charges. Nous soulignons les caractéristiques et limites de ces derniers, puis nous nous attaquons à la dérivation d'un modèle microscopique plus complet d'écrantage dit de la phase aléatoire (RPA, de l'anglais *Random Phase Approximation*) ou de Lindhard, du chercheur du même nom [95]. Nous nous concentrons ensuite sur la limite statique puisque cela rejoint le cadre de notre travail sur les réponses à des impuretés, dont nous introduisons le formalisme et la notation utilisée, avant de calculer directement la réponse à une impureté

dans l'espace des positions pour deux modèles: celui du gaz d'électrons libres tridimensionnel et celui d'un semi-métal de Dirac.

## 2.1. Écrantage électronique et fonctions diélectriques modèles

Au sein d'un gaz d'électrons, ces derniers interagissent par l'intermédiaire de l'interaction Coulombienne. La propagation d'un champ est modifié par la constante diélectrique. L'écrantage entre les charges peut être capturé par l'expression de la permittivité diélectrique dans l'expression du potentiel électrique. Nous verrons que le modèle de Lindhard retenu interviendra directement aussi dans nos calculs sur les réponses aux impuretés.

Considérons un système de charges initial, perturbé par un champ électrique provenant d'une distribution d'impuretés chargées de densité  $\rho_i(\mathbf{r}, t)$  et de charge totale  $Q_i = \int d^3\mathbf{r} \rho_i(\mathbf{r}, t)$ . Certaines charges du système initial, ici des charges libres, se mettent en mouvement en réponse à ce champ. Ce mouvement de charges se stabilise par rapport au champ électrique jusqu'à annuler les effets du champ à grande distance. Le milieu reste globalement neutre, mais un excès de charge de  $-Q_i$  se localise proche de l'impureté. Cette charge mobile est appelée charge d'écrantage (*screening charges*, d'où l'indice  $s$  suivant) et possède sa propre distribution de charges  $\rho_s(\mathbf{r}, t)$ . Le potentiel écranté résultant  $\phi(\mathbf{r}, t)$  est ainsi donné par

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{r}' \frac{\rho_i(\mathbf{r}', t) + \rho_s(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.1.1)$$

et n'est que l'expression générale d'un potentiel électrique, mais qui fait intervenir les impuretés et la réponse du système à ces dernières. En utilisant un formalisme macroscopique classique, on peut similairement définir la fonction diélectrique  $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$  dans l'espace réciproque des vecteurs d'onde et fréquences par commodité, comme [58]

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = \lim_{\rho_i \rightarrow 0} \left( \frac{\rho_i(\mathbf{k}, \omega)}{\rho_i(\mathbf{k}, \omega) + \rho_s(\mathbf{k}, \omega)} \right). \quad (2.1.2)$$

Dans cette limite,  $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$  devient indépendant de la distribution d'impuretés et réciproquement, est caractéristique du matériau à l'étude. La théorie linéaire d'écrantage suppose que cette définition est vraie pour des distributions  $\rho_i(\mathbf{k}, \omega)$  non-nulles et petites. Une autre caractéristique d'un tel modèle linéaire est que  $\rho_s(\mathbf{k}, \omega)$  est proportionnelle à  $\rho_i(\mathbf{k}, \omega)$ , et suppose en général que la relation précédente est valable pour des valeurs finies de  $\rho_i(\mathbf{k}, \omega)$ .

Bien que la théorie macroscopique définit la fonction diélectrique, la difficulté est d'obtenir une expression pour cette dernière en terme d'opérateurs microscopiques, qui fera l'objet d'approximations. Il s'agit donc de résoudre approximativement l'expression exacte

de la fonction diélectrique. Voyons d'abord deux modèles d'écrantage dérivés de façon semi-classique afin de gagner en intuition: ces deux modèles sont les cas limites du modèle RPA, utilisé dans nos travaux.

### 2.1.1. Écrantage statique de Thomas-Fermi

*Dans cette sous-section, nous nous concentrons sur la limite statique et incidemment n'écrivons pas la dépendance temporelle des différentes quantités par souci de clarté.*

La théorie développée par L. H. Thomas [96] (1927) et Enrico Fermi [97] (1928), couramment appelée théorie de Thomas-Fermi est un cas spécifique de la théorie plus générale de Lindhard [95], et constitue la limite statique  $\omega \rightarrow 0$  et longue portée  $k \ll k_F$  de cette théorie, où  $k_F$  est le vecteur d'onde de Fermi. Elle se base sur des arguments semi-classiques d'électrostatique et commence par considérer l'équation de Poisson en présence d'une distribution d'impuretés  $\rho_i$  écrantée par une distribution de charges  $\rho_s$

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = 4\pi e (\rho_i(\mathbf{r}) + \rho_s(\mathbf{r})) \quad (2.1.3)$$

où  $V(\mathbf{r})$  est l'énergie potentiel électrique. Nous notons par  $n(\mathbf{r})$  la densité de particules en fonction de la densité de charge  $\rho(\mathbf{r})$  comme  $\rho(\mathbf{r}) = en(\mathbf{r})$ .

Écrivons ensuite la densité de charges d'écrantage comme la différence entre la densité totale  $n(\mathbf{r})$  et celle à l'équilibre  $n_0$ ,  $\rho_s(\mathbf{r}) = (n(\mathbf{r}) - n_0)$ . Nous supposons que le potentiel  $V(\mathbf{r})$  varie lentement dans l'espace et que le potentiel chimique  $\mu = E_F(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})$  est partout constant, avec  $E_F(\mathbf{r}) = k_F^2(\mathbf{r})/2m$  l'énergie de Fermi. On peut alors exprimer localement la densité de particules grâce à la formule connue pour un gaz uniforme,  $n(\mathbf{r}) = k_F^3(\mathbf{r})/3\pi^2$  tel que maintenant  $k_F(\mathbf{r})$  est aussi une quantité locale. En regroupant, on trouve

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = 4\pi e \left[ \rho_i(\mathbf{r}) + en_0 \left( 1 - \left( 1 - \frac{V(\mathbf{r})}{E_F} \right)^{3/2} \right) \right]. \quad (2.1.4)$$

Pour une théorie linéaire, il faut de plus supposer que le potentiel est petit face à l'énergie de Fermi,  $V \ll E_F$  et on peut développer le terme  $(1 - V(\mathbf{r})/E_F)^{3/2} \approx 1 - 3V(\mathbf{r})/2E_F$ . L'équation précédente s'écrit alors

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = 4\pi e \rho_i(\mathbf{r}) + \frac{6\pi e^2 n_0}{E_F} V(\mathbf{r}). \quad (2.1.5)$$

Il suffit ensuite de résoudre l'équation différentielle correspondante,  $(\nabla^2 - k_{\text{TF}}^2) V(\mathbf{r}) = 4\pi e \rho_i(\mathbf{r})$ , en l'exprimant par exemple comme une transformée de Fourier:

$$V(\mathbf{r}) = -4\pi e \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\rho_i(\mathbf{k})}{k^2 + k_{\text{TF}}^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.1.6)$$

où  $k_{\text{TF}}^2 = \frac{6\pi e^2 n_0}{E_F}$  est le vecteur d'onde de Thomas-Fermi.

Écrivons l'équation d'un potentiel général en théorie linéaire par la transformée de Fourier correspondante,

$$\phi(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{k^2} \frac{\rho_i(\mathbf{k})}{\varepsilon(\mathbf{k})} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.1.7)$$

où le  $4\pi/k^2$  provient de l'expression du potentiel Coulombien dans l'espace des vecteurs d'ondes. Les seules différences entre ces deux équations sont la fonction diélectrique au dénominateur, et un facteur de  $-e$ , attribuable au fait que  $V(\mathbf{r})$  est une énergie potentielle, *i.e*  $V(\mathbf{r}) = -e\phi(\mathbf{r})$ . On déduit par comparaison que la fonction diélectrique de cette théorie est:

$$\varepsilon_{\text{TF}}(\mathbf{k}) = 1 + \frac{k_{\text{TF}}^2}{k^2}. \quad (2.1.8)$$

Nous comprenons intuitivement la divergence de la fonction diélectrique de Thomas-Fermi à la limite  $k \rightarrow 0$  (ou réciproquement à grande distance) comme étant un écrantage de plus en plus total de l'impureté. Prenons le cas spécifique où la distribution  $\rho_i(\mathbf{r})$  est une charge-point de charge  $Q_i$  à l'origine: l'énergie potentielle correspondant, après intégration par théorème des résidus de l'eq. (2.1.6), est

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{eQ_i}{r} e^{-k_{\text{TF}} r}. \quad (2.1.9)$$

Cette forme rappelle le potentiel de Yukawa par sa dépendance en positions. Notons quelques caractéristiques de ce potentiel : il diminue de façon exponentielle à grande distance de l'impureté, et se comporte en  $\frac{1}{r}$  à courte portée: un peu comme un potentiel Coulombien nu proche de l'impureté, mais avec forte atténuation à grande distance de cette dernière. C'est une conclusion intuitive: puisque le modèle ne fonctionne qu'à petit vecteur d'onde, il décrit donc le régime à grande distance et ne permet pas de bien caractériser l'écrantage proche de la perturbation, du moins en régime quantique. Évidemment, si  $k_{\text{TF}} = 0$ , nous retrouvons le potentiel Coulombien.

Le potentiel de Thomas-Fermi est aussi toujours du même signe entre deux charges données: si nous avons considéré une impureté négative, disons  $Q_i = -e$ , alors l'interaction avec un électron du milieu serait toujours répulsive. Par rapport à notre volet sur la supraconductivité, cela signifie qu'un tel potentiel ne peut pas coupler deux électrons en paire de Cooper. Or nous avons déjà souligné que l'écrantage statique du potentiel électrique peut être un mécanisme d'appariement d'électrons en paire de Cooper, le mécanisme de Kohn-Luttinger [6]. Ce mécanisme prend source dans l'oscillation du signe de la densité de charge à basse température, qui permet l'apparition de zones où le potentiel électrique entre deux électrons est attractif. Ces oscillations sont appelées "oscillations de Friedel" [52]. Elles sont un phénomène de nature quantique à basse température et ont pour origine la discontinuité

de l'écrantage du potentiel électrique au delà du vecteur d'onde  $k = 2k_F$ , au delà duquel aucune excitation ne se produit au sein du gaz d'électrons, une conséquence directe de la nature fermionique des porteurs de charge. Nous détaillons plus en profondeur ce phénomène à la sous-section 2.3.1, mais le point est que le modèle de Thomas-Fermi ne permet pas de capturer ce phénomène quantique par son formalisme. De plus, le modèle de Thomas-Fermi considère aussi seulement un gaz d'électrons libres avec perturbations et ne permet pas vraiment d'inclure les caractéristiques d'un système plus complexe avec un Hamiltonien donné. En particulier, la dérivation semi-classique ne permet pas d'inclure d'éléments microscopiques à la théorie.

Ainsi, l'attrait du modèle de Thomas-Fermi réside dans sa simplicité, mais ne permet d'explorer que le régime statique à petits vecteur d'onde et fait rapidement défaut lorsqu'il faut considérer un modèle microscopique plus réaliste et complet de la permittivité diélectrique. Avant de dériver un modèle plus complet, attardons nous à une autre dérivation semi-classique, cette fois dynamique, *i.e.* à fréquence  $\omega$  finie, mais à longue portée,  $\mathbf{k} \rightarrow 0$ .

### 2.1.2. Limite des grandes longueurs d'onde et plasmons

Nous considérons maintenant la limite opposée et cherchons une expression semi-classique à la fonction diélectrique à longue portée,  $\mathbf{k} \rightarrow 0$ . Le modèle de Thomas-Fermi est une théorie d'écrantage purement statique et puisque nous considérons maintenant une théorie dynamique avec  $\omega \neq 0$ , nous notons la fonction diélectrique avec ces deux arguments,  $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ .

Considérons d'abord un métal avec son gaz d'électrons libres et ses ions positifs à l'équilibre. Si une perturbation, comme un champ électrique externe, déplace légèrement et collectivement les charges négatives par rapport à leur ion, une force de rappel est présente pour les ramener à l'équilibre: celle-ci est la force de Coulomb. Classiquement, l'équation du mouvement pour  $n$  électrons déplacés d'une petite distance  $x$  en une dimension par simplicité, s'écrit  $nm \frac{d^2 \mathbf{x}(t)}{dt^2} = -neE\mathbf{x}(t)$ . Le champ uniforme d'amplitude  $E = 4\pi n e x$  est le champ électrique résultant du déplacement du nuage d'électron. On le déduit en considérant que le petit déplacement uniforme des électrons produit un système analogue à deux plaques minces de densité de charge opposées  $\pm n e x$ . En l'insérant dans l'équation du mouvement, on trouve la relation

$$\frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -\frac{e\mathbf{E}}{m} = -\frac{4\pi n e^2}{m} \mathbf{x} = -\omega_p^2 \mathbf{x}, \quad (2.1.10)$$

qui est l'équation différentielle d'un oscillateur harmonique de fréquence  $\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}}$ . Ainsi les électrons oscillent collectivement autour de leur ion à une certaine fréquence qu'on appelle la fréquence plasma.

On peut aussi définir la fonction diélectrique dans ce formalisme. Considérons que la perturbation initiale soit un champ électrique externe oscillant à fréquence  $\omega$  tel que

$\mathbf{E}_{ext}(\omega) = \mathbf{E}_0 e^{i\omega t}$ . Si on suppose de plus que le déplacement  $\mathbf{x}(\omega) = \mathbf{x}_0 e^{i\omega t}$  est en phase avec le champ externe, l'équation du mouvement pour  $n$  électrons dans ce champ est

$$-\omega^2 m \mathbf{x} = -e \mathbf{E}_{ext}. \quad (2.1.11)$$

La polarisation conséquente est  $P(\omega) = -n e x = -\frac{ne^2}{m\omega^2} E_0$ . On définit la fonction diélectrique en fonction de la polarisation et du champ électrique appliqué comme

$$\varepsilon(\mathbf{k} \rightarrow 0, \omega) = 1 + 4\pi \frac{P(\omega)}{E(\omega)}. \quad (2.1.12)$$

Il suffit alors de simplement utiliser les définitions de cette section pour obtenir

$$\varepsilon(\mathbf{k} \rightarrow 0, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}. \quad (2.1.13)$$

Les quasi-particules résultantes de la quantification de ces oscillations plasmoniques sont appelées plasmons, couplent le champ électrique à la densité de charge des électrons et ne possèdent pas de composante magnétique.

Notons que nous avons seulement considéré les ondes longitudinales ici: les ondes transversales se manifestent par exemple en irradiant le matériau avec une onde électromagnétique. L'équation d'onde dans un matériau non-magnétique et isotropique en considérant des ondes planes incidentes de la forme  $\mathbf{E} \propto e^{i\omega t} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  et un champ déplacement  $\mathbf{D} = \varepsilon(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{E}$  est [94, 98],

$$\begin{aligned} \nabla \times \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} \\ -\mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}) + k^2 \mathbf{E} &= \varepsilon(\mathbf{k}, \omega) \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}. \end{aligned} \quad (2.1.14)$$

Où nous avons utilisé l'identité vectorielle  $\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - (\nabla^2 \mathbf{E})$  et nos définitions de champs pour arriver à la deuxième ligne.

Si on considère des ondes transversales de fréquence  $\omega_T$ , alors  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0$  et avec la forme de la fonction diélectrique trouvée précédemment, la relation de dispersion s'écrit:

$$c^2 k^2 = \omega_T^2 - \omega_p^2. \quad (2.1.15)$$

Ceci nous indique que si  $\omega_T < \omega_p$ , alors  $k$  est purement imaginaire et les ondes incidentes ne se propagent pas, créant une zone interdite en fréquences pour  $\omega_T < \omega_p$ .

Pour une onde longitudinale,  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = kE$  et l'équation d'onde prend alors la forme

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega_L) = 0, \quad (2.1.16)$$

ce qui signifie que les ondes collectives longitudinales apparaissent seulement pour des fréquences  $\omega_L$  correspondant aux zéros de la fonction diélectrique [94].

Pour des longueurs d'onde propagées beaucoup plus grandes que les différentes longueurs caractéristiques du matériau, on rejoint le cadre de dérivation de notre fonction diélectrique dans un régime de petits vecteurs d'onde,  $\varepsilon(\mathbf{k} \rightarrow 0, \omega)$ . La condition devient  $1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_L^2} = 0 \Rightarrow \omega_L = \omega_p$ : cela signifie que les excitation longitudinales se produisent à la fréquence plasma, comme par notre dérivation initiale de cette sous-section.

Nous pouvons résumer en soulignant que les plasmons sont un mode collectif de quasi-particules chargées oscillant comme une onde longitudinale à une fréquence  $\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}}$  proche de  $k = 0$ , où le couplage entre champ électrique et densité de charge est le plus fort. Ce modèle prédit aussi une zone d'excitation interdite en fréquences pour  $\omega < \omega_p$ , mais ne nous en dit pas vraiment plus dans un cas général en vecteurs d'onde.

Ayant exploré les cas limites, nous considérons finalement dans la prochaine sous-section le modèle microscopique de la phase aléatoire pour obtenir une expression plus complète dans cette théorie,  $\varepsilon_{RPA}(\mathbf{k}, \omega)$ .

### 2.1.3. Approximation de la phase aléatoire RPA, ou de Lindhard

*Dans ce qui suit, nous introduisons les opérateurs de création et annihilation fermioniques en seconde quantification,  $c_i^\dagger$  et  $c_i$ , en omettant les chapeaux sur ces derniers*

Nous nous sommes limités jusqu'alors à des dérivations semi-classiques et restreintes de la fonction diélectrique et qui ne peuvent pas nous orienter vers une expression plus complète et d'origine microscopique: c'est là que le modèle de la phase aléatoire intervient.

La fonction diélectrique que nous nous apprêtons à dériver se calcule dans l'approximation de la phase aléatoire (RPA), dont la méthodologie a été formalisée par Lindhard [95] en 1954 et se nomme selon l'une ou l'autre appellation, bien que nous y référerons principalement par l'acronyme RPA dans le présent document. Développée dans un contexte microscopique de la mécanique quantique, la fonction diélectrique  $\varepsilon_{RPA}(\mathbf{q}, \omega)$  décrit aussi bien le régime statique  $\omega = 0$  que dynamique et prédit les phénomènes discutés précédemment, les oscillations de Friedel et les plasmons d'un gaz d'électrons (ou dans nos travaux les phénomènes analogue d'un semi-métal de Luttinger). Comme son nom l'indique, l'approximation RPA est une estimation, mais elle reste l'une des approximations les plus populaires pour la description de la fonction diélectrique et de l'écrantage dans les matériaux nécessitant un tel formalisme, puisqu'elle englobe le formalisme physique nécessaire à une telle description. Deux méthodes existent pour sa dérivation, l'une par les équations du mouvement, aussi appelée méthode par champs auto-cohérents (*method of self-consistent fields*) développée par Ehrenreich et Cohen en 1959 [99], et l'autre par le formalisme des fonctions de Green et diagrammes de Feynman: nous choisissons la première dans ce qui suit.

Comme pour la sous-section 2.1.1 sur l'écrantage de Thomas-Fermi, nous introduisons une densité de charge d'impuretés  $\rho_i(\mathbf{r}, t)$  et sa transformée de Fourier  $\rho_i(\mathbf{k}, \omega)$ . Le potentiel correspondant est  $V_i(\mathbf{k}, \omega) = -e\phi_i(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{4\pi e}{k^2} \rho_i(\mathbf{k}, \omega)$ . Le potentiel dû à l'écrantage est similairement dénoté  $V_s(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{4\pi e}{q^2} \rho_s(\mathbf{k}, \omega)$  et le potentiel total est la somme de ces deux derniers,  $V(\mathbf{k}, \omega) = V_i(\mathbf{k}, \omega) + V_s(\mathbf{k}, \omega)$ .

On suppose d'abord que les électrons réagissent au potentiel total  $V(\mathbf{k}, \omega)$ , qui n'est pas connu initialement : le but des prochaines dérivations est l'obtention de l'expression de ce potentiel total. Si  $V_i(\mathbf{k}, \omega)$  est connu, nous définissons la fonction diélectrique dans ce modèle comme le rapport du potentiel des impuretés sur le potentiel total:

$$\varepsilon_{RPA}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{V_i(\mathbf{k}, \omega)}{V(\mathbf{k}, \omega)}. \quad (2.1.17)$$

Nous considérons d'abord un Hamiltonien électronique général à une bande

$$H = \sum_{\sigma, \mathbf{p}} \xi_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma} + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \sigma} V(\mathbf{k}, t) c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma} \quad (2.1.18)$$

où par souci de clarté l'énergie cinétique des électrons est notée par  $\xi_{\mathbf{p}}$ ,  $\mathcal{V}$  désigne un volume et le spin est dénoté par  $\sigma$ .

Nous considérons que l'impureté est traitée de façon classique et oscille à une seule fréquence  $\omega$  tel que  $\rho_i(\mathbf{k}, \omega) = \rho_i(\mathbf{k})e^{i\omega t}$ . Lorsque l'impureté est présente, la valeur d'attente de l'opérateur densité du système est non-nulle et proportionnelle à la valeur d'attente de  $\rho_s(\mathbf{k}, \omega)$ : puisque proportionnelles, on simplifie la démonstration en introduisant une seule densité  $\rho(\mathbf{k}, \omega)$ . Notons aussi qu'en théorie de la réponse linéaire, on suppose que la valeur d'attente de l'opérateur densité est proportionnelle à celle du potentiel causant la perturbation,  $\langle \rho(\mathbf{k}, t) \rangle \propto \langle V(\mathbf{k}, t) \rangle$ .

Nous cherchons l'équation du mouvement de l'opérateur densité  $\rho(\mathbf{k}, t) = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma}(t)$  en le commutant avec l'Hamiltonien, dont le calcul est direct en supposant que le potentiel de l'impureté  $V(\mathbf{k}, \omega)$  oscille à une seule fréquence selon  $e^{-i\omega t}$ :

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma'}(t) &= -(i)^2 \omega c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma'}(t) = [H, c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma'}] \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} [c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma}, c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma'}] + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma} V(\mathbf{k}', t) [c_{\mathbf{k}+\mathbf{k}', \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma}, c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma'}] \\ &= (\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{p}}) c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma'} + \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k}', t) \left( c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}+\mathbf{k}', \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma'} - c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}-\mathbf{k}', \sigma'} \right) \\ &\approx (\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{p}}) c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma'} + \frac{1}{\mathcal{V}} V(\mathbf{k}, t) \left( c_{\mathbf{p}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \sigma'} - c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma'} \right), \end{aligned} \quad (2.1.19)$$

où nous avons utilisé l'approximation RPA à la dernière ligne : elle consiste à ne garder que le terme  $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$  à la sommation de la troisième ligne et de proposer que la somme sur les

autres valeurs de  $\mathbf{k}'$  se moyenne à zéro, même si ce n'est probablement pas le cas. On peut alors écrire une expression pour l'opérateur densité :

$$\rho(\mathbf{k}, t) = \sum_{\mathbf{p}, \sigma} c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}, \sigma} = \frac{V(\mathbf{k}, t)}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \frac{c_{\mathbf{p}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}, \sigma} - c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma}}{\omega + \xi_{\mathbf{p}} - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}}. \quad (2.1.20)$$

Or, nous cherchons une expression pour la valeur d'attente de l'opérateur densité: la valeur d'attente des opérateurs  $c_{\mathbf{p}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}, \sigma}$  et  $c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{p}+\mathbf{k}, \sigma}$  est simplement la distribution de Fermi-Dirac correspondante  $f_D(\xi)$ . En se plaçant dans l'espace des fréquences, on réécrit

$$\langle \rho(\mathbf{k}, \omega) \rangle = \langle V(\mathbf{k}, \omega) \rangle \Pi_{RPA}(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.1.21)$$

où la constante de proportionnalité  $\Pi_{RPA}(\mathbf{k}, \omega)$  est souvent appelée la polarisabilité RPA ou fonction de Lindhard:

$$\Pi_{RPA}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}, \sigma} \frac{f_D(\xi_{\mathbf{p}}) - f_D(\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}})}{(\omega + i\delta) + \xi_{\mathbf{p}} - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}}. \quad (2.1.22)$$

Notons ici l'ajout d'une quantité imaginaire infinitésimale  $i\delta$  avec  $\delta > 0$  qui interviendra lors du calcul explicite de la polarisabilité: nous sommes aussi toujours en fréquences réelles et pour un calcul en fréquences imaginaires comme pour notre travail sur la supraconductivité, il suffit de prendre  $\omega + i\delta \rightarrow i\omega$ .

Le calcul de la polarisabilité permet le calcul de la fonction diélectrique: en effet, en remplaçant dans les définitions de potentiels précédents, on trouve que  $V(\mathbf{k}, \omega) = \frac{V_i(\mathbf{k}, \omega)}{1 - v(\mathbf{k})\Pi_{RPA}(\mathbf{k}, \omega)}$ , avec  $v(\mathbf{k}) = \frac{4\pi e^2}{k^2}$  le potentiel Coulombien nu dans l'espace des impulsions, et donc que la fonction diélectrique est, par identification:

$$\varepsilon_{RPA}(\mathbf{k}, \omega) = 1 - v(\mathbf{k})\Pi_{RPA}(\mathbf{k}, \omega). \quad (2.1.23)$$

La fonction diélectrique RPA peut se décomposer en une partie réelle et imaginaire,  $\varepsilon_{RPA}(\mathbf{k}, \omega) = \varepsilon_1(\mathbf{k}, \omega) + i\varepsilon_2(\mathbf{k}, \omega)$ . La partie réelle peut être exprimée en une seule expression: la partie imaginaire est une fonction par partie selon différents régimes de vecteurs d'onde et fréquences. En particulier cette partie imaginaire de la fonction diélectrique a diverses conséquences et interprétations physiques. Ces expressions pour le gaz d'électrons sont connues [53, 58], mais assez complexes.

Il y a beaucoup à dire sur la fonction diélectrique RPA et sur la polarisabilité correspondante, concernant la dérivation du continuum électrons-trous et ses caractéristiques, ou bien la prédiction des plasmons dans la limite de vecteur d'onde nul. Par contre, par souci de concision, nous nous intéresserons plus en détails aux caractéristiques pertinentes dans le cadre du présent mémoire, c'est-à-dire notre travail sur la réponse linéaire à une impureté

statique. À la prochaine sous-section, nous soulignons quelques caractéristiques de la polarisabilité RPA statique dans l'espace des vecteurs d'onde, puis nous passons au formalisme de notre travail, dans l'espace des positions.

### 2.1.4. Polarisabilité RPA statique dans l'espace des vecteurs d'onde et gaz d'électrons libres 3-D: quelques notes

Le calcul de la polarisabilité RPA complète à l'eq. (2.1.22) demande déjà une certaine attention dans son calcul, même pour le gaz d'électrons libres. De plus, un facteur de forme non-trivial pourrait être présent dans l'expression avant son calcul explicite, comme discuté au précédent chapitre concernant les semi-métaux de Luttinger 1.1.

Dans le cadre de notre travail sur la supraconductivité, nous nous concentrons sur l'expression complète en vecteur d'onde et fréquence de la fonction diélectrique afin de pouvoir l'utiliser dans des calculs numériques. La dérivation de la fonction diélectrique RPA dans les semi-métaux de Luttinger a déjà été faite dans un travail antérieur par notre groupe de recherche [17]. Dans le présent mémoire, nous nous intéressons plutôt au cas statique,  $\omega \rightarrow 0$  et à température nulle, puisque c'est le régime de notre travail sur les réponses à des impuretés dans les semi-métaux de Luttinger: dans ce cas la fonction diélectrique est aussi purement réelle. De plus, nous souhaitons travailler dans l'espace des positions, et nous voyons une autre formulation de la polarisabilité dans cet espace qui s'avère plus commode que la transformée de Fourier de l'expression dans l'espace des vecteurs d'onde.

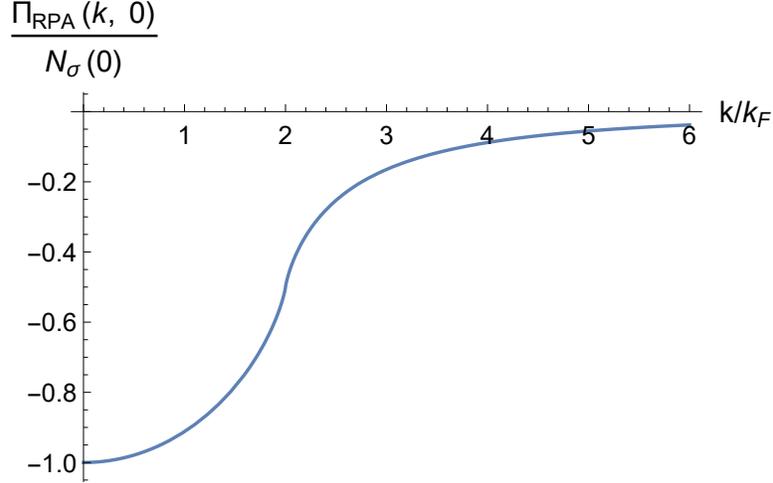
Ainsi, plutôt que de dériver l'expression complète et connue de la polarisabilité RPA pour un gaz d'électrons libres, nous préférons discuter de quelques caractéristiques de cette polarisabilité dans l'espace des vecteurs d'ondes. Écrivons d'abord la polarisabilité RPA pour le gaz d'électrons 3-D dans ce régime statique [53, 58]

$$\Pi_{RPA}(\mathbf{k}, 0) = -N_\sigma(0) \left[ \frac{1}{2} + \frac{x^2 - 4}{8x} \ln \left| \frac{x - 2}{x + 2} \right| \right], \quad (2.1.24)$$

avec la variable sans dimension  $x = k/k_F$  et où  $N_\sigma(0) = \frac{mq_F}{2\pi^2}$  est la densité d'état de spin  $\sigma$  par unité de volume. Nous portons en graphique cette équation à la Fig. 2.1.

D'abord, la polarisabilité dans ce régime est discontinue dans sa première dérivée à  $k = 2k_F$ . Qualitativement, une discontinuité dans l'espace des vecteurs d'onde correspond à une oscillation de fréquence conséquente dans l'espace des positions: ce sont les oscillations de Friedel, absentes du modèle de Thomas-Fermi, que nous dérivons directement dans l'espace des positions dans la prochaine section. Si nous prenons de plus la limite où  $k \ll k_F$ , nous retrouvons alors exactement l'expression de Thomas-Fermi,  $\varepsilon_{RPA}(k \ll k_F, 0) \approx 1 + k_{TF}^2/k^2$ .

Si nous prenons la limite  $\mathbf{k} \rightarrow 0$ , on montre facilement que la polarisabilité devient seulement la densité d'état [53],



**Fig. 2.1.** Polarisabilité RPA du gaz d'électrons libres 3-D, ou fonction de Lindhard. La dérivée première est discontinue à  $k = 2k_F$ . À  $k = 0$ , la polarisabilité devient simplement la densité d'état  $N_\sigma(0)$  à un signe près.

$$\begin{aligned} \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \Pi_{RPA}(\mathbf{k}, 0) &= \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{f_D(\xi_{\mathbf{p}}) - f_D(\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}})}{\xi_{\mathbf{p}} - \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}}} = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \frac{\partial f_D(\xi_{\mathbf{p}})}{\partial \xi_{\mathbf{p}}} \\ &\stackrel{(T=0)}{=} -\frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}} \delta(E_F - \xi_{\mathbf{p}}) = -N_\sigma(0). \end{aligned} \quad (2.1.25)$$

Dans cette limite, la polarisabilité est une mesure du nombre d'états excités disponibles au système pour une énergie d'excitation nulle. On peut montrer que la susceptibilité de spin,  $\chi_P$ , est directement reliée à cette limite, un fait que nous utilisons dans notre travail sur les réponses aux impuretés dans les semi-métaux de Luttinger.

Dans travail sur les réponses aux impuretés, avant de se lancer dans des calculs plus explicites, nous adoptons une certaine notation et formalisme: ces derniers sont introduits à la prochaine section. Soulignons aussi que dans le contexte de notre travail, la notion d'impureté réfère généralement en fait à un ion du réseau. Physiquement, par sa charge non-nulle, un tel ion affecte la densité de charge alentour en se couplant à la densité de charge des électrons itinérants du matériau: similairement, par ses orbitales atomiques, un tel ion est aussi source de spin et se couple aussi à la densité de spin des électrons itinérants. Nous souhaitons de plus calculer les fonctions réponses dans l'espace des positions par commodité. Plutôt que d'effectuer la transformée de Fourier de l'équation précédente, qui s'avère peu intuitive même pour le modèle du gaz d'électrons libres, nous dérivons directement la polarisabilité et la susceptibilité en positions. En effet, si on souhaite faire le transformée de Fourier analytique de notre polarisabilité RPA pour le simple gaz d'électrons, on se retrouve à utiliser des identités complexes entre transformées de Fourier, tel que [57]:

$$\ln \left| \frac{2k_F + q}{2k_F - q} \right| = 2 \int_0^\infty \frac{dx \sin(2k_F x) \sin(qx)}{x} \quad (2.1.26)$$

et il est plus simple de travailler dès le départ en représentation position.

## 2.2. Réponse linéaire à une impureté de charge et de spin : susceptibilité généralisée

*Dans ce qui suit, nous posons  $\hbar = k_B = 1$ , écrivons les énergies en unités de l'énergie de Fermi  $E_F$ , et les vecteurs d'onde en unités du vecteur d'onde de Fermi  $k_F$ . Nous écrivons de plus la susceptibilité généralisée  $\chi_{\mu\nu}$  en unités du potentiel  $V_0$  ou  $V_1$  selon le cas, qui sont introduits ci-bas.*

Dans cette section nous adoptons et justifions le formalisme et notation de notre travail correspondant, puis calculons (finalement) la susceptibilité généralisée dans l'espace des positions. Nous introduisons de ce fait les concepts d'interaction RKKY [54–56] et des oscillations de Friedel [52], deux phénomènes en lien avec les réponses entre charges et spins de notre travail. Nous terminons par le calcul explicite des réponses entre charges et entre spins pour deux modèles, le gaz d'électrons libres 3-D et un semi-métal de Dirac.

### 2.2.1. Formalisme

Nous commençons par considérer un matériau au sein duquel réside une impureté statique de charge, de potentiel  $V_0 \delta^{(3)}(\mathbf{r})$ , ou une impureté statique magnétique de potentiel  $V_1 \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{J}} \delta^{(3)}(\mathbf{r})$ , où  $\mathbf{S} = \{S_x, S_y, S_z\}$  est l'opérateur spin de l'impureté, et  $\hat{\mathbf{J}}$  propre au matériau. Pour un gaz d'électrons libres 3-D, ce sont simplement les matrices de Pauli, mais dans notre article sur les semi-métaux de Luttinger ce sont plutôt les matrices  $4 \times 4$  correspondant à un pseudo-spin  $j = 3/2$ . Dans tous les cas, l'Hamiltonien de perturbation correspondant est simplement

$$\hat{H}_1(\mathbf{r}) = \left( V_0 \mathbb{1} + V_1 \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{J}} \right) \delta^{(3)}(\mathbf{r}) \quad (2.2.1)$$

Nous travaillons toujours en théorie de perturbation linéaire: la densité de porteurs de charge  $J_0(\mathbf{r}) = \langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle = \langle \hat{\psi}_{\mathbf{r}}^\dagger \hat{\psi}_{\mathbf{r}} \rangle$  et les opérateurs de pseudo-spin  $J_i(\mathbf{r}) = \langle \hat{J}_i(\mathbf{r}) \rangle = \langle \hat{\psi}_{\mathbf{r}}^\dagger \hat{J}_i \hat{\psi}_{\mathbf{r}} \rangle$  s'écrivent

$$J_\mu(\mathbf{r}) = \sum_{\nu=0}^3 \chi_{\mu\nu}(\mathbf{r}) S_\nu \quad (2.2.2)$$

où  $\mu \in \{0,1,2,3\}$  et  $S_0 = 1$ . La susceptibilité généralisée  $\chi_{\mu\nu}(\mathbf{r})$  à une température  $T$  peut s'écrire comme une somme sur les fréquences de Matsubara [53, 58]. Dans notre travail,

les réponses entre charges et spins sont découplées. Ainsi, nous référons au couplage entre l'impureté de charge et la densité de charge d'électrons libres par  $\chi_{00}$ . Similairement, nous notons  $\chi_{ij}$  une impureté de spin se couplant à la densité de spin des électrons itinérants. Avant d'expliquer ces phénomènes, nous introduisons le formalisme nécessaire et faisons le calcul de la susceptibilité généralisée pour le gaz d'électrons avant de discuter de l'origine physique de ces couplages.

Nous introduisons l'expression de la susceptibilité généralisée à une température  $T$  et sa transformée de Fourier:

$$\begin{aligned}\chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}) &= -T \int d^3\mathbf{p} \sum_{\omega_n} \text{Tr} \left[ \hat{G}(\mathbf{p}, i\omega_n) \hat{J}_\mu \hat{G}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\omega_n) \hat{J}_\nu \right] \\ \chi_{\mu\nu}(\mathbf{r}) &= \int d^3\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}),\end{aligned}\tag{2.2.3}$$

où  $\hat{G}(\mathbf{p}, i\omega_n)$  est la fonction de Green des électrons du modèle: pour un semi-métal de Luttinger par exemple, la fonction de Green est donnée à l'eq. (1.1.4).

Le signe global détermine si nous considérons une impureté qui augmente ou diminue localement le potentiel. Par exemple pour des électrons itinérants de charge négative, nous considérerions une impureté de charge positive comme perturbation de charge.

Avant de discuter des différents termes de l'expression pour  $\chi_{\mu\nu}$ , remarquons qu'avec le formalisme des transformées de Fourier, on peut écrire directement la susceptibilité dans l'espace des positions, en réécrivant  $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = e^{i(\mathbf{p}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}$  pour avoir l'expression suivante :

$$\begin{aligned}\chi_{\mu\nu}(\mathbf{r}) &= -T \sum_{\omega_n} \text{Tr} \left[ \left( \int d^3\mathbf{p} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \hat{G}(\mathbf{p}, i\omega_n) \right) \hat{J}_\mu \left( \int d^3\mathbf{q} e^{i(\mathbf{p}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} \hat{G}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\omega_n) \right) \hat{J}_\nu \right] \\ &= -T \sum_{\omega_n} \text{Tr} \left[ \hat{G}(\mathbf{r}, i\omega_n) \hat{J}_\mu \hat{G}(-\mathbf{r}, i\omega_n) \hat{J}_\nu \right],\end{aligned}\tag{2.2.4}$$

où avant de procéder à la somme sur les fréquences nous prenons la trace du produit matriciel des fonctions de Green du modèle,  $\hat{G}(\mathbf{r}, i\omega_n)$ , avec les matrices de spin correspondantes  $\hat{J}_\mu$ . Nous introduisons  $\hat{J}_0 = \mathbb{1}$ : pour  $\mu = \nu = 0$ , nous calculons, dans l'espace des positions, une quantité analogue à la polarisabilité RPA, eq. (2.1.22) dans le régime statique. Attention à ne pas confondre la fréquence d'excitation dynamique du système,  $\omega$  et les fréquences de Matsubara  $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ .

Ici, nous avons deux calculs à effectuer: d'abord, la transformée de Fourier de la fonction de Green  $\hat{G}(\mathbf{p}, i\omega_n)$ , écrite initialement dans l'espace des vecteurs d'onde. Une telle transformée est *a priori* plus simple que la transformée de Fourier de l'expression totale RPA. Le prix à payer est un deuxième calcul, la somme sur les fréquences de Matsubara, mais qui est elle aussi réalisable assez directement, du moins à température nulle lorsque la somme devient une intégrale. Nous passons donc d'une transformée de Fourier de l'expression RPA potentiellement irréalisable analytiquement à deux calculs faisables.

Nous passons à un exemple concret, le gaz d'électrons 3-D, dont nous calculons la susceptibilité  $\chi_{\mu\nu}$ . Une fois celle-ci obtenue, nous discutons rapidement de l'origine et de l'implication physique des couplages: nous avons en effet jusqu'alors discuté d'écrantage de charges seulement par souci de simplicité, mais l'interaction magnétique RKKY décrite en théorie linéaire est similaire et se distingue mathématiquement par la présence des matrices de spins  $\hat{J}_i$  non-triviales dans la trace de l'expression pour la susceptibilité.

### 2.3. Application: réponses statiques du gaz d'électrons libres 3-D et oscillations de Friedel et RKKY.

Pour terminer, nous calculons les réponses charge-charge et spin-spin, dans l'espace des positions, d'un gaz d'électrons libres 3-D à température nulle. En utilisant notre équation eq. (2.2.4), nous pouvons facilement calculer la réponse correspondante: en effet pour ce modèle nous verrons que les réponses électriques et magnétiques sont identiques et que le couplage charge-spin est nul.

Considérons un gaz d'électrons libres 3-D de dispersion  $\xi(\mathbf{k}) = -k^2$  avec une énergie de Fermi finie,  $E_F < 0$ . La première étape est d'obtenir la fonction de Green dans l'espace des vecteurs d'onde, puis d'en faire la transformée de Fourier.

Nous écrivons la fonction de Green comme la somme des projecteurs sur leur bande associée  $\sigma$ ,  $\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \sum_{\sigma} \frac{P_{\sigma}}{-i\omega_n - (\xi_{\sigma}(\mathbf{k}) - E_F)}$ . Pour un gaz d'électrons d'une seule bande, le projecteur est simplement l'identité et la fonction de Green est:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{\mathbb{1}}{-i\omega_n + k^2 - 1}. \quad (2.3.1)$$

La transformée de Fourier est directe aussi: on pose sans perte de généralité que  $\mathbf{r} = r\mathbf{z}$ , nous intégrons en angles, puis en positions grâce au théorème des résidus:

$$\begin{aligned} \hat{G}(\mathbf{r}, i\omega_n) &= \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int_0^{\infty} dk k^2 \int_{-1}^1 du \frac{e^{ikru}}{k^2 - (1 + i\omega_n)} \mathbb{1} \\ &= \frac{-i}{(2\pi)^2 r} \int_0^{\infty} dk \frac{k e^{ikr}}{k^2 - (1 + i\omega_n)} \mathbb{1} = \frac{\mathbb{1}}{4\pi r} e^{i \operatorname{sgn}(\omega_n) r \sqrt{1+i\omega_n}}. \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

Ici, la mention  $\operatorname{sgn}(\omega_n)$  réfère explicitement à la fonction signe,  $\operatorname{sgn}(x) = 1$  si  $x > 0$  et  $\operatorname{sgn}(x) = -1$  si  $x < 0$ .

Nous devons ensuite calculer la trace correspondante, où les matrices de spins sont ici les matrices de Pauli. La fonction de Green précédente étant multiple de l'identité on peut évaluer directement la trace de deux matrices de Pauli,  $\operatorname{Tr}[\sigma_{\mu}\sigma_{\nu}] = 2\delta_{\mu\nu}$  et aussi montrer que  $\hat{G}(\mathbf{r}) = \hat{G}(-\mathbf{r})$ . Il est donc facile d'évaluer la trace:

$$\operatorname{Tr} \left[ \hat{G}(\mathbf{r}, i\omega_n) \hat{\sigma}_{\mu} \hat{G}(-\mathbf{r}, i\omega_n) \hat{\sigma}_{\nu} \right] = \frac{\delta_{\mu\nu}}{8\pi^2 r^2} e^{2i \operatorname{sgn}(\omega_n) r \sqrt{1+i\omega_n}}. \quad (2.3.3)$$

Remarquons comme souligné plus haut que pour le gaz d'électrons 3-D, la réponse charge-charge coïncide avec les réponses spin-spin, puisque l'expression est nulle si  $\mu \neq \nu$  et n'est autrement pas dépendante des indices. Pour des systèmes différents, comme les semi-métaux de Luttinger et de Dirac, les réponses électriques et magnétiques peuvent être distinctes.

Il ne reste qu'à effectuer la somme sur les fréquences de Matsubara: à température nulle, la somme devient une intégrale selon la relation  $T \sum_{\omega_n} = \frac{1}{2\pi} \int_{\omega} d\omega$ . Or on peut voir que la somme sur les fréquences négatives est seulement le complexe conjugué de la somme sur les fréquences positives dans l'expression de la trace précédente. Nous n'avons donc qu'à calculer la somme sur les fréquences positives et prendre deux fois la partie réelle du résultat pour avoir la fonction réponse. L'intégrale à réaliser sur les fréquences positives s'évalue alors comme

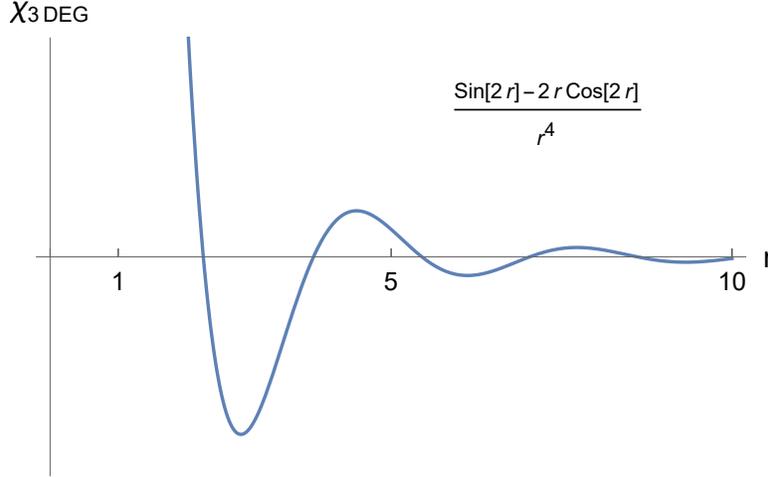
$$-T \sum_{\omega_n > 0} e^{2ir\sqrt{1+i\omega_n}} = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} d\omega e^{2ir\sqrt{1+i\omega}} = -\frac{i+2r}{4\pi r^2} e^{2ir}. \quad (2.3.4)$$

En regroupant et prenant deux fois la partie réelle, nous obtenons la susceptibilité généralisée du gaz d'électrons 3-D:

$$\chi_{\mu\nu}(r) = \delta_{\mu\nu} \frac{\sin(2r) - 2r \cos(2r)}{16\pi^2 r^4}. \quad (2.3.5)$$

Et voilà! Parlons maintenant un peu plus en détail de cette expression, qui est portée en graphique à la Fig. 2.2. Pour simplifier la discussion, nous considérons une réponse entre deux charges, plus intuitive à analyser. Nous remarquons d'abord, comme nous l'avons souligné rapidement pour la polarisabilité RPA dans l'espace des vecteurs d'onde, eq. (2.1.22), que la discontinuité de l'expression à  $k = 2k_F$  engendre une oscillation dans l'espace réciproque: c'est bien ce que nous voyons ici, où les argument des sinus et cosinus sont de  $2k_F r$ , ou simplement  $2r$  dans notre choix d'unités. À petite distance  $r \ll 1$ , l'expression se comporte en  $\sim 1/r$ , comme son analogue Coulombien et est de signe positif. Dans notre contexte, en ayant considéré une perturbation de charge positive, cela signifie que la densité d'électrons augmente lorsqu'on se rapproche de l'impureté, comme attendu intuitivement. À grande distance, la réponse est  $\sim \cos 2r/r^3$ .

Les oscillations et surtout le signe de la réponse en fonction de  $r$  sont les caractéristiques principales de ce modèle d'écrantage. Toujours avec le même système, une réponse négative dénote un manque d'électrons ou un surplus de trous: ces zones où la polarisabilité est négative sont donc synonyme d'interaction globalement attractive pour un électron du milieu. Lorsqu'on parle de charges, cette oscillation dans la densité de charge est appelée oscillation de Friedel [52]. Dans un contexte de supraconductivité, la présence de ces zones où la fonction diélectrique change de signe implique que le potentiel Coulombien écranté correspondant admet des interactions globalement attractives entre certains électrons. Ces derniers peuvent



**Fig. 2.2.** Susceptibilité généralisée d'un gaz d'électron 3-D dans l'espace des positions ou oscillations de Friedel. La réponse entre charges et entre spins est la même dans ce modèle.

alors former des paires de Cooper et le mécanisme de supraconductivité associé est celui de Kohn-Luttinger [6], que nous avons introduit au début du premier chapitre.

Notons aussi que dans la limite où l'énergie de Fermi tend vers zéro, la bande devient pleine et à  $T = 0$  il n'y a plus d'excitations possibles: les réponses sont alors toutes nulles.

Comme nous avons aussi souligné, pour le gaz d'électrons toutes les réponses non-nulles sont dégénérées,  $\chi_{00} = \chi_{ii}$ . Nous avons parlé jusqu'à maintenant de l'écrantage surtout du point de vue des charges afin de gagner en intuition, mais pas vraiment de l'interprétation magnétique en termes des spins. Nous avons brièvement introduit le concept d'oscillations de Friedel et de couplage RKKY au début de cette section et nous introduisons rapidement dans la prochaine sous-section le formalisme et origine physique de ces phénomènes. Nous passons ensuite au calcul de la susceptibilité généralisée pour un semi-métal de Dirac.

### 2.3.1. Oscillations de Friedel et interaction RKKY

Nous avons obtenu la fonction réponse en théorie linéaire d'un gaz d'électrons libres 3-D et avons remarqué que dans ce cas, les réponses magnétiques correspondent à celle électrique. Nous appelons cette dernière oscillation "de Friedel" [52], du physicien du même nom. Diverses approches, parfois semi-classiques, existent pour dériver ce phénomène, mais toutes rejoignent l'équation (2.3.5). Qualitativement, nous savons qu'en régime classique l'électron peut être considéré comme une particule ponctuelle. Or en régime quantique de basse température, l'électron est plutôt caractérisé par une longueur d'onde. En régime classique, le gaz d'électrons détermine de façon quasi-continue la densité de charge résultante d'une perturbation de charge: quantiquement, l'électron détermine plutôt la densité de charge sur une longueur d'onde caractéristique. Très proche de l'impureté, les électrons écrantent correctement cette dernière, mais à partir d'une certaine distance l'effet de taille

de l'électron et d'exclusion fermionique ne permet pas aux autres électrons d'écranter comme ils le voudraient l'impureté. À très basse température, il se crée un arrangement périodique d'électrons et de trous pour compenser cet effet de taille finie des électrons dans l'écrantage: ce sont ces oscillations dans la densité de charge, les oscillations de Friedel. Ces oscillations peuvent être mesurées expérimentalement et comme nous l'avons vu, l'oscillation aura une forme différente selon la nature et les dimensions du système.

Passons maintenant à l'interaction magnétique de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) [54–56]. Cette interaction est un couplage magnétique indirect à grande portée entre les moments magnétiques localisés du matériau et médié par les électrons itinérants de ce dernier. Ce mécanisme est proposé initialement par Ruderman et Kittel [54] en 1954 pour expliquer les bandes particulièrement larges observées par résonance magnétique dans l'argent pur. Initialement, on décrit l'interaction à l'aide de la théorie des perturbations au deuxième ordre: qualitativement, le spin nucléaire d'un atome interagit avec les électrons de conduction et leur spin par l'interaction hyperfine, puis ces électrons interagissent avec un autre atome et créent effectivement une interaction, indirecte, entre les deux spins nucléaires. En 1957 le formalisme est repris par Kasuya [55] qui propose de l'appliquer aux spins d'électrons localisés dans une couche électronique  $d$ , dont le spin se couple similairement aux électrons itinérants. La théorie est complétée un an plus tard en 1958 par Yosida [56], qui généralise l'Hamiltonien d'échange selon qu'on considère un spin électronique ou atomique.

Il y aurait beaucoup à dire sur le mécanisme RKKY, mais dans le cadre de notre travail, il est important de retenir que c'est ce mécanisme qui est en jeu lors de la description des différentes réponses magnétiques  $\chi_{ij}$ . Pour le gaz d'électrons, nous avons vu que les oscillations de Friedel et RKKY sont les mêmes: abordons maintenant un cas où certaines réponses sont distinctes, pour un modèle de semi-métal de Dirac.

## 2.4. Application : réponses statiques d'un semi-métal de Dirac

Nous procédons au même calcul de la susceptibilité généralisée  $\chi_{\mu\nu}$ , mais cette fois pour un semi-métal de Dirac, toujours en 3-D. Ces calculs ont déjà été réalisés [61–64], mais nous les reprenons du début avec notre méthodologie et notation.

Les électrons d'un semi-métal de Dirac sont décrits par l'Hamiltonien suivant :

$$H_D = \alpha \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} + 1 \tag{2.4.1}$$

où le vecteur  $\boldsymbol{\sigma}$  contient les trois matrices de Pauli et où la surface de Fermi est située dans la bande du dessous. Pour tenir compte des symétries du système, les bandes résultantes doivent être doublement dégénérées (comme pour un semi-métal de Luttinger): c'est le paramètre  $\alpha = \pm 1$  qui réalise ceci. Le spectre en énergie est simplement  $\xi_{\pm} = \pm k$ , donnant

le fameux spectre en cônes, doublement dégénéré et centré en  $\mathbf{k} = 0$ . Si les cônes sont séparés dans l'espace des impulsions, on y réfère plutôt comme un semi-métal de Weyl. La fonction de Green pour ce modèle de semi-métal de Dirac est:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} + (i\omega_n - 1)\mathbb{1}}{k^2 - (1 - i\omega_n)^2}. \quad (2.4.2)$$

Nous procédons à la transformée de Fourier de la fonction de Green, mais cette fois nous avons un numérateur non-trivial à intégrer. Comme dans notre travail, nous commençons par définir une intégrale mère,  $I_0$ , qui est la transformée de Fourier du dénominateur seul en considérant encore  $\mathbf{r} = r\mathbf{z}$ :

$$I_0(\mathbf{r}, i\omega_n) = \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk k^2 \int_{-1}^1 du \frac{e^{ikru}}{k^2 - (1 - i\omega_n)^2} = \frac{e^{i \operatorname{sgn}(\omega_n) r(1 - i\omega_n)}}{4\pi r} \quad (2.4.3)$$

et nous nous introduisons une fonction  $I_i$  qui s'exprime comme la dérivée en positions de  $I_0$  pour une composante spatiale  $i$ . En effet, remarquons que le terme  $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + k_z \sigma_z$  au numérateur de la fonction de Green fait apparaître des termes linéaires en composantes du vecteur d'onde  $\mathbf{k} = \{k_x, k_y, k_z\}$ . Plutôt que d'exprimer cette composante en coordonnées sphériques et l'intégrer, on peut plutôt dériver  $I_0$  puisqu'en effet,

$$I_i(\mathbf{r}, i\omega_n) = \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk k^2 \int_{-1}^1 du \frac{k_i e^{ikru}}{k^2 - (1 - i\omega_n)^2} = -i \frac{r_i}{r} \frac{\partial I_0(r, i\omega_n)}{\partial r}. \quad (2.4.4)$$

Avec notre choix  $\mathbf{r} = r\mathbf{z}$  il n'y a que la composante  $\sigma_z r_z$  qui donne une transformée de Fourier non-nulle et dans ce cas,  $\frac{r_z}{r} = \operatorname{sgn}(r_z)$ . On peut donc réécrire la fonction de Green après transformée de Fourier comme:

$$\hat{G}(\mathbf{r}, i\omega_n) = (i\omega_n - 1)I_0(\mathbf{r}, i\omega_n)\mathbb{1} + I_z(\mathbf{r}, i\omega_n)\sigma_z \quad (2.4.5)$$

Dans notre travail sur les semi-métaux de Luttinger, nous utilisons une approche similaire en terme de dérivées d'une intégrale mère: nous avons en plus des termes quadratiques en composantes du vecteur d'onde, qui nécessitent d'aller jusqu'à la deuxième dérivée de l'intégrale mère.

Dans le cas d'un semi-métal de Dirac, l'expression de la trace n'est pas particulièrement révélatrice, mais est indépendante de  $\operatorname{sgn}(r_z)$ , ce dernier terme apparaissant au carré lorsqu'on calcule la trace. On intègre en fréquences à  $T = 0$ : similairement, la somme sur les fréquences négatives est le complexe conjugué sur celles positives. Aussi, il faut multiplier les réponses par un facteur 2 global puisque les bandes sont dégénérées. Nous résumons ci-bas les résultats non-nuls:

$$\begin{aligned}
\chi_{00} = \chi_{zz} &= \frac{(3 - 2r^2) \cos 2r + 4r \sin 2r}{8\pi^3 r^5} \\
\chi_{xx} = \chi_{yy} &= -\frac{\cos 2r + r \sin 2r}{4\pi^3 r^5} \\
\chi_{0z} = \chi_{z0} &= \frac{(1 - r^2) \cos 2r + 2r \sin 2r}{4\pi^3 r^5}.
\end{aligned} \tag{2.4.6}$$

Sans entrer trop dans les détails, remarquons certains points: d'abord, la réponse électrique  $\chi_{00}$  et magnétique de composante  $z$ ,  $\chi_{zz}$ , sont les mêmes. Dans notre travail sur les semi-métaux de Luttinger nous voyons que les réponses analogues sont distinctes et nous appelons  $\chi_{zz}$  comme  $\chi_L$  avec l'indice  $L$  référant à longitudinal, puisque c'est la composante du spin parallèle à  $\mathbf{r}$ . Similairement nous appelons  $\chi_{xx}$  et  $\chi_{yy}$  les réponses transversales,  $\chi_T$ . La dernière réponse non-nulle est un couplage entre charge et spin, qui est nul pour notre système d'électrons libres ou pour notre travail sur les semi-métaux de Luttinger, mais pas pour un semi-métal de Dirac.

Nous avons de plus fait le calcul pour une énergie de Fermi négative: en fait, pour un semi-métal de Dirac on peut montrer que les réponses ne sont pas fonction de l'état propre où se situe l'énergie de Fermi. Ce n'est pas le cas pour un semi-métal de Luttinger, où il y a un effet sur les réponses RKKY. De plus, lorsque  $E_F \rightarrow 0$ , les réponses d'un semi-métal de Dirac ou de Luttinger ne sont pas nulles puisque les excitations interbandes restent possibles. Dans ce cas, on peut montrer que les réponses perdent leur caractère oscillatoire et deviennent purement des lois de puissance. Notons aussi que dans notre travail sur les semi-métaux de Luttinger, nous séparons les réponses intrabandes et interbandes afin de les analyser plus en détails, ce que nous n'avons pas fait ici par souci de concision.



# Chapitre 3

---

## Supraconductivité

*Dans la majorité de ce chapitre et dans notre travail, nous traitons de supraconductivité à champ magnétique nul. Nous posons  $\hbar = k_B = 1$ .*

La supraconductivité est un état de la matière caractérisé entre autres par une absence de résistivité électrique et une expulsion du champ magnétique externe sous une certaine température critique  $T_c$  et un champ magnétique externe critique  $H_c$ . La phase supraconductrice est caractérisée par l'existence d'un gap supraconducteur, que l'on note  $\Delta$ , qui est nul dans la phase normale et prend de l'amplitude dans la phase supraconductrice.

Dans ce chapitre, nous commençons par décrire les principales caractéristiques d'un supraconducteur en faisant un bref historique des découvertes expérimentales avant que soit proposée la première théorie sur l'origine microscopique de la supraconductivité par l'équipe de Bardeen, Cooper et Schrieffer en 1957 [4], la théorie BCS. Nous décrivons plus en détail cette théorie microscopique simplifiée et ses limitations à la section 3.2, puis introduisons ensuite la théorie d'Eliashberg [100] à la section 3.3. Cette théorie perturbatrice est plus complète que la théorie BCS: elle considère un Hamiltonien microscopique incluant explicitement les interactions impliquant les électrons et les phonons et tient compte des effets de retard et de corrélation. Nous dérivons l'équation d'Eliashberg et la résolvons pour calculer la température critique  $T_c$  à champ nul,  $H_c = 0$ , en fonction des paramètres du modèle. Nous discutons finalement de quelques articles résolvant l'équation d'Eliashberg et de la méthode que nous utilisons dans notre travail afin de résoudre cette dernière.

### 3.1. Caractéristiques et historique

La découverte de l'état supraconducteur fait suite au succès de la liquéfaction de l'hélium en 1908 par le physicien allemand Heike Kamerling Onnes, ce qui lui vaut d'ailleurs un prix Nobel en 1913. Jusqu'alors, on utilisait couramment l'azote liquide comme refroidisseur en laboratoire, avec les températures les plus froides atteintes autour de 70 K, puisque

l'azote se liquéfiant à 77 K à pression normale. L'hélium se liquéfie plutôt à 4 K ce qui permet à Onnes d'utiliser cette substance pour étudier la conductivité des métaux purs à très basses températures. En 1911, en refroidissant du mercure à cette température, il s'aperçoit d'un phénomène inattendu: à environ 4.20 K, la résistivité du mercure semble disparaître [101]. C'est la première observation de la supraconductivité et elle souligne l'une des caractéristiques principales de cette phase: son absence de résistivité électrique.

Par l'effervescence scientifique et les nombreuses expériences qui s'ensuivent, on apprend qu'à un matériau donné correspond une température critique  $T_c$  au-dessous de laquelle le matériau devient supraconducteur. On s'aperçoit aussi qu'un champ magnétique externe joue un rôle similaire: il existe une valeur critique supérieure du champ magnétique  $H_c$  qui détruit la supraconductivité. À cette époque, la communauté scientifique n'arrive pas à proposer de modèle théorique complet pour déterminer cette température critique ou expliquer microscopiquement le phénomène de la supraconductivité.

Il faut attendre 1933 pour qu'une expérience de Meissner et Ochsenfeld mette en lumière un autre phénomène caractérisant la phase supraconductrice: l'expulsion totale du champ magnétique à l'intérieur d'un supraconducteur, plus communément appelé effet Meissner [102]. Cette caractéristique est propre à un matériau diamagnétique parfait, et est absente pour un conducteur parfait seulement.

L'observation de l'effet Meissner et des autres caractéristiques de la phase supraconductrice motive les frères London en 1934 à proposer une première théorie phénoménologique de la supraconductivité [103]. En se basant sur des équations classiques de fluide chargé, la théorie permet de prédire l'absence de résistivité et l'effet Meissner d'un supraconducteur au-delà d'une longueur de pénétration caractéristique du champ magnétique externe. Les ébauches de modèles sont surtout de nature phénoménologique jusqu'à la formulation de la théorie de Ginzburg-Landau [104], qui propose que les électrons supraconducteurs sont décrits par une fonction d'onde macroscopique dont l'amplitude constitue le paramètre d'ordre. On utilise aussi le formalisme de la mécanique quantique pour décrire, toujours de façon phénoménologique, la supraconductivité. La théorie de Ginzburg-Landau permet aussi la prédiction d'autres caractéristiques des supraconducteurs, comme la quantification du flux magnétique dans ceux-ci et divers traitements thermodynamiques prédisant une transition de phase du deuxième ordre à champ magnétique nul. Le concept de supraconducteur de type *I* et de type *II* est aussi développé. Les types *I* expulsent le champ magnétique appliqué dans l'entièreté de l'échantillon supraconducteur jusqu'à la valeur critique de champ magnétique externe  $H_c$ . Les types *II* possèdent deux champs magnétiques critiques,  $H_{c1}$  et  $H_{c2}$ , tels que  $H_{c1} < H_{c2}$ . Pour  $H < H_{c1}$ , un type *II* expulse le champ magnétique totalement, comme un type *I*, mais pour  $H_{c1} < H < H_{c2}$ , le supraconducteur est dans un état dit mixte. Dans cet état, des vortex de champs magnétiques peuvent traverser l'échantillon à certains endroits. Les vortex de champs magnétiques sont la conséquence de vortex de phase normale: la phase

supraconductrice se retrouve trouée par des zones de phase normale au travers desquelles le champ magnétique traverse le matériau.

Jusqu'alors la supraconductivité est perçue comme un phénomène de nature électronique et peu d'intérêt est porté au réseau atomique et à ses excitations. Or, en 1950, deux expériences indépendamment menées par Maxwell [105] et Reynold *et al.* [106] sur la détermination de la température critique de divers isotopes du mercure changent cette perception. On trouve en effet une relation empirique entre la température critique d'un isotope et sa masse  $M$ :  $T_c M^\alpha = \text{constante}$ . Le paramètre  $\alpha$  est un nombre réel et vaut environ  $1/2$  pour les isotopes étudiés à l'époque. Ce facteur d'échelle rappelle la relation entre la fréquence de résonance des vibrations atomiques  $\omega_c$  et de la masse,  $\omega_c \sim 1/M^{1/2}$ . Les quasi-particules associées aux vibrations du réseau sont évidemment les phonons. Le concept d'interaction électrons-phonons est alors récent et dans cette décennie la recherche se porte sur comment deux électrons peuvent se coupler par cette interaction. En termes vulgarisés, un électron qui se déplace dans un cristal déforme et polarise le réseau ionique, ce qui peut résulter en un potentiel globalement attractif pour un second électron. Cooper montre aussi en 1956 [107] que deux électrons indépendants, au-dessus d'un niveau de Fermi rempli, peuvent se coupler si le potentiel global d'interaction entre ceux-ci est attractif, aussi petit qu'il soit. On appelle ce phénomène "instabilité de Cooper" et les paires d'électrons correspondantes "paires de Cooper". Ces paires de fermions corrélés sont de nature bosonique et se condensent en dessous d'une certaine température critique. Dans ce condensat, briser une paire de Cooper modifie l'énergie totale de ce dernier et il se forme une bande interdite en énergie. Formellement, cette bande interdite ou gap supraconducteur représente l'énergie entre le condensat bosonique et l'état fermionique le moins énergétique, que l'on obtient en brisant une paire.

Le gap supraconducteur est le paramètre d'ordre de la phase supraconductrice. Il peut sembler contre-intuitif qu'un supraconducteur, de résistivité nulle, puisse posséder une bande interdite en énergie, caractéristique plutôt d'un isolant. Il faut plutôt concevoir le gap supraconducteur comme une barrière énergétique associée aux paires de Cooper qui les empêche d'être affectées ou brisées par les interactions avec le réseau. Si la température est assez basse, le condensat n'est effectivement plus affecté par les interactions électron-phonon et peut se mouvoir sans résistance. Plus la température augmente, plus il est difficile de corréliser deux électrons et de les garder couplés, puis à une certaine température critique le gap et la phase supraconductrice disparaissent. Le gap supraconducteur et la température critique pour un modèle de supraconductivité donné sont deux quantités que l'on cherche à prédire puisqu'elles caractérisent la phase supraconductrice et sont mesurables en laboratoire.

Presque 50 ans après la découverte de la supraconductivité et grâce aux observations expérimentales et théories phénoménologiques, la première théorie sur l'origine microscopique de la supraconductivité est posée. C'est la théorie BCS, pour les trois auteurs y ayant

contribué: Bardeen, Cooper Schrieffer. Proposée en 1957 [4], elle leur obtient un prix Nobel en 1972. Dans la prochaine section nous discutons des grandes lignes de cette théorie et surtout de ses limites, pour ensuite introduire la théorie d'Eliashberg, plus complète et adéquate dans le cadre de nos travaux.

## 3.2. Théorie BCS

La théorie BCS [4] voit le jour en 1957 et est la première théorie microscopique sur la supraconductivité. Cette théorie se démarque par sa relative simplicité, tout en faisant appel au formalisme de la mécanique quantique. La théorie, bien que comportant plusieurs approximations et simplifications, prédit les observations expérimentales de l'époque. Elle propose de plus une expression simple pour la température critique  $T_c$  d'un matériau supraconducteur dans un régime limitant de faible couplage électron-phonon.

### 3.2.1. Hamiltonien BCS

Nous écrivons d'abord l'Hamiltonien électronique simplifié BCS  $H_{BCS}$  dans l'espace des impulsions en termes des opérateurs création et annihilation fermioniques  $c_{\mathbf{k}}^\dagger$  et  $c_{\mathbf{k}}$ ,

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\sigma,\sigma'} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma'} c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (3.2.1)$$

où  $\mathbf{k}$ ,  $\mathbf{q}$  sont des vecteurs d'onde et  $\sigma = \pm 1/2$  est le spin électronique.

Le premier terme de  $H_{BCS}$  est la somme de l'énergie cinétique  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  des électrons. Le second terme est un terme d'interaction électronique simplifié, associé à un potentiel global  $V_{\mathbf{q}}$ . C'est d'ailleurs une première simplification de la théorie: le potentiel effectif  $V_{\mathbf{q}}$  englobe *toutes* les interactions électroniques possibles, incluant l'interaction électron-phonon.

### 3.2.2. Résolution et approximations

L'Hamiltonien (3.2.1), par son deuxième terme quartique en opérateurs fermioniques, n'est pas soluble analytiquement. On utilise un développement en champ moyen afin de simplifier l'Hamiltonien en négligeant les perturbations d'ordre supérieur. Nous réécrivons les opérateurs du terme d'interaction eq. (3.2.1) deux-à-deux en termes d'une valeur d'attente et d'une fluctuation  $\delta$ . Explicitement, on écrit  $c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}} = \langle c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}} \rangle + \delta(c_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}})$  et similairement pour le terme  $c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^\dagger$ . L'approximation est de supposer que la fluctuation  $\delta$  est petite face aux valeurs d'attente et de négliger les termes d'ordre quadratique ou supérieur en fluctuations. On se limite aussi seulement aux termes avec des vecteurs d'onde et des spins opposés. Un tel couplage, produisant un état singulet d'impulsion totale nulle, minimise l'énergie de formation de la paire, comme l'a considéré Cooper [107]. On réécrit l'Hamiltonien BCS alors comme:

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left( \Delta_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger - \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle \quad (3.2.2)$$

On définit le gap supraconducteur  $\Delta_{\mathbf{k}}$  et son complexe conjugué comme:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = 2 \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle, \quad \Delta_{\mathbf{k}}^* = 2 \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \quad (3.2.3)$$

qui apparaissent maintenant dans  $H_{\text{BCS}}$  et où le facteur 2 tient compte de la somme sur les spins. Dans un système régulier, on s'attend à ce que les termes  $\langle c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle$  et  $\langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle$  soient nuls par la nature fermionique des opérateurs: ce n'est pas le cas pour un système condensé comme un supraconducteur. Ce gap joue aussi bien le rôle d'une bande d'énergie interdite: si on diagonalise  $H_{\text{BCS}}$  après approximations, on trouve les énergies propres  $E_{\mathbf{k},\pm} = \pm \sqrt{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2 + \epsilon_{\mathbf{k}}^2}$ . Pour un système supraconducteur, la quantité  $\Delta_{\mathbf{k}}$  a bien pour effet de former une région interdite en énergie. On suppose de plus que le gap supraconducteur est une quantité réelle,  $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}}^*$ .

Après avoir exprimé les opérateurs fermioniques  $c_{\mathbf{k}}$  en terme de vecteurs propres de  $H_{\text{BCS}}$ , on peut réécrire l'expression de  $\Delta_{\mathbf{k}}$  comme

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2|E_{\mathbf{k}'}|} \tanh\left(\frac{|E_{\mathbf{k}'}|}{2T}\right), \quad (3.2.4)$$

où  $T$  est la température. Cette dernière équation est auto-cohérente en gap et n'est a priori pas analytiquement simple à résoudre. L'équipe BCS a d'abord proposé une forme phénoménologique et simplifiée du potentiel d'interaction  $V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}$ :

$$V_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} = \begin{cases} -\frac{V_0}{N} & \text{si } |\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'}| < \omega_c, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (3.2.5)$$

où  $\omega_c$  est une fréquence coupure ou caractéristique du spectre des phonons d'un matériau, généralement la fréquence de Debye associée,  $V_0 > 0$  et  $N$  le nombre d'électrons. Cette forme indique que l'interaction électronique effective est globalement attractive seulement si l'énergie phonon caractéristique  $\omega_c$  est supérieure à la différence d'énergies cinétiques des deux électrons  $|\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}'}|$ . Autrement, il n'y a pas d'interaction.

Dans un même ordre d'idées, on propose une forme pour le gap:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \Delta_0 & \text{si } |\epsilon_{\mathbf{k}}| < \omega_c, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (3.2.6)$$

soit un gap constant en impulsion de grandeur  $\Delta_0$  jusqu'à la fréquence coupure/caractéristique  $\omega_c$ , et nul sinon.

En remplaçant ces définitions dans l'eq. 3.2.4, on définit un paramètre de couplage  $\lambda = V_0 D(E_F)$ , avec  $D(E_F)$  la densité d'état à l'énergie de Fermi, apparaissant en prenant la

limite du continu et supposant que le couplage se produit principalement à cette énergie. En considérant une limite de faible couplage,  $\lambda \ll 1$ , on obtient une expression de la température critique en fonction des paramètres  $\omega_c$  et  $\lambda$ :

$$T_c \approx 1.14 \omega_c e^{(-\frac{1}{\lambda})} \quad (3.2.7)$$

Cette expression est l'équation maîtresse de la théorie BCS, permettant de prédire et confirmer les  $T_c$  de supraconducteurs dits conventionnels, généralement des métaux simples où le couplage électronique et électron-phonon est faible. Malgré le succès observé à l'époque de l'explication phénoménologique de la supraconductivité, le modèle BCS comporte plusieurs limitations. Les phonons ne sont pas considérés explicitement dans la théorie et on se contente d'une forme de potentiel arbitraire qui ne décrit pas bien l'interaction électron-phonon et électron-électron. La fréquence de coupure/caractéristique  $\omega_c$  est elle aussi choisie de façon arbitraire, bien qu'intuitive. Le paramètre de couplage  $\lambda$  n'est pas mesurable en laboratoire: la densité d'état l'est, mais dans cette théorie  $V_0$  est une quantité qui ne s'exprime pas en termes de paramètres propres au matériau. De plus, les interactions sont considérées instantanées et les effets de retard négligés: il n'y a aucune dépendance temporelle dans le modèle.

À la prochaine section, nous introduisons une théorie plus complète de la supraconductivité, la théorie d'Eliashberg [100]. C'est cette dernière que nous utilisons dans le cadre de nos travaux et comme pour la théorie BCS, le but est d'arriver à obtenir une équation impliquant le gap supraconducteur et la température critique, nommée équation d'Eliashberg.

### 3.3. Équation d'Eliashberg

Suite aux commentaires quant aux approximations et limitations du modèle BCS [4], nous introduisons dans cette section la théorie d'Eliashberg [100], menant elle aussi à une expression auto-cohérente impliquant le gap supraconducteur. Par contre, dans cette théorie, les potentiels en jeu sont explicites et nous introduisons le formalisme des fonctions de Green, dépendantes en temps. Nous introduisons d'abord l'Hamiltonien considéré dans la théorie, puis les fonctions de Green pertinentes. Similairement à la dérivation de l'écrantage RPA 2.1.3, nous obtenons l'équation du mouvement de la fonction de Green en la dérivant par rapport au temps. Après l'obtention de l'équation d'Eliashberg, nous expliquons notre procédure pour la résoudre.

#### 3.3.1. Hamiltonien d'Eliashberg et fonctions de Green

Nous commençons ici par introduire de façon intuitive l'Hamiltonien considéré dans la théorie d'Eliashberg. Les différents termes et leur forme dans l'Hamiltonien sont connus et nous nous contentons ici de poser l'Hamiltonien d'Eliashberg,  $H_{\text{Eli}}$ :

$$\begin{aligned}
H_{\text{Eli}} = & \underbrace{\sum_{\mathbf{p},\sigma} \epsilon_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p},\sigma}}_{e^- \text{ libres}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{p},\sigma} \sum_{\mathbf{p}',\sigma'} V_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p}'-\mathbf{q},\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{p}',\sigma'} c_{\mathbf{p},\sigma}}_{\text{Interaction } e^-/e^-} \\
& + \underbrace{\sum_{\mathbf{p},\mathbf{q},\sigma} g_{0\mathbf{q}} c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} + b_{-\mathbf{q}})}_{\text{Interaction } e^-/\text{ phonons}} + \underbrace{\sum_{\mathbf{q}} \omega_{0\mathbf{q}} \left( b_{\mathbf{q}}^{\dagger} b_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \right)}_{\text{Phonons libres}}
\end{aligned} \tag{3.3.1}$$

où  $c_{\mathbf{p},\sigma}$  et  $c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger}$  sont les opérateurs annihilation et création fermionique,  $b_{\mathbf{p}}$  et  $b_{\mathbf{p}}^{\dagger}$  leur analogue bosonique,  $\epsilon_{\mathbf{p}}$  l'énergie cinétique des électrons et  $V_{\mathbf{q}}$  le potentiel Coulombien, potentiellement écranté, dans l'espace des impulsions. Pour les termes incluant les phonons, on introduit  $g_{0\mathbf{q}}$ , l'amplitude de couplage électron-phonon. Les indices  $\sigma$  réfèrent au spin électronique et nous supposons qu'il n'y a qu'une branche de phonons, d'où l'absence d'un deuxième indice sur les opérateurs phonon. Les potentiels et énergies en jeu ne sont pas encore explicités pour faciliter les dérivations et varient selon le travail et le modèle considérés. La dépendance temporelle de tous les opérateurs est ici implicite pour faciliter la lecture, mais bien présente.

Avec l'Hamiltonien de la théorie, nous introduisons maintenant le formalisme des fonctions de Green électroniques:

$$\begin{aligned}
G_{\sigma}(\mathbf{p}, t) &= \langle \hat{T} c_{\mathbf{p},\sigma}(t) c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger}(0) \rangle, \\
F(\mathbf{p}, t) &= \langle \hat{T} c_{-\mathbf{p},\downarrow}(t) c_{\mathbf{p},\uparrow}(0) \rangle,
\end{aligned} \tag{3.3.2}$$

où  $\hat{T}$  est l'opérateur d'ordonnement temporel,  $G_{\sigma}(\mathbf{p}, t)$  la fonction de Green normale et  $F(\mathbf{p}, t)$  la fonction de Green anormale. Pour cette dernière, nous supposons que les paires de Cooper sont principalement formées d'électrons de spins et d'impulsions opposés. Les flèches en indice  $\uparrow$  et  $\downarrow$  font référence à la direction du spin up/down.

Afin d'obtenir une expression pour le gap supraconducteur de cette théorie, on doit obtenir l'équation du mouvement, *i.e.* la dérivée temporelle des fonctions de Green, en commutant les opérateurs sans les valeurs d'attente de l'eq. (3.3.2) avec  $H_{\text{Eli}}$ . On traite ici de façon perturbative la théorie, car on coupe la hiérarchie des fonctions de Green à la fonction à deux corps, qui dépend elle-même des fonctions de Green d'ordre supérieur: ces dépendances sont négligées et il est logique de s'arrêter à la fonction à deux corps, puisque les paires de Cooper sont effectivement composées de deux électrons.

### 3.3.2. Équations du mouvement des fonctions de Green

Afin de faciliter l'algèbre et la présentation des résultats, nous travaillons ici en temps imaginaire, dénoté  $\tau$ . La dérivée temporelle d'un opérateur  $O(\tau)$  en temps imaginaire s'écrit comme

$$\frac{d\langle O(\tau) \rangle}{d\tau} = \langle [H, O(\tau)] \rangle + \left\langle \frac{\partial O(\tau)}{\partial \tau} \right\rangle \quad (3.3.3)$$

avec  $H$  l'Hamiltonien de la théorie. Dans notre cas l'opérateur  $O(\tau)$  est une des fonctions de Green sans les valeurs d'attente de la forme  $\hat{T}A(\tau)B(\tau')$ , avec  $A$  et  $B$  des opérateur fermioniques, en particulier:

$$\frac{d}{d\tau} \langle \hat{T}A(\tau)B(\tau') \rangle = \delta(\tau - \tau') \langle [A(\tau), B(\tau')]_{\xi} \rangle + \langle \hat{T}[H, A(\tau)]B(\tau') \rangle + \langle \hat{T}A(\tau)[H, B(\tau')] \rangle \quad (3.3.4)$$

avec  $\delta(\tau)$  la fonction delta de Dirac et l'indice  $\xi = \pm 1$  dénotant respectivement le commutateur et l'anti-commutateur.

Comme souligné au début de la section, nous voulons dériver temporellement les opérateurs dans les valeurs d'attente des fonctions de Green à l'eq. (3.3.2) par la commutation avec l'Hamiltonien d'Eliashberg  $H_{\text{Eli}}$ , eq. (3.3.1). L'algèbre est assez lourde, mais similaire pour les deux fonctions de Green. Ainsi nous nous contentons ici de dériver l'expression pour  $G_{\sigma}$  seulement.

On évalue:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} G_{\sigma}(\mathbf{p}, \tau) &= \frac{d}{d\tau} \langle \hat{T} c_{\mathbf{p},\sigma}(\tau) c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger}(0) \rangle = \delta(\tau) \langle [c_{\mathbf{p},\sigma}(\tau), c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger}(0)] \rangle + \langle \hat{T} [H_{\text{Eli}}, c_{\mathbf{p},\sigma}] (\tau) c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger}(0) \rangle \\ &= \delta(\tau) + \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \langle \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{T} [c_{\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma'}, c_{\mathbf{p},\sigma}] c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger}(0) \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma', \sigma'} \langle \hat{T} V(\mathbf{q}, \tau) [c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q},\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}',\sigma'} c_{\mathbf{k},\sigma'}, c_{\mathbf{p},\sigma}] c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger}(0) \rangle \\ &+ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma'} \langle \hat{T} g_{0\mathbf{q}} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger} + b_{-\mathbf{q}}) [c_{\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}, c_{\mathbf{p},\sigma}] c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger}(0) \rangle \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

où les commutateurs sont tous évalués au temps  $(\tau)$ .

Les deuxième et quatrième termes s'évaluent à l'aide des relations suivantes:

$$\begin{aligned} [c_{\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}, c_{\mathbf{p},\sigma}] &= c_{\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} \{c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}, c_{\mathbf{p},\sigma}\} - \{c_{\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger}, c_{\mathbf{p},\sigma}\} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'} = -\delta_{\mathbf{k},\mathbf{p}} \delta_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q},\sigma} \\ [c_{\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}, c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger}] &= c_{\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger} \{c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'}, c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger}\} - \{c_{\mathbf{k},\sigma'}^{\dagger}, c_{\mathbf{p},\sigma}^{\dagger}\} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma'} = \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{p}} \delta_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\sigma}^{\dagger} \end{aligned} \quad (3.3.6)$$

où les accolades dénotent l'anti-commutateur.

Avec des développements similaires pour le commutateur du troisième terme, on obtient avec un peu d'algèbre et de ré-arrangement une expression plus concise pour la dérivée temporelle de  $G_{\sigma}$ :

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{d\tau} + \epsilon_{\mathbf{p}}\right) G_{\sigma}(\mathbf{p}, \tau) &= \delta(\tau) - \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V(\mathbf{q}, \tau) \sum_{\mathbf{k}, \sigma'} \langle \hat{T} c_{\mathbf{k}, \sigma'}^{\dagger}(\tau) c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma'}(\tau) c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}(\tau) c_{\mathbf{p}, \sigma}^{\dagger}(0) \rangle \\ &\quad - \sum_{\mathbf{q}} g_{0\mathbf{q}} \langle \hat{T} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau) + b_{-\mathbf{q}}(\tau)) c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \sigma}(\tau) c_{\mathbf{p}, \sigma}^{\dagger}(0) \rangle. \end{aligned} \quad (3.3.7)$$

Une démarche similaire pour l'équation du mouvement de la fonction de Green anormale donne:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{d\tau} + \epsilon_{-\mathbf{p}}\right) F(\mathbf{p}, \tau) &= - \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V(\mathbf{q}, \tau) \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{T} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger}(\tau) c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \uparrow}(\tau) c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{p}, \uparrow}(0) \rangle \\ &\quad - \sum_{\mathbf{q}} g_{0\mathbf{q}} \langle \hat{T} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau) + b_{-\mathbf{q}}(\tau)) c_{-\mathbf{p}+\mathbf{q}, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{p}, \uparrow}(0) \rangle \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

On remarque qu'un terme faisant intervenir les opérateurs phonons de la forme  $(b_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau) + b_{-\mathbf{q}}(\tau))$  est présent, multiplié par une combinaison d'opérateurs fermioniques. On souhaite réécrire ce terme, de façon similaire que précédemment: en définissant une fonction de Green électron-phonon et en calculant sa dérivée temporelle. L'algèbre est similaire, mais l'intérêt n'est pas d'introduire un formalisme plus lourd lié aux phonons, puisqu'on s'intéresse surtout au potentiel Coulombien écranté. Nous posons donc la fonction de Green électron-phonon:

$$G_{e-ph}(\mathbf{q}, \tau_1, \tau_2) = \langle \hat{T} (b_{\mathbf{q}}^{\dagger}(\tau_1) + b_{-\mathbf{q}}(\tau_1)) \hat{O}(\tau_2) \rangle = -g_{0\mathbf{q}} \int d\tau_1' D(\mathbf{q}, \tau_1 - \tau_1') \left\langle \hat{T} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger}(\tau_1') c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma}(\tau_1') \hat{O}(\tau_2) \right\rangle \quad (3.3.9)$$

où l'opérateur  $\hat{O}(\tau_2)$  est de nature fermionique et  $D(\mathbf{q}, \tau)$  est le propagateur des phonons. L'intérêt ici est de maintenant avoir seulement des opérateurs fermioniques dans notre fonction de Green.

Similairement à la théorie BCS, les équations du mouvement des fonctions de Green possèdent un terme électronique quartique en opérateurs fermioniques. On utilise encore ici une théorie par champ moyen afin de réduire de réduire à quadratique l'ordre avec toutes les combinaisons deux-à-deux d'opérateurs. On obtient alors, après simplifications et en identifiant les termes en termes des fonctions de Green normales et anormales, des équations du mouvement auto-cohérentes en fonctions de Green.

En rassemblant ces points, nous réécrivons les eq. (3.3.7) et eq. (3.3.8) comme:

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{d}{d\tau} + \epsilon_{\mathbf{p}} \right) G_{\sigma}(\mathbf{p}, \tau) = \\
& \delta(\tau) + \sum_{\mathbf{q} \neq 0} g_{0\mathbf{q}}^2 \int dt' D(\mathbf{q}, \tau - \tau') (G_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \tau - \tau') G_{\sigma}(\mathbf{p}, \tau') - F(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \tau' - \tau) F^{*}(\mathbf{p}, -\tau')) \\
& - \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V(\mathbf{q}, \tau) (G_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \tau - \tau') G_{\sigma}(\mathbf{p}, \tau') - F(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \tau' - \tau) F^{*}(\mathbf{p}, -\tau'))
\end{aligned} \tag{3.3.10}$$

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{d}{d\tau} + \epsilon_{\mathbf{p}} \right) F(\mathbf{p}, \tau) \\
& = \sum_{\mathbf{q} \neq 0} g_{0\mathbf{q}}^2 \int dt' D(\mathbf{q}, \tau - \tau') \left( G_{\uparrow}(\mathbf{p}, -\tau') F(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \tau - \tau') + G_{\downarrow}(-\mathbf{p} + \mathbf{q}, \tau - \tau') F(\mathbf{p}, \tau') \right) - \\
& \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V(\mathbf{q}, \tau) \left( G_{\uparrow}(\mathbf{p}, -\tau') F(\mathbf{p} - \mathbf{q}, \tau - \tau') + G_{\downarrow}(-\mathbf{p} + \mathbf{q}, \tau - \tau') F(\mathbf{p}, \tau') \right).
\end{aligned} \tag{3.3.11}$$

Bien que plus concises, les expressions précédentes sont dans le domaine temporel temporel. Or une description dans le domaine en fréquences est plus adéquate. Ainsi nous procédons à la prochaine sous-section à la transformée de Fourier du temps en fréquences.

### 3.3.3. Transformée de Fourier & équation d'Eliashberg

La transformée de Fourier des divers termes des eq. (3.3.10) et eq. (3.3.11) est directe et fait intervenir les fréquences de Mastubara fermioniques,  $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ , avec  $n$  un entier et  $T$  la température. On introduit ainsi la transformée de Fourier du domaine temporel à l'espace en fréquences d'une fonction de Green comme:

$$G(\mathbf{p}, \tau) = T \sum_{\omega_n} G(\mathbf{p}, i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \tag{3.3.12}$$

Le terme à gauche de l'égalité dans eq. (3.3.10) se transforme comme:

$$\left( \frac{d}{d\tau} + \epsilon_{\mathbf{p}} \right) G_{\sigma}(\mathbf{p}, \tau) = T \sum_{\omega_n} \left( \frac{d}{d\tau} + \epsilon_{\mathbf{p}} \right) e^{-i\omega_n \tau} G_{\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n) = T \sum_{\omega_n} (-i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{p}}) e^{-i\omega_n \tau} G_{\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n). \tag{3.3.13}$$

La transformée des autres termes des équations (3.3.10) et (3.3.11) est similaire, avec quelques remaniements grâce aux propriétés des transformées de Fourier. Nous utilisons les propriétés de symétries de la fonction de Green anormale, notamment on peut montrer que celle-ci et son complexe conjugué sont indépendants du signe de leurs arguments lorsqu'on considère, comme supposé ici, une fonction de gap paire en fréquence et en impulsion [8, 58].

On obtient des expressions en fréquences pour les équations du mouvement des fonctions de Green normales et anormales:

$$\begin{aligned} (-i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{p}}) G_{\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n) &= 1 - \Sigma_{\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n) G_{\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n) - \Delta(\mathbf{p}, i\omega_n) F^*(\mathbf{p}, i\omega_n) \\ (-i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{p}}) F(\mathbf{p}, i\omega_n) &= -\Sigma_{\downarrow}(\mathbf{p}, i\omega_n) F(\mathbf{p}, i\omega_n) + \Delta(\mathbf{p}, i\omega_n) G_{\uparrow}(-\mathbf{p}, -i\omega_n) \end{aligned} \quad (3.3.14)$$

où nous définissons les quantités suivantes:

$$\Sigma_{\sigma}(\mathbf{p}, i\omega_n) = T \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \omega_m} \left( g_{0\mathbf{q}}^2 D(\mathbf{q}, i\omega_n - i\omega_m) - V(\mathbf{q}, i\omega_n - i\omega_m) \right) G_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\omega_m) \quad (3.3.15)$$

$$\Delta(\mathbf{p}, i\omega_n) = T \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \omega_m} \left( g_{0\mathbf{q}}^2 D(\mathbf{q}, i\omega_n - i\omega_m) - V(\mathbf{q}, i\omega_n - i\omega_m) \right) F(\mathbf{p} + \mathbf{q}, i\omega_m) \quad (3.3.16)$$

qu'on identifie respectivement comme la self-énergie et la fonction du gap supraconducteur.

Ces équations sont auto-cohérentes, mais avec un peu d'algèbre et en supposant que le gap est réel,  $\Delta = \Delta^*$ , ce qui implique aussi que  $F = F^*$ , on peut exprimer la fonction de Green normale comme:

$$G(\mathbf{p}, i\omega_n) = \frac{i\omega_n + \epsilon_{\mathbf{p}} + \chi(\mathbf{p}, i\omega_n)}{(\omega_n Z(\mathbf{p}, i\omega_n))^2 + (\epsilon_{\mathbf{p}} + \chi(\mathbf{p}, i\omega_n))^2 + \Delta^2(\mathbf{p}, i\omega_n)}. \quad (3.3.17)$$

La self-énergie  $\Sigma(\mathbf{p}, i\omega_n)$  a été réécrite en séparant sa partie réelle et imaginaire comme  $\Sigma(\mathbf{p}, i\omega_n) = \chi(\mathbf{p}, i\omega_n) + i\omega_n(1 - Z(\mathbf{p}, i\omega_n))$ . On associe la partie réelle avec  $\epsilon_{\mathbf{p}}$  et la partie imaginaire avec  $i\omega_n$ , au dénominateur.

Nous pouvons similairement obtenir une expression pour le gap supraconducteur  $\Delta(\mathbf{p}, i\omega_n)$ :

$$\Delta(\mathbf{p}, i\omega_n) = T \sum_{\mathbf{p}', \omega_m} I(\mathbf{p}' - \mathbf{p}, i\omega_n - i\omega_m) \frac{\Delta(\mathbf{p}', i\omega_m)}{(\omega_m Z(\mathbf{p}', i\omega_m))^2 + (\epsilon_{\mathbf{p}'} + \chi(\mathbf{p}', i\omega_m))^2 + \Delta^2(\mathbf{p}', i\omega_m)}, \quad (3.3.18)$$

avec le noyau d'interaction  $I(\mathbf{p}, i\omega_n)$ :

$$I(\mathbf{p}' - \mathbf{p}, i\omega_n - i\omega_m) = g_{0\mathbf{p}' - \mathbf{p}}^2 D(\mathbf{p}' - \mathbf{p}, i\omega_n - i\omega_m) - V(\mathbf{p}' - \mathbf{p}, i\omega_n - i\omega_m), \quad (3.3.19)$$

qui contient l'information sur les potentiels et interactions.

L'éq. (3.3.18) est appelée équation d'Eliashberg. C'est aussi cette équation que nous calculons dans notre travail sur la supraconductivité. Elle contient plusieurs quantités propres à un modèle donné, comme la forme écrantée du potentiel Coulombien  $V(\mathbf{p}, i\omega_n) = V_0(\mathbf{p})/\varepsilon(\mathbf{p}, i\omega_n)$  avec  $V_0(\mathbf{p})$  le potentiel Coulombien nu et  $\varepsilon(\mathbf{p}, i\omega_n)$  la fonction diélectrique du modèle. Les corrections dues à la self-énergie sont incluses et l'expression de cette quantité dépend aussi du modèle.

Il faut évidemment résoudre cette équation auto-cohérente, mais surtout gagner en intuition sur la manière de la résoudre ainsi que sur les conclusions à en tirer. C'est ce que nous discutons à la prochaine sous-section par une brève revue d'articles qui ont orienté notre raisonnement sur la manière de traiter une telle équation.

### 3.3.4. Brève revue de littérature et méthodes de résolution

L'équation d'Eliashberg eq. (3.3.18) est une équation auto-cohérente en gap supraconducteur  $\Delta(\mathbf{p}, i\omega_n)$ . Avant même de s'intéresser à l'expression des diverses quantités présentes dans l'équation d'Eliashberg, assez complexes dans notre travail, il nous faut décider comment procéder à sa résolution. Nous présentons ici une brève revue de littérature non-exhaustive qui nous a permis de gagner en intuition quant à la méthode de résolution de l'équation d'Eliashberg et à l'interprétation des résultats.

Le premier article attirant notre attention est celui de Anderson et Morel publié en 1962 [108]. Ces derniers résolvent numériquement et exactement l'équation d'Eliashberg à *température nulle* de façon itérative en proposant une forme initiale du gap choisie par arguments physiques. Ces auteurs se concentrent sur le couplage électron-phonon dans un régime de faible couplage et réduisent l'interaction coulombienne entre électrons à une constante. Ils obtiennent un résultat pour le gap similaire à celui obtenu par l'équipe BCS à  $T = 0$ , aux différences notables que le paramètre de couplage électron-phonon est maintenant exprimé en termes de propriétés physiques du matériau, et qu'une fréquence caractéristique apparaît naturellement par les effets de retard de la propagation des phonons.

Malgré ces avancées, la résolution n'est faite qu'à température nulle, ne permettant pas de prédire de température critique, et dans un régime limitant de faible couplage. Le prochain travail qui nous intéresse, publié par McMillan en 1967 [109], explore justement la résolution de l'équation d'Eliashberg dans un régime de température non-nulle et propose une extrapolation de ses résultats au-delà d'un régime de faible couplage. Ici aussi c'est le couplage électron-phonon qui est proposé comme le mécanisme dominant de la supraconductivité et la contribution Coulombienne est encore réduite à une constante. Travaillant en fréquences réelles et explorant deux régimes, en-dessous et au-dessus d'une fréquence caractéristique, les expressions obtenues sont assez complexes mais permettent une application directe à des matériaux dont le spectre d'excitation expérimental des phonons est connu. Une prédiction importante proposée par cet auteur est qu'il existe une borne supérieure à la  $T_c$  atteinte dans un régime de moyen/fort couplage.

Bien que les résultats de McMillan semblent en accord avec les expériences de l'époque, en 1975 les auteurs Allen et Dynes [110] critiquent le travail de McMillan sur divers points, dont en particulier la méthode de résolution de l'équation et de la prédiction de l'existence d'une  $T_c$  maximale pour une classe de matériau donnée en régime de fort couplage. Toujours en se

concentrant sur le couplage électron-phonon, les auteurs utilisent une méthode variationnelle, qui avait déjà été explorée par Bergmann et Rainer en 1973 [111] pour étudier la variation de la  $T_c$  en fonction des paramètres du spectre des phonons. Les auteurs utilisent une équation d'Eliashberg linéarisée et symétrisée, qu'ils résolvent pour une forme initiale du gap de façon matricielle, plutôt que par calculs itératifs. Grâce à cette méthode, ils infirment la prédiction de McMillan sur l'existence d'une borne supérieure à la  $T_c$  et explorent de façon plus complète le régime de fort couplage. C'est cette méthodologie que nous utilisons dans notre travail sur la supraconductivité et nous la détaillons à la prochaine sous-section.

Notons que comme souligné dans le premier chapitre 1.2.2, notre travail sur la supraconductivité s'intéresse à l'interaction Coulombienne écrantée comme mécanisme principal de la supraconductivité. Les travaux de l'époque s'intéressent surtout au couplage conventionnel électron-phonon. La situation où l'interaction Coulombienne écrantée est proposée comme mécanisme principal de la supraconductivité dans des systèmes électroniques plus généraux a aussi été exploré par Takada en 1992 [112]. Ses résultats nous incitent à étudier cette situation dans les semi-métaux de Luttinger.

### 3.3.5. Équation d'Eliashberg symétrique linéarisée & résolution comme système à valeurs propres

Nous décrivons sommairement ici la méthodologie concernant la résolution de l'équation d'Eliashberg avec le formalisme introduit par Allen et Dynes [110]. Commençons par l'équation d'Eliashberg, eq. (3.3.18), dans le cas où la température est proche de la température critique,  $T \approx T_c$ . La transition de phase supraconductrice étant du deuxième ordre, pour  $T \approx T_c$ , le gap  $\Delta$  est alors très petit devant les autres énergies en jeu et on considère la forme linéarisée de l'équation en se réduisant à l'ordre le plus bas en  $\Delta(\mathbf{p}, i\omega_n)$ :

$$\Delta(\mathbf{p}, i\omega_n) \approx T \sum_{\mathbf{p}', \omega_m} I(\mathbf{p}' - \mathbf{p}, i(\omega_n - \omega_m)) \frac{\Delta(\mathbf{p}', i\omega_m)}{(\omega_m Z(\mathbf{p}', i\omega_m))^2 + (\epsilon_{\mathbf{p}'} + \chi(\mathbf{p}', i\omega_m))^2}. \quad (3.3.20)$$

Réécrivons cette dernière équation sous la forme générale suivante:

$$\lambda(T)\Delta(\mathbf{p}, i\omega_n) = \sum_{\mathbf{p}', \omega_m} \mathcal{M}(\mathbf{p}, i\omega_n; \mathbf{p}', i\omega_m) \Delta(\mathbf{p}', i\omega_m) \quad (3.3.21)$$

où on associe tous les termes autres que le gap à un noyau matriciel  $\mathcal{M}(\mathbf{p}, i\omega_n; \mathbf{p}', i\omega_m)$  et qui, à  $T = T_c$ , doit satisfaire à la condition  $\lambda = 1$ . Ceci n'est pas sans rappeler une équation matricielle aux valeurs propres, avec  $\Delta(\mathbf{p}, i\omega_n)$  jouant le rôle d'un vecteur propre de la matrice  $\mathcal{M}(\mathbf{p}, i\omega_n; \mathbf{p}', i\omega_m)$  et de valeurs propres correspondantes  $\lambda(T)$ . On propose une forme initiale du gap décomposée sur une grille discrète en fréquences  $\omega_n$  et en vecteurs

d'onde  $\mathbf{p}$ . En résolvant le système matriciel correspondant, la température où la première valeur propre  $\lambda_{\max}$  atteint 1 correspond à la température critique [110, 112].

On peut de plus obtenir une forme symétrique sous permutation des fréquences et impulsions  $\{\mathbf{p}, i\omega_n\} \iff \{\mathbf{p}', i\omega_m\}$  de l'équation d'Eliashberg par le changement de variable suivant:

$$\bar{\Delta}(\mathbf{p}, i\omega_n) = \frac{p}{(\omega_n Z(\mathbf{p}, i\omega_n))^2 + (\epsilon_{\mathbf{p}} + \chi(\mathbf{p}, i\omega_n))^2} \Delta(\mathbf{p}, i\omega_n). \quad (3.3.22)$$

La nouvelle valeur propre avec cette formulation,  $\rho(T)$ , est telle que  $\rho(T) \sim -1/T$  dans le régime  $T \rightarrow 0$  et  $\rho(T) \sim -T$  quand  $T \rightarrow \infty$ . La région en température où la plus grande valeur propre est positive correspond à la phase supraconductrice. Elle est bornée supérieurement par la température critique qui correspond à la température où la plus grande valeur propre s'annule. Alors, la plus grande valeur propre s'annule à la plus grande température critique du modèle,  $\rho_{\max}(T = T_c) = 0$  [110, 111]. On s'assure de plus que cette plus grande température critique converge bien vers la température critique analytique du modèle. En effet, un avantage de cette forme est que l'on se munit du principe variationnel suivant:

$$\rho_{\max} \geq \frac{\Delta_t \cdot \mathcal{K} \cdot \Delta_t}{\Delta_t \cdot \Delta_t} = \rho_t \quad (3.3.23)$$

où  $\mathcal{K}$  est un noyau symétrique et l'indice  $t$  indique que  $\Delta_t$  est une fonction gap arbitraire. Cette inégalité montre que toute valeur propre associée à un tel gap est bornée supérieurement par la plus grande valeur propre associée au gap analytique du modèle. Ceci implique qu'une température critique associée à un gap test est aussi bornée supérieurement, par la température critique analytique du modèle. Cette formulation est utile lors du calcul de la dérivée variationnelle de la  $T_c$  dans notre travail sur la supraconductivité et de plus permet de s'assurer de la convergence de la  $T_c$  en fonction du raffinement de la forme initiale du gap. La forme symétrique de l'équation d'Eliashberg permet en outre de réduire le nombre de calculs numériques associés aux éléments matriciels: en effet, trouver numériquement une valeur propre est assez efficace et la majeure partie du calcul numérique dans notre travail consiste à calculer les éléments de matrice.

En résumé, on réduit la résolution itérative de l'équation d'Eliashberg à la résolution d'une équation matricielle symétrique aux valeurs propres, dont le vecteur propre est le gap supraconducteur,  $\Delta(k, i\omega_n)$ , et dont la forme est une décomposition plus ou moins fine sur des grilles en fréquences et impulsions. On cherche une solution telle que la valeur propre maximale associée  $\rho(T)$  s'annule à  $T = T_c$ , ce qui permet d'obtenir une expression pour la  $T_c$  dans ce modèle.

# Chapitre 4

---

## Impuretés dans les semi-métaux de Luttinger: oscillations de Friedel et RKKY

Ce chapitre présente nos résultats quant aux réponses des semi-métaux de Luttinger à des impuretés locales de charge et de spin. Ce projet a donné lieu à un article scientifique, *Impurities in 3D quadratic band-touching Luttinger semimetals : Friedel and RKKY oscillations* [7] qui est présenté à la section 4.3 du présent chapitre.

### 4.1. Introduction

Comme présenté au chapitre 2, notre travail s'intéresse aux inhomogénéités induites par une impureté de charge ou de spin dans les semi-métaux de Luttinger. Nous commençons par calculer ces réponses en séparant les différents termes les composant: nous introduisons des termes  $AA$ ,  $BB$  et  $AB$  qui réfèrent respectivement aux réponses dans la bande d'hélicité  $\pm 1/2$ , dans celle d'hélicité  $\pm 3/2$  et la réponse interbande, comme illustré à la Fig. 1.1. À température nulle nous menons nos calculs analytiquement, autrement les calculs sont réalisés numériquement: la majeure partie de notre travail concerne le régime analytique. Nous analysons et comparons ces réponses à celles connues pour un gaz d'électron libre 3-D et pour un semi-métal de Dirac. Nous remarquons que les réponses magnétiques, une transversale et une longitudinale, sont affectées par le signe de la masse, c'est-à-dire les deux cas illustrés à la Fig. 1.1.

À partir de ces résultats nous obtenons l'Hamiltonien d'interaction RKKY entre deux impuretés magnétiques. Un tel Hamiltonien peut être utilisé pour prédire les phases magnétiques d'un semi-métal de Luttinger en considérant par exemple un modèle sur réseau. À cet effet nous obtenons l'énergie d'interaction entre deux impuretés magnétiques séparées d'une distance inter-atomique pour quelques semi-métaux de Luttinger et discutons du signe et de l'amplitude de l'interaction.

Notre dernier résultat est le calcul de la susceptibilité macroscopique de spin d'un semi-métal de Luttinger, qu'on obtient aussi grâce à nos réponses magnétiques. Nous obtenons une susceptibilité diamagnétique, de signe opposé à la susceptibilité du gaz d'électrons libres 3-D.

## 4.2. Rôle des différents auteurs

Les trois auteurs de la publication sont Louis Godbout, le présent auteur, Sergueï Tchoumakov, un chercheur postdoctoral de l'équipe du Professeur William Witczak-Krempa, et William Witczak-Krempa lui-même. Louis Godbout a été en charge du calcul des susceptibilités magnétique et de charge, et a reçu une aide technique de la part de Sergueï Tchoumakov, en particulier pour le calcul numérique de la susceptibilité à température non-nulle. L'interprétation des résultats et leur lien avec les expériences a été réalisée conjointement par les trois auteurs. Louis Godbout a rédigé l'article, aidé de Sergueï Tchoumakov et William Witczak-Krempa pour la relecture et pour des recommandations bibliographiques.

## 4.3. Impurities in 3D quadratic band-touching Luttinger semimetals: Friedel and RKKY oscillations

L. J. Godbout<sup>1</sup>, S. Tchoumakov<sup>1</sup> & W. Witczak-Krempa<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup> Département de Physique, Université de Montréal, Montréal, Québec, H3C 3J7, Canada

<sup>2</sup> Centre de Recherches Mathématiques, Université de Montréal; P.O. Box 6128, Centre-ville Station; Montréal (Québec), H3C 3J7, Canada

<sup>3</sup> Regroupement Québécois sur les Matériaux de Pointe (RQMP)

### 4.3.1. Abstract

We investigate the response of 3D Luttinger semimetals to localized charge and spin impurities as a function of doping. The strong spin-orbit coupling of these materials strongly influences the Friedel oscillations and RKKY interactions. This can be seen at short distances with an  $1/r^4$  divergence of the responses, and anisotropic behavior. Certain of the spin-orbital signatures are robust to temperature, even if the charge and spin oscillations are smeared out, and give an unusual diamagnetic Pauli susceptibility. We compare our results to the experimental literature on the bismuth-based half-Heuslers such as YPtBi and on the pyrochlore iridate  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ .

### 4.3.2. Introduction

Luttinger semimetals [3] such as HgTe,  $\alpha$ -Sn, YPtBi [22] and  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  [33] play an important role in the field of 3D topological materials. Their conduction and valence bands meet quadratically at a time-reversal invariant and inversion-symmetric point. This degeneracy can be lifted, for example by applying strain, to obtain a Dirac semimetal [37, 38] or a topological insulator [39]. In these materials, the non-trivial topology is responsible for unusual magnetic [40–42], surface [43–45] and transport [40, 46, 47] properties, that can also be met in Luttinger semimetals [113]. In particular, a way to probe the strong spin-orbit properties of these materials is through their response to charge and spin impurities, respectively referred to as Friedel oscillations [52, 53] and RKKY interactions [54–56].

The Friedel oscillations and RKKY interactions are a consequence of the sharp Fermi surface of the conduction electrons. In a 3D normal electron gas they typically scale as  $\cos(2k_F r)/r^3$  where  $r$  is the distance from the impurity and  $k_F$  the Fermi wavevector [57]. But in general, this response depends on dimension [53, 114, 115], band dispersion [61–64, 116–118] and temperature [119, 120]. For example, in Dirac and Weyl semimetals these responses decay faster at large separations,  $r^{-5}$ , [62, 64, 121] when the carrier density

vanishes. The quadratic dispersion of Luttinger semimetals leads to a slower decay, which may prove useful to explore the consequences of the strong spin-orbit interaction. Also, on the contrary to a Luttinger metal with heavy and light carriers [122], the chemical potential can serve to explore the spin-orbit coupling of each band separately.

In this work we study the Friedel oscillations and RKKY coupling of three-dimensional Luttinger semimetals at finite doping. This is inspired by recent experimental results on the bismuth based half-Heuslers [22] and the tentalizing phase diagram of the pyrochlore iridate  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  [33, 36, 123]. We compute the charge and spin response at zero temperature analytically, and numerically at finite temperature. Also, because it was recently shown that Luttinger semimetals have a paramagnetic Landau susceptibility [1], which is opposite to what is expected for a normal electron gas, we compute the Pauli susceptibility and find that it is diamagnetic.

This work is organized as follows. In Sec. 4.3.3 we introduce and discuss the underlying model of a Luttinger semimetal. Sec. 4.3.4 contains our main results, with the expression of the charge and of the spin response to a localized inhomogeneity. We discuss our results at zero temperature and as a function of temperature, and compute the spin susceptibility of a Luttinger semimetal. In Sec. 5.3.5, we compare our results to the existing litterature on Luttinger semimetals like bismuth-based half-Heuslers (YPtBi, LuPtBi, ...) and the pyrochlore  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ . We compare our results with the known literature for Dirac semimetals.

### 4.3.3. Model

At a quadratic band touching, the behavior of non-interacting electrons can be described with the Luttinger Hamiltonian [3]

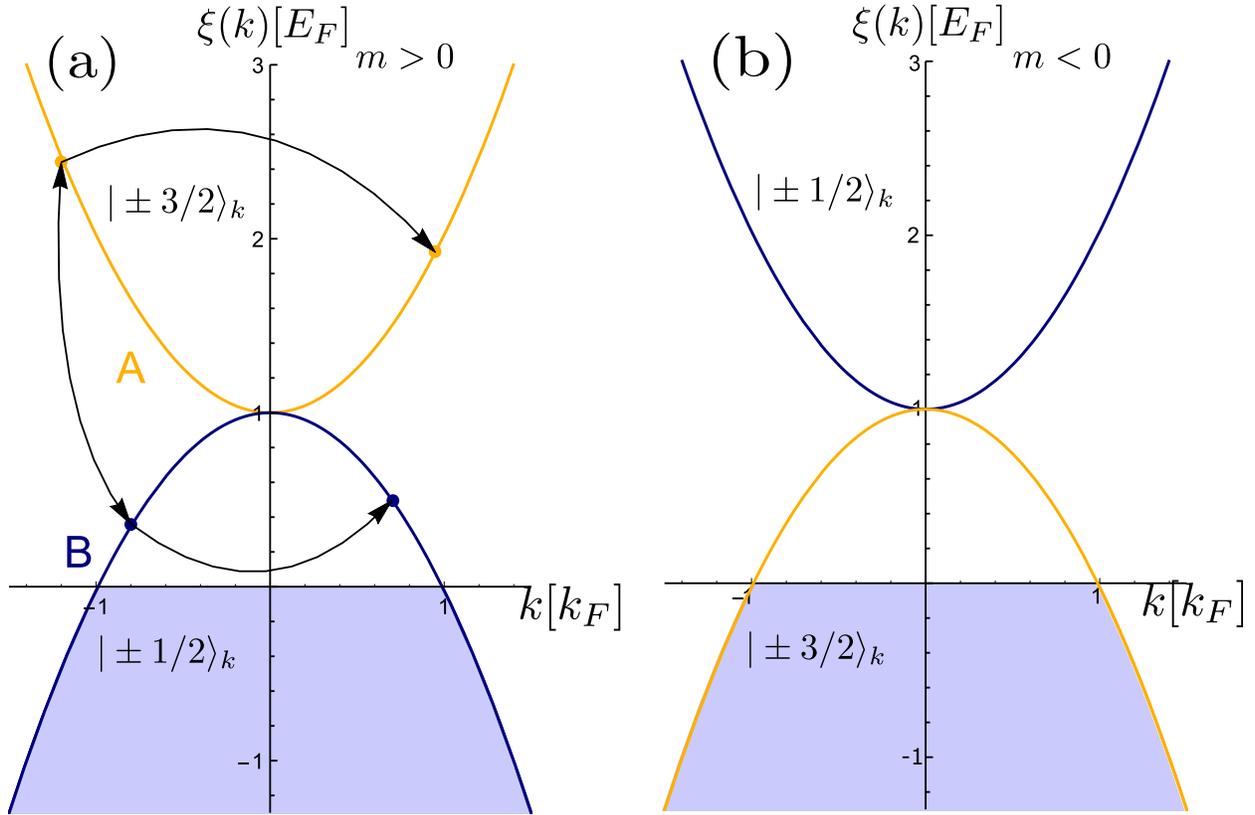
$$\hat{H}_0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\frac{5}{4}\mathbf{k}^2\hat{1} + (\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}})^2 \right] - E_F, \quad (4.3.1)$$

where the band mass is  $m$  and  $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$  are the  $j = 3/2$  total angular momentum operators. This model has rotation, inversion and time-reversal symmetries [?]. The 4 eigenstates of  $\hat{H}_0(\mathbf{k})$  can be labelled with by the eigenvalues  $\lambda = \pm 1/2, \pm 3/2$  of the helicity operator  $\hat{\lambda} = \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}}/k$  and the corresponding spectrum  $\xi_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \hbar^2 k^2 / (2m) - E_F$  is drawn in Fig. 4.1. The precise expression of the corresponding eigenvector is cumbersome and in the following we use the thermal Green's function

$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\frac{i\omega_n + \hat{H}_0(\mathbf{k})}{(\xi_+(\mathbf{k}) + i\omega_n)(\xi_-(\mathbf{k}) + i\omega_n)}, \quad (4.3.2)$$

where  $\hbar\omega_n = (2n + 1)\pi k_B T$  are the Matsubara frequency at temperature  $T$ .

In the following we set  $\hbar = k_B = 1$ , write energies in units of the Fermi energy,  $|E_F|$ , and wavevectors in units of the Fermi wavevector,  $k_F$ . We consider that the Fermi energy is in the lower band,  $E_F = -k_F^2 / (2|m|) < 0$ , but we should have in mind that, depending on



**Fig. 4.1.** Spectrum of a Luttinger semimetal for (a)  $m > 0$  and (b)  $m < 0$ . The Fermi surface is in the lower band and, depending on the sign of the band mass  $m$ , it crosses different eigenstates (a)  $|\pm 1/2\rangle_{\mathbf{k}}$  and (b)  $|\pm 3/2\rangle_{\mathbf{k}}$  of the helicity operator  $\hat{\lambda} = \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}}/k$ . This influences the intraband and interband scattering in the presence of a magnetic impurity. We respectively refer to the lower and upper band as the conduction and valence band in the text, since we consider hole doping.

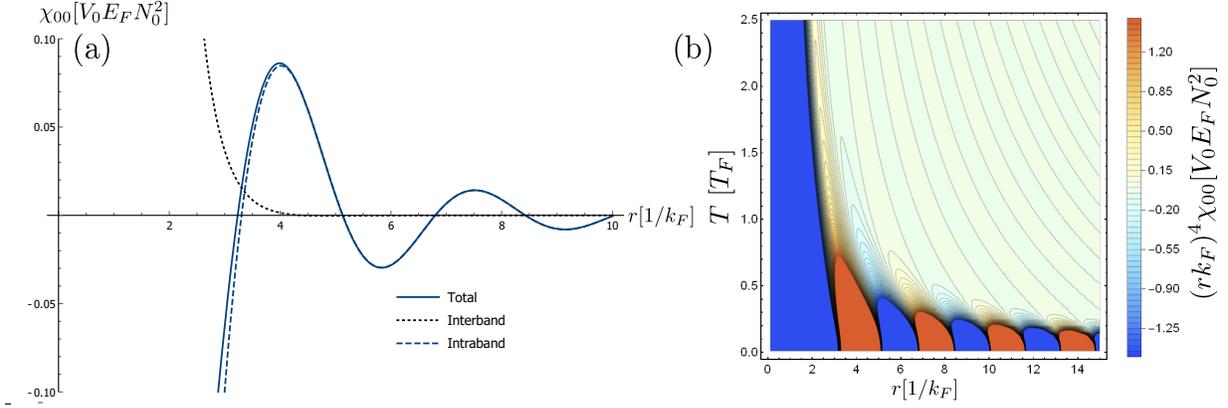
the sign of  $m$ , the Fermi surface can cross eigenstates with either helicity  $\pm 1/2$  if  $m > 0$  or  $\pm 3/2$  if  $m < 0$  (see Fig. 4.1). These two situations will alter the RKKY coupling.

#### 4.3.4. Response to charge and spin impurities

In presence of a charge impurity with potential  $V_0\delta^{(3)}(\mathbf{r})$  and a magnetic impurity with potential  $V_1\mathbf{S}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{J}}\delta^{(3)}(\mathbf{r})$ , a Luttinger semimetal is perturbed by the Hamiltonian [3]

$$\hat{H}_1(\mathbf{r}) = \left( V_0\hat{1} + V_1\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{J}} \right) \delta^{(3)}(\mathbf{r}), \quad (4.3.3)$$

where  $\mathbf{S} = \{S_x, S_y, S_z\}$ . We neglect the anisotropic contributions, such as  $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{J}}^3$  [3], which is a reasonable approximation for most Luttinger semimetals with the exception of  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  [3, 37, 124].



**Fig. 4.2.** Friedel oscillations in response to an impurity that increases the potential at  $\mathbf{r} = 0$  in a Luttinger semimetal with hole-like doping at (a)  $T = 0$  with both intraband and interband contributions (b)  $T \neq 0$ , showing the damping as the temperature increases. The intraband contribution dominates at both short and long range and the interband coupling is only apparent at short range.

In linear perturbation theory, the carrier density  $J_0(\mathbf{r}) = \langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle = \langle \hat{\psi}_{\mathbf{r}}^\dagger \hat{\psi}_{\mathbf{r}} \rangle$  and the  $j = 3/2$  pseudo-spin operators  $J_i(\mathbf{r}) = \langle \hat{J}_i(\mathbf{r}) \rangle = \langle \hat{\psi}_{\mathbf{r}}^\dagger \hat{J}_i \hat{\psi}_{\mathbf{r}} \rangle$  are

$$J_\mu(\mathbf{r}) = \sum_{\nu=0}^3 \chi_{\mu\nu}(\mathbf{r}) S_\nu, \quad (4.3.4)$$

where  $\mu \in \{0,1,2,3\}$  and  $S_0 = 1$ . The generalized susceptibility at a temperature  $T$  is a sum over Matsubara frequencies

$$\chi_{\mu\nu}(\mathbf{r}, T) = -T \sum_{\omega_n} \text{Tr} \left[ \hat{G}(\mathbf{r}, i\omega_n) \hat{J}_\mu \hat{G}(-\mathbf{r}, i\omega_n) \hat{J}_\nu \right]. \quad (4.3.5)$$

Here, for sake of clarity we introduce  $\hat{J}_0 \equiv \hat{1}$ . Note that in the present work we only consider the static regime, *i.e.* Eq. (4.3.5) does not depend on frequency, which is appropriate in the study of impurities. The dynamic charge polarizability at  $T = 0$  was derived in [17, 125]. In a previous work [17] we also show that the Hamiltonian (5.3.1) has no charge-spin coupling, that is  $\chi_{i0} = \chi_{0i} = 0$  for  $i \in \{1,2,3\}$ . In Weyl semimetals, this coupling between charge and spin degrees of freedom allows for spin polarization of charge fluctuations [126]. The generalised susceptibility in the unperturbed, homogeneous gas only depends on  $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  and  $(t - t')$ . In Eq. (4.3.5) and what follows we express  $\chi_{00}$  in units of  $V_0 E_F N_0^2$  and  $\chi_{ij}$  in units of  $V_1 E_F N_0^2$ , where  $N_0 = 1/(4\pi^2)$  is the density of states per spin of an electron gas.

The real space representation of the Green's function in Eq. (4.3.5) is derived in Appendix 4.6. We use rotation symmetry to absorb the angular dependence in a unitary transformation  $\hat{U}_{\theta,\phi}$  on the spinor subspace, *i.e.*  $\hat{G}(\mathbf{r}, i\omega_n) = \hat{U}_{\theta,\phi} \hat{G}(r\mathbf{e}_z, i\omega_n) \hat{U}_{\theta,\phi}^\dagger$  and

$$\begin{aligned} \hat{G}(r\mathbf{e}_z, i\omega_n)/N_0 = & \left[ (i\omega_n - \text{sgn}(m))I_0(r, i\omega_n) + \frac{5}{4} \left( \frac{2}{r} \frac{\partial I_0(r, i\omega_n)}{\partial r} + \frac{\partial^2 I_0(r, i\omega_n)}{\partial r^2} \right) \right] \hat{1} \\ & - \frac{\partial I_0(r, i\omega_n)}{\partial r} (\hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2) - \frac{\partial^2 I_0(r, i\omega_n)}{\partial r^2} \hat{j}_z^2, \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

where the radial dependence of the Green's function is described by  $I_0(r, i\omega_n) = -\frac{1}{r}(A_2(r, i\omega_n) + B_2(r, i\omega_n))$  and its derivatives.

We introduce the functions  $A_p(r, i\omega_n)$  and  $B_p(r, i\omega_n)$  which are related to the contribution from the valence and from the conduction band for a given sign of  $m$  as schematised in Fig. 4.1 :

$$A_p(r, i\omega_n) = \frac{\pi(-i \text{sgn}(\omega_n))^p}{2(-\text{sgn}(m) + i\omega_n)^{p/2}} e^{\text{sgn}(\omega_n)ir\sqrt{-\text{sgn}(m)+i\omega_n}}, \quad (4.3.7)$$

$$B_p(r, i\omega_n) = \frac{\pi(-i \text{sgn}(\omega_n))^p}{2(\text{sgn}(m) - i\omega_n)^{p/2}} e^{-\text{sgn}(\omega_n)ir\sqrt{\text{sgn}(m)-i\omega_n}}. \quad (4.3.8)$$

Thus, the generalized susceptibility (4.3.5) is a sum over all excitations within or between the two bands, which are decomposed over the functions  $AA_{k+p}(r, T) = T \sum_{\omega_n > 0} A_k A_p$ ,  $BB_{k+p}(r, T) = T \sum_{\omega_n > 0} B_k B_p$  and  $AB_{k+p}(r, T) = i^k T \sum_{\omega_n > 0} A_k B_p$  : the expressions with the sum on negative frequencies are simply the complex conjugate of these ones. We numerically perform the summation on Matsubara's frequencies at  $T \neq 0$ . At  $T = 0$  the sum becomes an integral and we compute explicitly these expressions in Appendix 4.7. As expected we find that at zero temperature the intra-valence band terms vanish *i.e.* there are no contributions from intra-valence band scattering since the band is empty. In what follows we separately discuss the charge response, related to Friedel oscillations, and the magnetic response, related to the RKKY coupling. From the last we compute the temperature dependence of the Pauli susceptibility.

In the following we express the susceptibilities in terms of the combinations  $AA_p(r, T)$ ,  $BB_p(r, T)$  and  $AB_p(r, T)$  for a general value of the mass  $m$ . In Appendix 4.7 we explicitly compute the expression of these combinations at  $T = 0$  in the case of a positive mass and deduce the corresponding expressions for a negative one.

4.3.4.1. Friedel oscillations. The charge response of a spin-degenerate normal electron gas at  $T = 0$  in units of  $V_0 E_F N_0^2$  is [57]

$$\chi_{00}^{\text{3DEG}}(r, T = 0) = \frac{2\pi(\sin(2r) - 2r \cos(2r))}{r^4} \quad (4.3.9)$$

In a Luttinger semimetal, the generalized susceptibility also includes interband transitions due to the strong spin-orbit coupling. We compute the trace in Eq. (4.3.5) using the Green's function (4.3.6) and we find

$$\chi_{00}(r, T) = -\frac{4}{r^6} \left( 9(BB_4 + AA_4) + 18r(BB_3 - AA_3) + 15r^2(BB_2 + AA_2) + 6r^3(BB_1 - AA_1) + 2r^4(BB_0 + AA_0) - 18AB_4 - 18(1-i)rAB_3 + 18r^2iAB_2 + 6r^3(1+i)AB_1 \right) + \text{c.c.}, \quad (4.3.10)$$

where the functions on the right-hand side are evaluated for  $(r, T)$  and c.c. stands for complex conjugate. We note here that the charge response is symmetric with respect to the sign of the mass.

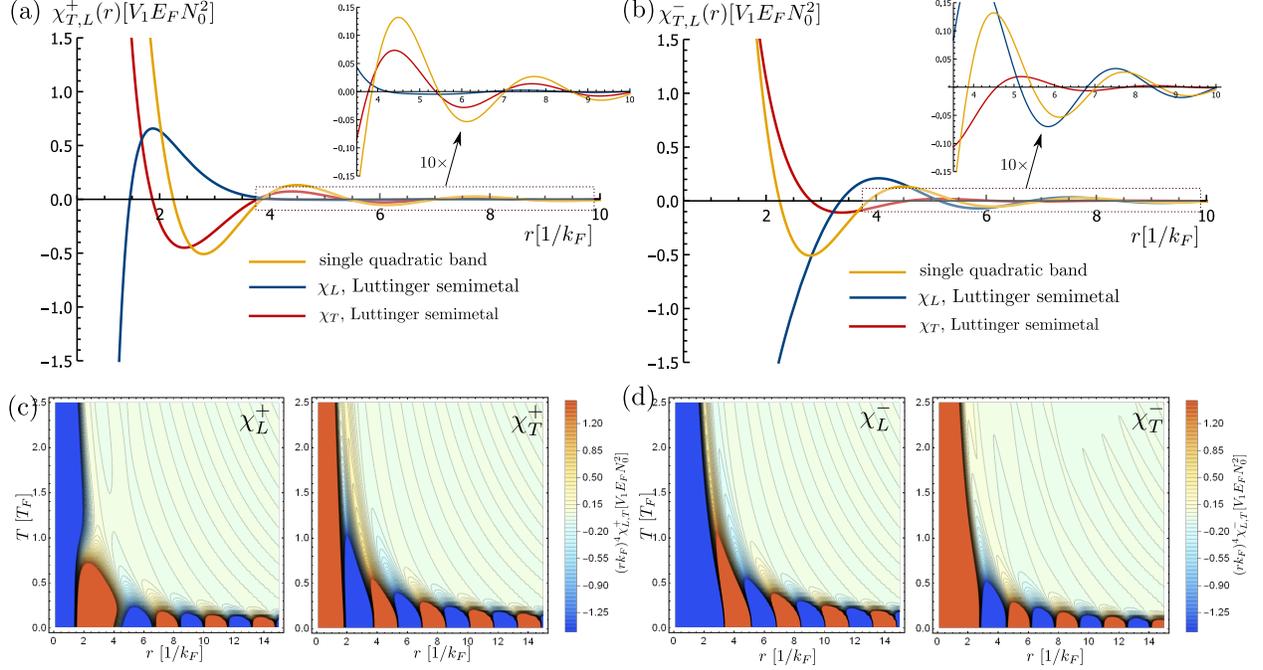
At zero temperature  $T = 0$ , the charge susceptibility behaves as in Fig. 4.2(a). In this figure we decompose the charge susceptibility in terms of intraband contributions, given by  $AA_k$  or  $BB_k$  terms, and interband contributions, given by  $AB_k$  terms. The intraband contribution shows an oscillating behaviour, which is expected from the sharpness of the Fermi surface that forbids excitations with wavevector  $q > 2k_F$ , in the static regime. Oscillations in the interband contribution decay exponentially with distance since the only interband contributions are virtual excitations in the static regime. At long range,  $r \gg 1$ , the response is dominated by the intraband contribution and is about half of that in a normal electron gas given in Eq. (4.3.9). The consequences of spin-orbit coupling are more apparent at short-range,  $r \ll 1$ , where the response is approximately

$$\chi_{00}(r \ll 1, T = 0) \approx -\frac{3\pi(\pi - 2)}{r^4}. \quad (4.3.11)$$

This is in strong contrast with a normal electron gas where  $\chi_{00}^{3\text{DEG}}(r \ll 1, T = 0) \approx 16\pi/3r$ . This is the result of a strong intraband coupling at short range as we can see from the intraband and interband contributions of this asymptotic behavior. We find that the intraband contribution is  $\chi_{00}^{(\text{intra})} \approx \frac{-3\pi^2}{r^4} + \frac{8\pi}{5r}$  and the interband one is  $\chi_{00}^{(\text{inter})} \approx \frac{6\pi}{r^4} - \frac{8\pi}{5r}$  and we notice that the intraband contribution dominates at small  $r$ . Also, the  $1/r$  behavior associated with the 3DEG appears in both contributions, but totally cancel each other. The power law in Eq. (4.3.11) can be related to the linear component of charge polarisability in momentum space [17]. This is of similar origin to the  $1/r^5$  divergence observed in Dirac semimetals and the difference in power laws is a consequence of the difference in band dispersions.

At  $T \neq 0$  we observe a change in the decaying behavior, from power-law to exponential decay, as can be seen in Fig. 4.2(b). There, we also observe the expected damping of Friedel oscillations with a change in their periodicity.

4.3.4.2. RKKY coupling. In absence of spin-orbit coupling, the magnetization profile of a normal electron gas in response to a magnetic impurity is isotropic (*i.e.*  $\chi_{ij} = \chi_s^{3\text{DEG}}\delta_{ij}$ ) just like the charge response in Eq. (4.3.9) [57, 58]. On the contrary, in a Luttinger semimetal, the spin-response  $\hat{\chi}_S$  is anisotropic. The angular dependence of  $\hat{\chi}_S$  is absorbed in the rotation



**Fig. 4.3.** Amplitude of the transverse,  $\chi_T$ , and longitudinal,  $\chi_L$ , RKKY coupling between two magnetic impurities for a single quadratic band ( $\chi_L = \chi_T$ , with  $m < 0$ ) and a Luttinger semimetal (with hole-like doping). (a,b) At  $T = 0$  with a  $10\times$  zoomed inset, with (a)  $m > 0$  and (b)  $m < 0$ . (c,d) At finite temperature with (c)  $m > 0$  and (d)  $m < 0$ . On the contrary to a normal electron gas, a Luttinger semimetal has opposite transverse and longitudinal couplings at short distances. This behaviour is preserved at larger temperatures where we also observe a change in the periodicity of the oscillations.

matrix  $\hat{R}_{\theta,\phi}$ , where  $\theta, \phi$  are the angular coordinates of the separation  $\mathbf{r}$  to the impurity,

$$\hat{\chi}_S(\mathbf{r}, T) = \hat{R}_{\theta,\phi} \begin{pmatrix} \chi_T(r, T) & 0 & 0 \\ 0 & \chi_T(r, T) & 0 \\ 0 & 0 & \chi_L(r, T) \end{pmatrix} \hat{R}_{\theta,\phi}^T. \quad (4.3.12)$$

The diagonal components  $\chi_T(r, T)$  and  $\chi_L(r, T)$  are respectively the transverse and longitudinal spin response:

$$\chi_T(r, T) = \frac{1}{r^6} \left( 9(\text{BB}_4 + \text{AA}_4) + 18r(\text{BB}_3 - \text{AA}_3) + 3r^2(\text{BB}_2 + 9\text{AA}_2) - 6r^3(\text{BB}_1 + 3\text{AA}_1) - 8r^4\text{BB}_0 \right. \\ \left. - 18\text{AB}_4 - 18(1 - i)r\text{AB}_3 + 6(4 + 3i)r^2\text{AB}_2 + 6(3 - i)r^3\text{AB}_1 + 12r^4\text{AB}_0 \right) + \text{c.c.}, \quad (4.3.13)$$

$$\chi_L(r, T) = -\frac{1}{r^6} \left( 45(\text{BB}_4 + \text{AA}_4) + 90r(\text{BB}_3 - \text{AA}_3) + r^2(51\text{BB}_2 + 99\text{AA}_2) + 6r^3(\text{BB}_1 - 9\text{AA}_1) \right. \\ \left. + 2r^4(\text{BB}_0 + 9\text{AA}_0) - 90\text{AB}_4 - 90(1 - i)r\text{AB}_3 + 6(8 + 15i)r^2\text{AB}_2 + 6(9 + i)r^3\text{AB}_1 \right) + \text{c.c.}, \quad (4.3.14)$$

where the functions on the right-hand side are evaluated for  $(r, T)$  and c.c. stands for complex conjugate. The functions  $\text{AA}_p$ ,  $\text{BB}_p$  and  $\text{AB}_p$  are the same as the ones involved in computing the charge response in Eq. (4.3.10) and their expressions at  $T = 0$  are reported in Appendix 4.7.

We find that the spin-response depends on the sign of the mass  $m$  in Eq. (5.3.1). We remind that this parameter does not affect the band dispersion but only the chirality of the states at the Fermi surface, which we illustrate in Figs. 4.1(a,b). We thus distinguish the situations where  $m$  is positive and negative with a superscript  $\pm$  on the spin-response. In Fig. 4.3(a,b) we plot the transverse and longitudinal spin susceptibility at zero temperature.

The intraband scattering dominates the long range behavior,  $r \gg 1$ , and the spin response follows the same power law as in a normal electron gas. However the spin-response stays anisotropic even at long range with, for each sign of  $m$ ,

$$\begin{cases} \chi_T^+(r \gg 1, T = 0) \approx \chi_{00}^{3\text{DEG}}(r)/2 \\ \chi_L^+(r \gg 1, T = 0) \approx \chi_{00}^{3\text{DEG}}(r)/8 \end{cases}, \quad (4.3.15)$$

$$\begin{cases} \chi_T^-(r \gg 1, T = 0) \approx -\frac{9\pi}{2r^4} \sin(2r) \\ \chi_L^-(r \gg 1, T = 0) \approx 9\chi_{00}^{3\text{DEG}}(r)/8 \end{cases}. \quad (4.3.16)$$

We notice that in the long-range behaviour, the longitudinal response has an amplitude  $\lambda^2/2$ , with  $\lambda$  the helicity crossing the Fermi surface (see Fig. 4.1), compared to the normal electron gas. This does not happen for the transverse response, where we even observe that  $\chi_T^-$  decreases in  $1/r^4$  instead of  $1/r^3$  for the normal electron gas.

Close to the magnetic impurity, the short range spin-spin response is anisotropic with opposite transverse and longitudinal contributions

$$\chi_T^\pm(r \ll 1, T = 0) \approx \frac{3\pi(2 + \pi)}{4r^4} \mp \frac{2\pi}{3r}, \quad (4.3.17)$$

$$\chi_L^\pm(r \ll 1, T = 0) \approx -\frac{15\pi(\pi - 2)}{4r^4} \pm \frac{4\pi}{3r}.$$

This, again, is related to the strong spin-orbit coupling and opens the possibility to observe both ferromagnetic and antiferromagnetic coupling between magnetic impurities, from the RKKY coupling.

We observe that for a positive mass,  $m > 0$ , the contribution to the transverse spin-response  $\chi_T^+$  from intraband and interband coupling are respectively  $\frac{15\pi^2}{4r^4} - \frac{6\pi}{r^3} + \frac{8\pi}{5r}$  and  $\frac{3\pi(1-2\pi)}{2r^4} + \frac{6\pi}{r^3} - \frac{34\pi}{15r}$ , and the corresponding behaviors in the longitudinal component  $\chi_L^+$  are  $-\frac{39\pi^2}{4r^4} + \frac{12\pi}{r^3} + \frac{2\pi}{r}$  and  $\frac{3\pi(5+4\pi)}{2r^4} - \frac{12\pi}{r^3} - \frac{2\pi}{3r}$ . The intraband contribution then always dominates close to the magnetic impurity. On the contrary, for a negative mass,  $m < 0$ , the intraband and interband contributions to  $\chi_T^-$  are respectively  $\frac{-9\pi^2}{4r^4} + \frac{6\pi}{r^3} + \frac{8\pi}{5r}$  and  $\frac{3\pi(1+2\pi)}{2r^4} - \frac{6\pi}{r^3} - \frac{14\pi}{15r}$  and for  $\chi_L^-$  they are respectively  $\frac{9\pi^2}{4r^4} - \frac{12\pi}{r^3} + \frac{2\pi}{r}$  and  $\frac{3\pi(5-4\pi)}{2r^4} + \frac{12\pi}{r^3} - \frac{10\pi}{3r}$ . Then, close to the impurity, the two spin-responses are instead dominated by the interband contribution. This indicates that the magnetic coupling at small separation is dominated by excitations involving the bands with the smallest helicities,  $\lambda = \pm 1/2$ .

Similar to our observation for Friedel oscillations, this peculiar behaviour at proximity to the magnetic impurity persists at larger temperatures as shown in Figs. 4.3(a,b). As the temperature increases, we observe a decrease in the periodicity of the RKKY oscillations and a decay in their amplitude. The long range behavior of the spin oscillations shows an exponential decay at finite temperature. In order to complete this discussion, we now obtain the effective RKKY Hamiltonian between two impurities and also compute the Pauli susceptibility in a Luttinger semimetal.

### 4.3.5. Effective RKKY Hamiltonian

The interaction between two magnetic impurities  $\mathbf{S}_1$  and  $\mathbf{S}_2$  localized at respectively  $\mathbf{r}_1$  and  $\mathbf{r}_2$  is described by the coupling Hamiltonian  $\hat{H}_{12}$ :

$$\hat{H}_{12} = V_1 \mathbf{S}_1^T \hat{\chi}_S(\mathbf{r}, T) \mathbf{S}_2, \quad (4.3.18)$$

where  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ , and  $\hat{\chi}_S(\mathbf{r}, T)$  is given in Eq. (4.3.12). This can be rewritten in a more explicit way:

$$\hat{H}_{12}/V_1 = \chi_T \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + (\chi_L - \chi_T)(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{e}_r)(\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{e}_r), \quad (4.3.19)$$

where  $\mathbf{e}_r$  is the unit vector that separates the two impurities and  $\chi_{L,T}$  are evaluated for  $r = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ , the distance between the magnetic impurities. The first and second terms in Eq. (4.3.19) are respectively the Heisenberg and Ising contributions. There is no Dzyaloshinskii-Moriya interaction which would be a consequence of asymmetric spin-orbit coupling [59, 127] and which is absent in Eq. (5.3.1).

This effective spin-spin coupling Hamiltonian differs from that in a normal electron gas where it is Heisenberg-like, *i.e.* only the first contribution in Eq. (4.3.19) is present. Here, in the case of Luttinger semimetals, we obtain an additional coupling between the spin

components parallel to their separation and we evaluate the amplitude of this term for various Luttinger semimetals in the next section. We also note that in Ref. [71], the coupling between the spin chiralities of a Luttinger semimetal is described by a Heisenberg Hamiltonian.

### 4.3.6. Spin susceptibility

In presence of a uniform magnetic field,  $\mathbf{B}$ , the Zeeman coupling will be [3]

$$\hat{H}_2 = -g\mu_B \hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{B}, \quad (4.3.20)$$

where we introduce the  $g$ -factor and the Bohr magneton  $\mu_B = e/(2m_e c)$ . The spin magnetization  $\mathbf{M} \equiv -\nabla_{\mathbf{B}} \langle \hat{H}_2 \rangle = g\mu_B \langle \hat{\mathbf{J}} \rangle = \hat{\chi}_P \mathbf{B}$  defines the Pauli susceptibility  $\hat{\chi}_P$  [53]

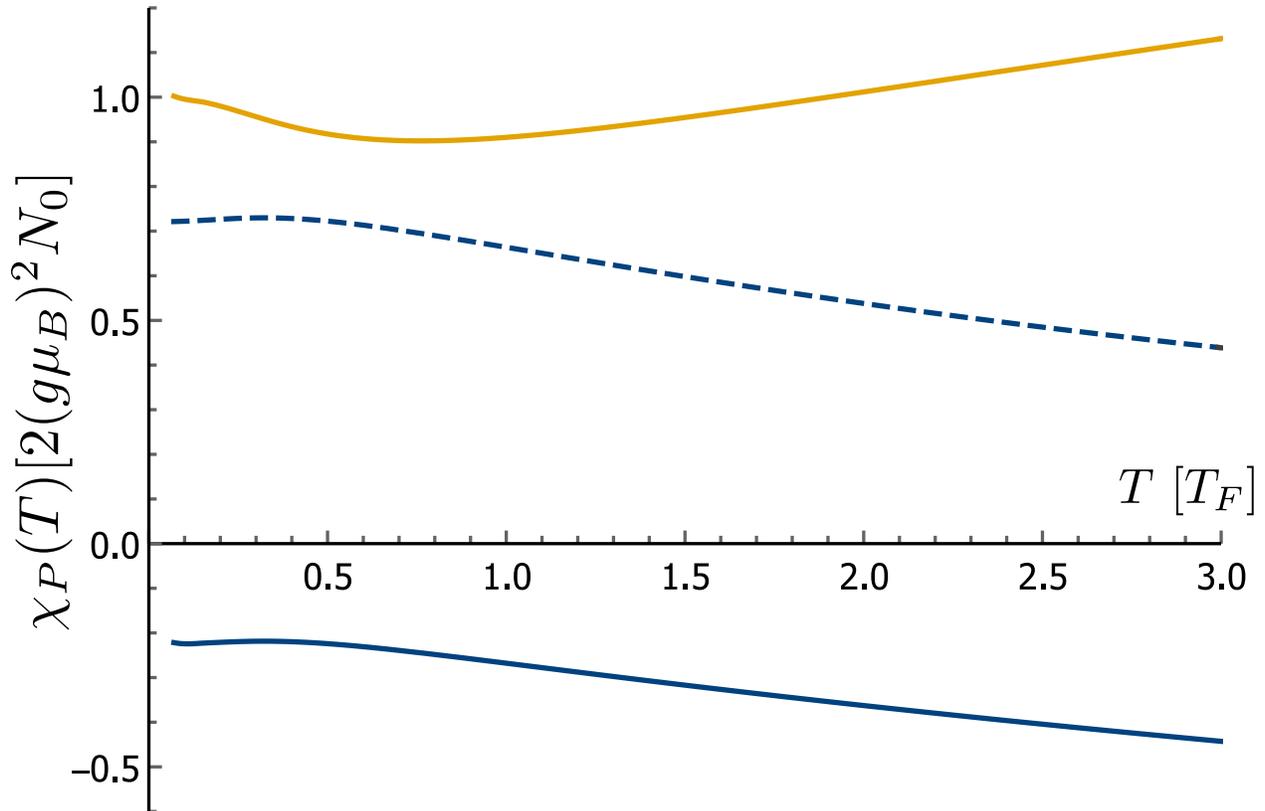
$$\begin{aligned} \hat{\chi}_P(T) &\equiv \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\hat{\chi}_S(\mathbf{k}, T)}{4\pi^2} = \frac{1}{4\pi^2} \lim_{k \rightarrow 0} \int d^3\mathbf{r} \hat{\chi}_S(\mathbf{r}, T) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{3\pi} \int_0^\infty dr r^2 (2\chi_T(r, T) + \chi_L(r, T)) \hat{1}, \end{aligned} \quad (4.3.21)$$

that we write in units of  $(g\mu_B)^2 N_0$ . Here, we perform the angular integral in position-space and take the limit  $k \rightarrow 0$ .

We compute this integral numerically after subtracting the  $1/r^4$  asymptotic contribution in Eq. (4.3.17) from  $\chi_T$  and  $\chi_L$ . These terms do not contribute to the Pauli susceptibility [128] and by subtracting them we avoid numerical instabilities. We obtain the behavior reported in Fig. 4.4 and compare it to the Pauli susceptibility of a normal spin-degenerate electron gas. The response is diamagnetic instead of being paramagnetic, which is analogous the unusual paramagnetic Landau susceptibility in Luttinger semimetals [1] that we reproduce in Fig. 4.4 for a cutoff energy  $E_0/E_F = 10$ . This diamagnetic Pauli susceptibility is a consequence of interband transitions and we find that the contribution of intraband and interband excitations to the susceptibility  $\chi_P = \chi_P^{(\text{intra})} + \chi_P^{(\text{inter})}$  is, at  $T = 0$ ,  $\chi_P^{(\text{intra})} = 5\chi_P^{3\text{DEG}}/4$  and  $\chi_P^{(\text{inter})} = -3\chi_P^{3\text{DEG}}/2$  where  $\chi_P^{3\text{DEG}}$  is the spin susceptibility of the normal electron gas. We also notice that the Pauli susceptibility is independent of the sign of the mass. This behavior is also drastically different from that in Weyl semimetals where the Pauli susceptibility cancels because a magnetic field only splits the cones in momentum space [129] and where the Landau susceptibility is diamagnetic [1, 129].

## 4.4. Discussion

The carrier density of Luttinger semimetals, such as YPtBi [83–86] and  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  [130] is of the order of  $n \approx (0.1 - 1) \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , that is  $k_F \approx 0.3 - 0.7 \text{ nm}^{-1}$  which is comparable to the lattice constant,  $a \approx 0.5 - 1 \text{ nm}$  [28]. Thus  $ak_F \approx 0.1 - 1$  which is well within the region with unusual charge and spin responses due to spin-orbit coupling. With impurities separated by the lattice constant size, one can expect to see the stronger charge coupling near



**Fig. 4.4.** Magnetic susceptibilities as a function of temperature. The Pauli susceptibilities of a normal electron gas (in orange) is paramagnetic while it is diamagnetic in a Luttinger semimetal (plain line, in blue). Also shown is the Landau susceptibility in Luttinger semimetals [1] that we draw for a cutoff energy  $E_0/E_F = 10$  (dashed line).

a charge impurity and opposite signs for the transverse and longitudinal spin-spin interaction. Note that YPtBi lacks a center of inversion and allows for additional asymmetric spin-orbit interactions in Eq. (5.3.1), that split the bandstructure. In the present discussion we neglect this effect which is not always present [86] and leads to a Fermi surface splitting  $\Delta k$  of at most 8% of  $k_F$  in this material [83]. More specifically, in the case of  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  the magnetic coupling occurs between the  $4f$  orbitals of the  $\text{Pr}^{3+}$  ions described by  $J = 4$  magnetic non-Kramers doublets with  $J_z = \pm 4$  [35] and separated by a distance  $ak_F \approx 1.7-2$  [33, 131, 132]. Then, the ratio between the two contributions in the effective Hamiltonian (4.3.19), given by  $\frac{\chi_L - \chi_T}{\chi_T}$  is in the region  $[-2.5, -3]$  if one takes  $m < 0$ . In this interval of  $ak_F$ , one coupling is ferromagnetic while the other is antiferromagnetic, depending on the sign of  $V_1$  as can be seen in Fig. 4.3(b).

However this ratio strongly fluctuates and can reach large values if one takes  $m > 0$  since  $\chi_T$  is close to zero according to our calculations (see Fig. 4.3(a)). In this case  $\chi_T$  can be positive or negative in this interval and  $\chi_L - \chi_T > 0$ . A similar analysis for the family of bismuth half-Heusler  $\text{MXBi}$  ( $M = \text{Y, Lu}$ ) ( $X = \text{Pd, Pt}$ ) where the ions are separated by

$ak_F \approx 0.1 - 0.5$  [28, 133, 134], gives ratios independent on the sign of the mass and of about  $-2$ , again with one coupling being ferromagnetic and the other antiferromagnetic. In a recent work we have pointed the importance of these Friedel oscillations in the superconductivity from the Coulomb repulsion in Luttinger semimetals [8, 135]. The anisotropic magnetic coupling may, as well, be responsible for exotic magnetic phases [70, 136]. However, these short-range effects may be strongly renormalized by interactions. Here, we neglect screening and vertex corrections which are the strongest at short-range and may push these effects to even shorter-ranges, as in the normal electron gas [137].

The consequences of spin-orbit coupling on Friedel and RKKY oscillations in Luttinger semimetals have some similarities with isotropic Dirac semimetals. Dirac semimetals also have a strong spin-orbit coupling but with a linear band dispersion that leads to a  $1/r^3$  decay of the oscillations [62, 64, 117, 121]. These semimetals also show a spin-spin coupling with Heisenberg and Ising contributions as in (4.3.19) and similar structures [114, 115, 122] and that can be made more anisotropic if the Weyl cones are split [62, 64, 121]. This anisotropy also survives at long-range (4.3.16) and at higher temperatures, Fig. 4.3 (c,d). The Weyl cones are characterized by an helicity operator, related to the cones chirality, but the RKKY coupling is independent on this degree freedom. This is in stark contrast to the behavior observed in our calculations for Luttinger semimetals, where the helicity at the Fermi surface matters for the profile of magnetic coupling.

It is also interesting to take the limit  $\mu = 0$  at  $T = 0$ , in which case the carrier density vanishes and the model does not possess any energy scale. In Dirac and Weyl semimetals, this result in a nonoscillatory  $r^{-5}$  decaying RKKY behavior [62, 64, 121]. In the case of Luttinger semimetal, the Friedel and RKKY responses show a nonoscillatory  $r^{-4}$  decaying behavior and we also note that the response is exactly the  $r^{-4}$  terms from the expressions in Eq. (4.3.11) for Friedel oscillations and Eq. (4.3.17) for the RKKY responses. This difference in power law between Dirac and Luttinger semimetals could prove useful to experimentally probe the strong orbit-coupling since the response is more long-ranged in Luttinger semimetals. In the previous subsection 4.3.6 we also find a diamagnetic Pauli susceptibility, whereas in Weyl semimetals where the Pauli susceptibility cancels [129]. Since the two band structures can be related by applying strain or a magnetic field [38, 50, 65, 66], it is interesting to see that our results should still hold for energies larger than the energy scale of the Weyl cones. GdPtBi is an example of such a material, with induced Weyl point from the rare-earth exchange field, but with quadratic band dispersion far from the Fermi surface [67, 68].

## 4.5. Conclusion

In this work we compute the response of a Luttinger semimetal to a charged and to a magnetic impurity. At large separations, the charge and magnetic oscillations are similar to that of a normal electron gas, up to an anisotropy for the magnetic response. The main difference between the two systems is at short distance, where spin-orbital effects are the most important and result in a  $r^{-4}$  divergence. In particular we observe opposite transverse and longitudinal magnetic couplings, even if the model is isotropic. We obtain the RKKY interaction Hamiltonian between two impurities and compute the Pauli susceptibility and find that it is diamagnetic instead of being paramagnetic, which is in line with previous calculations that find a paramagnetic orbital susceptibility in Luttinger semimetals [1].

This response of Luttinger semimetals to impurities may lead to exotic phase transitions [138, 139]. The Friedel oscillations contribute to the Kohn-Luttinger mechanism of superconductivity [6] which we have recently studied for Luttinger semimetals [8]. The peculiar RKKY coupling could be at the origin of exotic magnetic phases. In this work we focused on the bulk response of Luttinger semimetals which may have a different behavior at their surface and is more relevant in scanning tunneling microscopy (STM). Indeed, it was recently discussed that these materials may have surface states [140] with various band dispersions and that could be responsible for a different surface response than described in the present manuscript.

While finishing the present work, we became aware of a similar one that has been published [60]. In this work the authors explore the RKKY interaction in 2D Luttinger's systems with anisotropic electron-hole dispersion, in contrast to the present work where we focus on 3D system and where we observe anisotropy in the RKKY response even with electron-hole symmetry.

This project is funded by a grant from Fondation Courtois, a Discovery Grant and Canada Graduate Scholarships – Master's Program from NSERC, a Canada Research Chair, and a “Établissement de nouveaux chercheurs et de nouvelles chercheuses universitaires” grant from FRQNT.

## 4.6. Appendix A: Fourier transform of the thermal Green's function

In this appendix, we compute the Fourier transform of the thermal Green's function (4.3.2) for general  $m$

$$\hat{G}(\mathbf{r}, i\omega_n) \equiv \frac{N_0}{2\pi} \int d^3\mathbf{k} \hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = -\frac{N_0}{2\pi} \int d^3\mathbf{k} \frac{(i\omega_n - \text{sgn}(m) - \frac{5}{4}\mathbf{k}^2) \hat{1} + (\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}})^2}{(\xi_+(\mathbf{k}) + i\omega_n)(\xi_-(\mathbf{k}) + i\omega_n)} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (4.6.1)$$

with  $\xi_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm k^2 - \text{sgn}(m)$ . We write (4.6.1) in terms of the auxiliary integral  $I_0(r, i\omega_n)$  and its derivatives  $I_{ij}(\mathbf{r}, i\omega_n) = \frac{\partial^2 I_0(r, i\omega_n)}{\partial r_i \partial r_j}$  :

$$\hat{G}(\mathbf{r}, i\omega_n) = N_0 \left[ \left( (i\omega_n - \text{sgn}(m)) I_0(r, i\omega_n) - \frac{5}{4} \sum_{i=1}^3 I_{ii}(\mathbf{r}, i\omega_n) \right) \hat{1} + \sum_{i,j=1}^3 I_{ij}(\mathbf{r}, i\omega_n) \hat{J}_i \hat{J}_j \right], \quad (4.6.2)$$

The integral  $I_0(r, i\omega_n)$  corresponds to the  $k$ -independent part of the numerator in (4.6.1) and evaluates to :

$$I_0(r, i\omega_n) = \int_0^\infty dk k^2 \int_{-1}^1 du \frac{e^{ikru}}{(k^2 - (\text{sgn}(m) - i\omega_n))(k^2 - (i\omega_n - \text{sgn}(m)))} \quad (4.6.3)$$

$$= \frac{-i}{r} \int_{-\infty}^\infty dk \frac{k e^{ikr}}{(k^2 - (\text{sgn}(m) - i\omega_n))(k^2 - (i\omega_n - \text{sgn}(m)))} \quad (4.6.4)$$

$$= \frac{\pi}{2r(-\text{sgn}(m) + i\omega_n)} \left( e^{\text{sgn}(\omega_n) i \sqrt{-\text{sgn}(m) + i\omega_n} r} - e^{-\text{sgn}(\omega_n) i \sqrt{\text{sgn}(m) - i\omega_n} r} \right). \quad (4.6.5)$$

The integration of the terms of the form  $k_i k_j$  in the numerator of the Green's function can be written as the derivatives of this auxiliary integral :

$$I_{ij}(\mathbf{r}, i\omega_n) = -\frac{\partial^2 I_0(r, i\omega_n)}{\partial r_i \partial r_j} = \int_0^\infty dk k^2 \int_{-1}^1 du \frac{k_i k_j e^{ikru}}{(k^2 - (\text{sgn}(m) + i\omega_n))(k^2 + (\text{sgn}(m) + i\omega_n))} \quad (4.6.6)$$

$$= -\frac{r_i r_j}{r^2} \left( \frac{\partial^2 I_0(r, i\omega_n)}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial I_0(r, i\omega_n)}{\partial r} \right) - \frac{\delta_{ij}}{r} \frac{\partial I_0(r, i\omega_n)}{\partial r}. \quad (4.6.7)$$

We use rotation symmetry to simplify (4.6.1) and introduce the unitary transformation  $\hat{U}_{\theta\phi}$  generated by the pseudo-spin  $j = 3/2$  operator  $\hat{\mathbf{J}}$  to write  $\hat{G}(\mathbf{r}, i\omega_n) = \hat{U}_{\theta\phi} \hat{G}(r\mathbf{e}_z, i\omega_n) \hat{U}_{\theta\phi}^\dagger$ .

The Green's function  $\hat{G}(r\mathbf{e}_z, i\omega_n)$  can then be similarly decomposed into

$$\hat{G}(r\mathbf{e}_z, i\omega_n) = N_0 \left[ \left( (i\omega_n - \text{sgn}(m))I_0(r, i\omega_n) - \frac{5}{4} \sum_{i=1}^3 I_{ii}(r\mathbf{e}_z, i\omega_n) \right) \hat{1} + \sum_{i,j=1}^3 I_{ij}(r\mathbf{e}_z, i\omega_n) \hat{J}_i \hat{J}_j \right], \quad (4.6.8)$$

where we write  $I_{ij}(r\mathbf{e}_z, i\omega_n)$  in a matrix form

$$I_{ij}(r\mathbf{e}_z, i\omega_n) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{r} \frac{\partial I_0(r, i\omega_n)}{\partial r} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{r} \frac{\partial I_0(r, i\omega_n)}{\partial r} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\partial^2 I_0(r, i\omega_n)}{\partial r^2} \end{pmatrix}. \quad (4.6.9)$$

We substitute these expressions in (4.6.8) and obtain the real space Green's function reported in main text, (4.3.6).

## 4.7. Appendix B: Explicit contributions to susceptibilities at $T = 0$ , $m > 0$

The generalized susceptibility (4.3.5) depends on multiple contributions from intra and interband scattering. In this section we explicitly denote the combinations of the  $m > 0$  case with a plus superscript, and in the following subsection obtain the relationship between these expressions and those corresponding to the case  $m < 0$ , denoted with a minus superscript. In the limit  $T \rightarrow 0$ , with  $m > 0$ , the intra-valence band contributions  $\text{AA}_p^+(r, T = 0)$  in Eqs. (4.3.10, 4.3.13, 4.3.14) vanish  $\forall p$  and the Matsubara sums

$$\begin{aligned} \text{BB}_{k+p}^+(r, T) &= T \sum_{\omega_n > 0} B_k^+(r, i\omega_n) B_p^+(r, i\omega_n), \\ \text{AB}_{k+p}^+(r, T) &= i^k T \sum_{\omega_n > 0} A_k^+(r, i\omega_n) B_p^+(r, i\omega_n), \end{aligned} \quad (4.7.1)$$

can be evaluated analytically with the Euler-MacLaurin summation formula  $T \sum_{\omega_n} \approx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega$ . These expressions are

$$\text{BB}_0^+(r, T = 0) = \frac{1}{2\pi} \frac{\pi^2}{4} \int_0^\infty d\omega e^{-2ir\sqrt{1-i\omega}} = \frac{\pi(-i+2r)}{16r^2} e^{-2ir}, \quad (4.7.2)$$

$$\text{BB}_1^+(r, T = 0) = \frac{1}{2\pi} \frac{\pi^2}{4} \int_0^\infty d\omega \frac{e^{-2ir\sqrt{1-i\omega}}}{i\sqrt{1-i\omega}} = -\frac{i\pi e^{-2ir}}{8r}, \quad (4.7.3)$$

$$\text{BB}_2^+(r, T = 0) = -\frac{1}{2\pi} \frac{\pi^2}{4} \int_0^\infty d\omega \frac{e^{-2ir\sqrt{1-i\omega}}}{1-i\omega} = \frac{\pi(-\pi + i \text{Ei}(-2ir))}{4}, \quad (4.7.4)$$

$$\text{BB}_3^+(r, T = 0) = \frac{1}{2\pi} \frac{\pi^2}{4} \int_0^\infty d\omega \frac{ie^{-2ir\sqrt{1-i\omega}}}{(1-i\omega)^{3/2}} = -\frac{\pi(e^{-2ir} - 2\pi r + 2ir \text{Ei}(-2ir))}{4}, \quad (4.7.5)$$

$$\text{BB}_4^+(r, T = 0) = \frac{1}{2\pi} \frac{\pi^2}{4} \int_0^\infty d\omega \frac{e^{-2ir\sqrt{1-i\omega}}}{(1-i\omega)^2} = \frac{\pi(e^{-2ir}(i+2r) - 4r^2(\pi - i \text{Ei}(-2ir)))}{8}, \quad (4.7.6)$$

where  $\text{Ei}(r)$  is the exponential integral and, using that,

$$\text{AB}_p^+(r, T) = T \sum_{\omega_n > 0} \frac{\pi^2}{4} \frac{(-i)^p}{(1-i\omega_n)^{p/2}} e^{-2i\sqrt{1-i\omega_n}[(1-i)r/2]} = \text{BB}_p^+((1-i)r/2, T), \quad (4.7.7)$$

one can deduce from (4.7.2-4.7.6) the corresponding expressions of  $\text{AB}_p^+(r, T = 0)$ .

#### 4.7.1. Relationships to $m < 0$ , $\forall T$

One can obtain the following relationships between the expressions corresponding to a positive mass and the ones for a negative mass :

$$\text{AA}_p^-(r, T) = (-1)^p (\text{BB}_p^+(r, T))^*, \quad (4.7.8)$$

$$\text{BB}_p^-(r, T) = (-1)^p (\text{AA}_p^+(r, T))^*, \quad (4.7.9)$$

$$\text{AB}_p^-(r, T) = (-i)^p (\text{AB}_p^+(r, T))^* \quad (4.7.10)$$

where the minus/plus superscript refers to the case  $m < 0$  and  $m > 0$ , respectively, and the asterisk denotes the complex conjugate. Then, for  $m < 0$ , the intra-valence band contributions are associated to  $\text{BB}_p^-$  and do not contribute to Eqs. (4.3.10, 4.3.13, 4.3.14) at  $T = 0$  since it is empty.

# Chapitre 5

---

## Supraconductivité par le mécanisme d'interaction Coulombienne écranté dans les semi-métaux de Luttinger

Ce chapitre présente nos résultats quant à l'étude de la supraconductivité dans les semi-métaux de Luttinger. Ce projet a donné lieu à un article scientifique, *Superconductivity from Coulomb repulsion in three-dimensional quadratic band touching Luttinger semimetals* [8] qui est présenté à la sous-section 5.3 du présent chapitre.

### 5.1. Introduction

Comme introduit au chapitre 2, dans ce travail nous étudions théoriquement un mécanisme de supraconductivité non-conventionnel des semi-métaux de Luttinger. Pour ce faire, nous résolvons numériquement l'équation d'Eliashberg linéarisée et symétrique discutée à la section 3.3. Nous considérons un gap supraconducteur singulet, avec une dépendance angulaire isotrope, dépendant explicitement du vecteur d'onde et de la fréquence. Pour ce calcul nous tenons compte du fort couplage spin-orbite des semi-métaux de Luttinger et des corrections à la self-énergie des électrons. Pour ce faire, nous décomposons la fonction de gap sur une grille de fréquences et de vecteurs d'onde, découpée finement pour assurer une solution convergente et stable de la température critique lors de la résolution de l'équation d'Eliashberg. La majeure partie de travail numérique tient dans le calcul des éléments de matrices. Une fois cela fait, résoudre le système à valeurs propres conséquent nous permet d'obtenir la température critique, correspondant à la température où la valeur propre maximale s'annule. Nos résultats montrent que la température critique dans ce modèle est linéaire avec la température de Fermi du matériau. Nos prédictions quant à la température critique des semi-métaux de Luttinger demis-Heusler à base de bismuth, comme YPtBi, sont cohérentes en ordre de grandeur avec les expériences.

Dans un deuxième temps nous étudions la sensibilité de la température critique aux changements dans la fonction d'écrantage diélectrique à l'aide de la dérivée fonctionnelle de la température critique par la fonction diélectrique,  $\delta T_c / \delta \epsilon(i\Omega_n, q)$ . Nos résultats montrent que la température critique est le plus sensible à l'écrantage de longue portée, associé aux oscillations du plasma électronique, et à l'écrantage statique dû à la discontinuité de la fonction diélectrique à  $q = 2k_F$ .

De plus, les annexes de l'article présentent la plupart des dérivations des équations du corps du texte, comme l'équation d'Eliashberg, et l'expression des diverses quantités présentes dans celle-ci. Nous discutons aussi plus en détail de la méthode de résolution numérique: par exemple nous considérons les comportements asymptotiques de la fonction de gap sur la grille en fréquences et en vecteur d'onde afin de diminuer le nombre de calculs numériques.

## 5.2. Rôle des différents auteurs

Les trois auteurs de la publication sont Sergueï Tchoumakov, un chercheur postdoctoral de l'équipe du Professeur William Witczak-Krempa, Louis Godbout, le présent auteur et William Witczak-Krempa lui-même. Ce travail est dans la continuité du projet de Sergueï Tchoumakov et William Witczak-Krempa sur l'étude des propriétés diélectriques et électroniques des semi-métaux de Luttinger [17]. Sergueï Tchoumakov a été en charge de la dérivation et de la résolution numérique de l'équation d'Eliashberg, ainsi que du calcul de la sensibilité de la température critique à l'écrantage. L'interprétation des résultats et leur lien avec l'expérience a été réalisée conjointement par les trois auteurs et c'est Sergueï Tchoumakov qui a rédigé la majorité de l'article.

Plus précisément, l'étudiant Louis Godbout a reproduit et vérifié les résultats principaux de la publication. Cette contribution a permis aux auteurs de mieux appréhender la convergence et la stabilité des calculs numériques sous-jacents. Il a aussi considéré des modèles simplifiés d'écrantage et de gap supraconducteur afin de gagner en intuition quant à la résolution de l'équation d'Eliashberg et des résultats obtenus. Ce travail a servi à améliorer la méthodologie de calcul et à faciliter l'interprétation des résultats pour des cas limites de la fonction diélectrique.

## 5.3. Superconductivity from Coulomb repulsion in three-dimensional quadratic band touching Luttinger semimetals

S. Tchoumakov<sup>1</sup>, L. J. Godbout<sup>1</sup>, W. Witczak-Krempa<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Département de Physique, Université de Montréal, Montréal, Québec, H3C 3J7, Canada

<sup>2</sup>Centre de Recherches Mathématiques, Université de Montréal; P.O. Box 6128, Centre-ville Station; Montréal (Québec), H3C 3J7, Canada

<sup>3</sup>Regroupement Québécois sur les Matériaux de Pointe (RQMP)

### 5.3.1. Abstract

We study superconductivity driven by screened Coulomb repulsion in three-dimensional Luttinger semimetals with a quadratic band touching and strong spin-orbit coupling. In these semimetals, the Cooper pairs are formed by spin-3/2 fermions with non-trivial wavefunctions. We numerically solve the linear Eliashberg equation to obtain the critical temperature of a singlet  $s$ -wave gap function as a function of doping, with account of spin-orbit and self-energy corrections. In order to understand the underlying mechanism of superconductivity, we compute the sensitivity of the critical temperature to changes in the dielectric function  $\epsilon(i\Omega_n, q)$ . We relate our results to the plasmon and Kohn-Luttinger mechanisms. Finally, we discuss the validity of our approach and compare our results to the literature. We find good agreement with some bismuth-based half-Heuslers, such as YPtBi, and speculate on superconductivity in the iridate  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ .

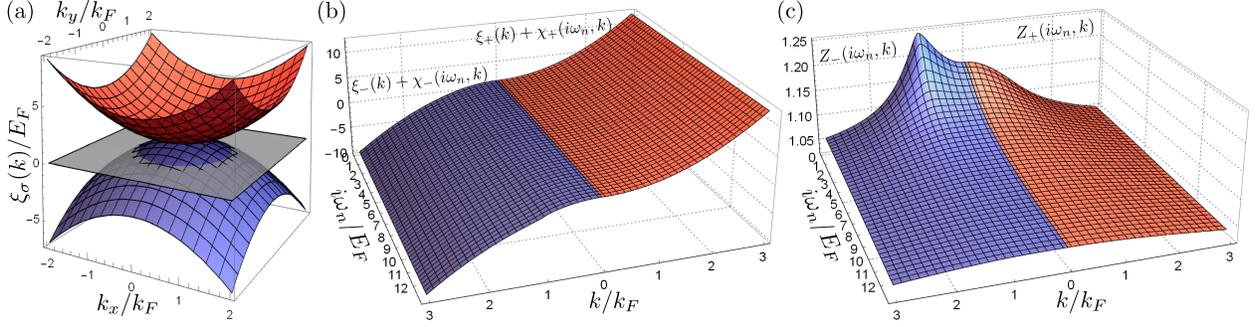
### 5.3.2. Introduction

The superconductivity of semiconducting materials has been experimentally studied since the 60s [72]. For most of these materials, such as diamond and silicon, experimental data and ab-initio calculations [73–75] point towards a conventional pairing mechanism mediated by phonons [4, 58]. However, this picture does not seem to hold for some dilute semiconductors such as  $\text{SrTiO}_3$  [76–78],  $\text{PbTe}$  [79] and bismuth-based half-Heusler materials like YPtBi [80] where other pairing mechanisms have been suggested [2, 12, 81, 82]. In various works it is proposed that YPtBi is a three-dimensional (3D) quadratic band-touching Luttinger semimetal [3, 12, 24], where the quasiparticles are characterized by a pseudospin  $j = 3/2$  due to the strong spin-orbit coupling [12, 13, 25, 141]. It is predicted that these semimetals exhibit topological surface states [142]. Also, it was argued that Luttinger semimetals show non-Fermi liquid behaviour at small doping [143–145], which makes them

prime candidates to study novel phases arising from the interplay of spin-orbit coupling and electron interactions [146]. It was recently suggested that Luttinger semimetals, like YPtBi, constitute a platform for Cooper pairs of spin-3/2 fermions, including topological superconductivity [12, 13, 25, 80, 90–93].

In the present work we study singlet  $s$ -wave superconductivity in doped 3D Luttinger semimetals arising from the dynamically screened Coulomb repulsion between electrons. An analogous pairing mechanism was first proposed by Kohn and Luttinger in metals [6, 147] who found that the screened Coulomb potential has attractive contributions that condense Cooper pairs with non-zero angular momentum ( $\ell \neq 0$ ). This mechanism is of similar origin to the Friedel oscillations at  $2k_F$ , and usually leads to a small critical temperature. However, if one also considers the frequency dependence of the dielectric permittivity  $\epsilon(i\Omega_n, q)$ , within the random phase approximation (RPA), one finds a larger critical temperature [2, 81] that may account for the observed  $T_c$  in SrTiO<sub>3</sub> [89]. In that case, contrary to the Kohn-Luttinger mechanism where the interaction is static, the critical temperature is obtained for a singlet  $s$ -wave order parameter and the gap function changes sign with frequency [2, 82, 87]. The origin of the superconducting instability is then attributed to the electron-plasmon coupling because the screened Coulomb potential is negative for frequencies below the plasma frequency and above the region of electron-hole excitations [88]. In this approach, most of the studies are based on a spin degenerate quadratic band model without spin-orbit coupling, which is well-suited for SrTiO<sub>3</sub> [2, 89] but not for Luttinger semimetals like YPtBi [80]. Indeed, it was recently shown that, compared to a single quadratic band, the interband coupling increases the long-range screening of the electric field and reduces the effective plasma frequency [15–18]. This would weaken superconductivity within the aforementioned mechanism. This is without taking into account spin-orbit effects and the smaller self-energy corrections [17] that usually compete against superconductivity.

In Sec. 5.3.3 we discuss and solve the Eliashberg equation of a Luttinger semimetal with electron-electron repulsion and compare our results to the case of a single quadratic band. In Sec. 5.3.4, we discuss the influence of the frequency and wavevector dependence of the dielectric permittivity,  $\epsilon(i\Omega_n, q)$ , on the critical temperature. For this we compute the functional derivative  $\delta T_c / \delta \epsilon(i\Omega_n, q)$  within a procedure similar to that used by Bergmann and Rainer in the 70s to discuss the effect of phonon softening in amorphous superconductors [148, 149]. Finally, in Sec. 5.3.5, we compare our results to the experimental observations on superconducting Luttinger semimetals such as YPtBi, and we discuss the applicability of our theoretical description.



**Fig. 5.1.** (a) Band-structure of the quadratic band touching Luttinger model; the gray plane is at the chemical potential. The upper (red) and lower (blue) bands are doubly degenerate, and we consider a singlet pairing within each band. (b,c) Behaviour of (b)  $\xi_\sigma(i\omega_n, k) + \chi_\sigma(i\omega_n, k)$  and (c)  $Z_\sigma(i\omega_n, k)$  for  $r_s = 4$  with  $\sigma = +$  in red and  $-$  in blue. The Coulomb repulsion mostly affects the single-particle Hamiltonian at the Fermi energy (here,  $\sigma = -$  and  $(i\omega_n, k) = (0, k_F)$ ).

### 5.3.3. Superconducting pairing

5.3.3.1. Model. The behaviour of non-interacting electrons at a quadratic band touching is described by the Luttinger Hamiltonian [3]

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ (\alpha_1 - 5\alpha_2/4) \mathbf{k}^2 + \alpha_2 (\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}})^2 \right] - \mu. \quad (5.3.1)$$

We denote the band mass  $m$  and the  $j = 3/2$  total angular momentum operators  $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ . This model has inversion, rotation and time-reversal symmetry  $\hat{\mathcal{T}}$  [11–13]. The Luttinger Hamiltonian describes four bands that meet quadratically at  $\mathbf{k} = 0$ , see Fig. 5.1(a). The upper and lower bands are degenerate with energy  $\varepsilon_\sigma = \sigma \hbar^2 k^2 / (2m_\sigma)$  where  $\sigma = \pm$ . The upper and lower band masses,  $m_\pm = m / (\alpha_2 \pm \alpha_1)$ , are not necessarily the same. The eigenstates can be further decomposed in terms of Kramer partners  $\lambda = \pm$ ,  $|\sigma, \lambda, \mathbf{k}\rangle$  with  $\lambda = \pm$ , such that  $|\sigma, +, \mathbf{k}\rangle = \hat{\mathcal{T}} |\sigma, -, \mathbf{k}\rangle$  [150]. It is convenient to introduce the projection operator  $\hat{P}_\sigma(\mathbf{k})$  on subband  $\sigma$  with  $\hat{P}_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\hat{1} + \hat{H}_0(\mathbf{k}) / \xi_\sigma(\mathbf{k})] = \sum_{\lambda=\pm} |\sigma, \lambda, \mathbf{k}\rangle \langle \sigma, \lambda, \mathbf{k}|$ , where  $\xi_\sigma = \varepsilon_\sigma - \mu$ . This expression allows us to describe the eigenspinor overlap [12, 14–18]

$$\text{Tr}[\hat{P}_{\sigma_1}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \hat{P}_{\sigma_2}(\mathbf{k})] = \frac{1}{2} \left\{ 2 + \sigma_1 \sigma_2 [3 \cos^2(\theta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}) - 1] \right\}, \quad (5.3.2)$$

which is central in the description of interband coupling. In the following we consider a particle-hole symmetric spectrum, where  $\alpha_1 = 0$  and  $\alpha_2 = 1$ , with hole doping such that  $E_F < 0$ . We discuss the effect of particle-hole asymmetry in Sec. 5.3.4.

The bare interaction between electrons is described by the Coulomb potential  $V_0(q) = 4\pi e^2 / (\epsilon^* q^2)$  where  $\epsilon^*$  is the background dielectric permittivity. In second quantization, the

full Hamiltonian is

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\psi}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{H}_0(\mathbf{k}) \hat{\psi}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{s_1 s_2 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2, \mathbf{q} \neq 0} V_0(q) \hat{\psi}_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} s_1}^\dagger \hat{\psi}_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} s_2}^\dagger \hat{\psi}_{\mathbf{k}_2 s_2} \hat{\psi}_{\mathbf{k}_1 s_1}, \quad (5.3.3)$$

where we introduce the fermionic annihilation operators  $\hat{\psi}_{\mathbf{k}s} = \{\hat{\psi}_{\mathbf{k},3/2}, \hat{\psi}_{\mathbf{k},1/2}, \hat{\psi}_{\mathbf{k},-1/2}, \hat{\psi}_{\mathbf{k},-3/2}\}$  of the  $j = 3/2$  representation.

In the following we set  $\hbar = k_B = 1$ . We write energies in units of the Fermi energy,  $E_F$ , and wavevectors in units of the Fermi wavevector,  $k_F$ . This choice of units allows us to write all expressions as a function of the Wigner-Seitz radius,  $r_s = me^2/(\alpha\epsilon^*k_F)$  with the constant  $\alpha = (4/9\pi)^{1/3} \approx 0.52$ ,  $k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$  and where  $E_F = -k_F^2/2m < 0$  is in the bottom band. The band structure is particle-hole symmetric and because we consider  $s$ -wave pairing, our observations are independent on the sign of the Fermi energy [12].

5.3.3.2. Eliashberg equation. The Eliashberg equation [100] of the  $j = 3/2$  electrons has recently been discussed in Refs. [12, 13]. They describe the various pairing channels of Luttinger semimetals and the corresponding coupling strength due to polar optical phonons [12]. However, the electronic polarization is only accounted for approximatively and in the present section we consider how it can be responsible for pseudo-spin-singlet superconductivity. Here, the pseudo-spin refers to the two Kramer partners within a band. We consider that pairing occurs through the screened Coulomb potential

$$V(i\Omega, \mathbf{q}) = V_0(q)/\epsilon_{\text{RPA}}(i\Omega, \mathbf{q}), \quad (5.3.4)$$

where  $\epsilon_{\text{RPA}}(i\Omega, \mathbf{q})$  is the dielectric permittivity in the random phase approximation. This expression has been computed at zero temperature in Refs. [15–18] but it should not strongly differ from that at the critical temperature,  $T_c$ , since  $T_c \ll E_F$ , as we shall see. In a Luttinger semimetal, screening at small wavevectors is stronger than for a single quadratic band [17] which leads to a smaller plasma frequency and a reduced renormalization of the quasiparticle properties.

We rewrite the Hamiltonian (5.3.3) in terms of fermionic operators associated with the eigenstates of  $\hat{H}_0$ ,  $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma\lambda} = \sum_s \langle \mathbf{k}, \sigma, \lambda | \psi_{\mathbf{k}s} \rangle \hat{\psi}_{\mathbf{k}s}$ , where  $|\psi_{\mathbf{k}s}\rangle$  are the states in the original basis. We consider the normal and anomalous Green's functions

$$G_{\sigma\lambda}(i\omega_n, \mathbf{k}) = - \int_0^{1/T} d\tau \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma\lambda}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma\lambda}^\dagger(0) \rangle e^{i\omega_n \tau}, \quad (5.3.5)$$

$$F_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k}) = - \int_0^{1/T} d\tau \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma+}(\tau) \hat{c}_{-\mathbf{k}\sigma-}(0) \rangle e^{i\omega_n \tau}. \quad (5.3.6)$$

Here we denote the fermionic Matsubara frequencies  $\omega_n = (2n + 1)\pi T$  with  $T$  the temperature and  $n$  an integer, the ordering operator in imaginary time  $\hat{T}_\tau$ , the thermal average  $\langle \dots \rangle = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}} \dots) / \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}})$  with  $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma\lambda}(\tau) = e^{\tau \hat{H}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma\lambda} e^{-\tau \hat{H}}$ . In Appendix 5.3.7 we derive the equations of motion of the normal and anomalous Green's function.

The self-energy  $\Sigma_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k})$  of a quadratic band touching Luttinger semimetal in the normal state was numerically obtained in Ref. [17]. These expressions are independent of  $\lambda$  and we can thus omit the index  $\lambda$  for the normal Green's function (see Appendix 5.3.7.1). The Green's functions are  $G_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k}) = [G_\sigma^{(0)}(i\omega_n, \mathbf{k})^{-1} - \Sigma_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k})]^{-1}$  where the bare Green's functions are  $G_\sigma^{(0)}(i\omega_n, \mathbf{k}) = (-i\omega_n + \xi_\sigma(\mathbf{k}))^{-1}$ . The time-reversal symmetry allows the decomposition of the self-energy over two functions,  $\chi_\sigma$  and  $Z_\sigma$ , that are real and even in  $\omega_n$

$$\Sigma_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k}) = \chi_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k}) + i\omega_n(1 - Z_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k})). \quad (5.3.7)$$

Also, because of rotational symmetry, the dependence of the self-energy on wavevectors is only through  $k = |\mathbf{k}|$ . In Fig. 5.1(b,c) we illustrate the typical behaviour of  $\chi_\pm$  and  $Z_\pm$ . This behaviour of the self-energy is qualitatively the same for all values of  $r_s$ . The value of  $Z_\sigma^{-1}(i\omega_n, k)$  is the quasiparticle weight and is peaked at the Fermi surface, at  $(\sigma, i\omega_n, k) = (-, \pi T, k_F)$ . It decreases to unity away from the Fermi surface, as seen in Fig. 5.1(c).

The two anomalous Green's functions  $F_\pm(i\omega_n, \mathbf{k})$  describe two singlet Cooper pairs, one for each subband. The critical temperature of a superconductor is often determined with the linearized Eliashberg equation in terms of the gap functions [2, 6, 82, 87]

$$\phi_\pm(i\omega_n, \mathbf{k}) \equiv G_\pm^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})G_\pm^{-1}(-i\omega_n, \mathbf{k})F_\pm(i\omega_n, \mathbf{k}), \quad (5.3.8)$$

that in the present situation can be decomposed over spherical harmonics  $\phi_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k}) = \sum_{\ell m} \phi_{\ell\sigma}(i\omega_n, k)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  as in Refs. [2, 6]. In the present work, we instead consider this self-consistent equation in terms of the barred gap function  $\bar{\phi}_{\ell\pm}$

$$\bar{\phi}_{\ell\pm}(i\omega_n, k) \equiv kF_{\ell\pm}(i\omega_n, k), \quad (5.3.9)$$

such that the linearized Eliashberg equation becomes a *symmetric* eigenvalue equation of the form  $\rho\bar{\phi}_\ell = \bar{S}_\ell\bar{\phi}_\ell$  (see Appendix 5.3.7) :

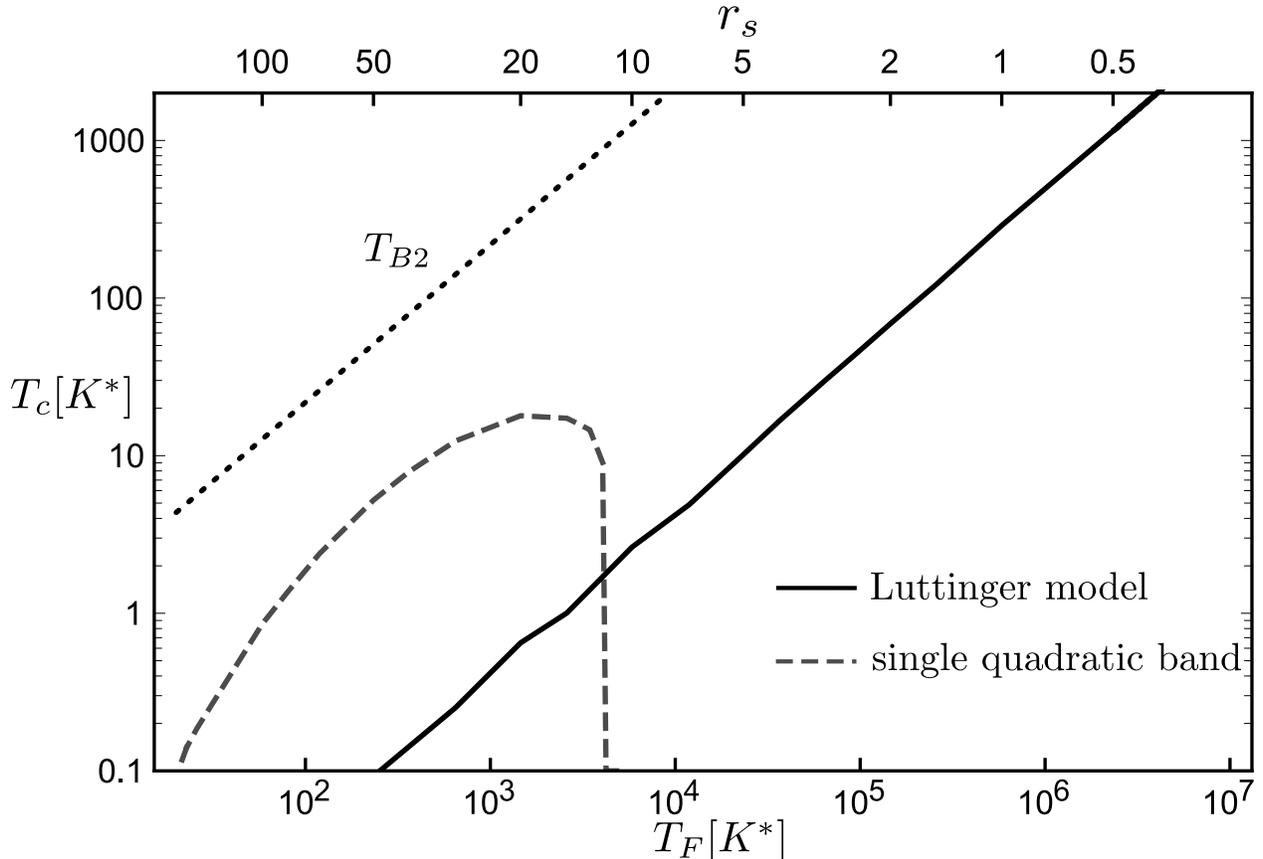
$$\begin{aligned} \rho\bar{\phi}_{\ell\sigma_1}(i\omega_{n_1}, k_1) = & - \sum_{\omega_{n_2}\sigma_2} \int dk_2 \{ I_{\ell\sigma_1\sigma_2}(i\omega_{n_1}, k_1; i\omega_{n_2}, k_2) \\ & + \delta(k_1 - k_2)\delta_{n_1n_2}\delta_{\sigma_1\sigma_2}T^{-1}K_{\sigma_2}(i\omega_{n_2}, k_2) \} \bar{\phi}_{\ell\sigma_2}(i\omega_{n_2}, k_2), \end{aligned} \quad (5.3.10)$$

where the largest eigenvalue  $\rho_{\max}(T)$  vanishes at the critical temperature  $T_c$ , *i.e.*  $\rho_{\max}(T_c) = 0$ .

In this work we only study the *s*-wave ( $\ell = 0$ ) pairing channel, even in Matsubara frequencies. The electron pairing interaction in Eq. (5.3.10) then becomes

$$I_{0\sigma_1\sigma_2} = \int_{|k_1-k_2|}^{k_1+k_2} dq \frac{qV_0(q)N_0}{\epsilon(i(\omega_{n_1} - \omega_{n_2}), q)} \times \frac{1}{4} \left\{ 2 + \sigma_1\sigma_2 \left[ 3 \left( \frac{k_1^2 + k_2^2 - q^2}{2k_1k_2} \right)^2 - 1 \right] \right\}, \quad (5.3.11)$$

where  $N_0 = 1/(4\pi^2)$  is the dimensionless density of states per band at the Fermi surface. The term in curly braces arises from the eigenspinor overlap in Eq. (5.3.2). In Eq. (5.3.10),



**Fig. 5.2.** Critical temperature,  $T_c$ , in units of  $K^* = m/(m_e \epsilon^{*2})K$ , as a function of the Fermi temperature and the Wigner-Seitz radius, for the Luttinger semimetal (plain) and for the single quadratic band [2] (gray, dashed). As a reference, we show the Bose-Einstein condensation temperature  $T_{B2}$  for free bosons with effective mass  $2m$  and density  $n/2$ .

the pairing potential competes with the kinetic contribution

$$K_\sigma = (\omega_n Z_\sigma(i\omega_n, k))^2 + (\xi_\sigma(k) + \chi_\sigma(i\omega_n, k))^2. \quad (5.3.12)$$

This expression contains the renormalized single-particle Green's function, which we illustrate in Fig. 5.1(b,c). This depairing contribution is diagonal in Eq. (5.3.10), it is also positive and has a minimum at the Fermi surface.

The linear Eliashberg equation in Eq. (5.3.10) is symmetric for the canonical scalar product on  $\sigma = \pm, i\omega_n$  and  $k$ , which is useful to reduce the number of numerical operations to solve it. It also allows the use of variational properties of symmetric equations. For example, for any test function  $\phi^t$ , one has  $\rho_{\max}(T) > \rho^t(T) = \phi^t \cdot \hat{S}\phi^t / (\phi^t \cdot \phi^t)$ . The numerical determination of the critical temperature  $T_c^t$  is thus bounded from above by its exact value,  $T_c > T_c^t$ . A similar bound is discussed in the context of phonon-mediated superconductivity in Ref. [149]. Another use of Eq. (5.3.10) is in the determination of the sensitivity of the critical temperature to changes in the dielectric permittivity,  $\epsilon(i\Omega_n, q)$ , that is the functional

derivative  $\delta T_c / \delta \epsilon(i\Omega_n, q)$ , through the Hellmann-Feynman theorem. A similar calculation is performed in Ref. [148] to obtain the sensitivity of the critical temperature to the density of states of phonons. We discuss this last point in Sec. 5.3.4.

5.3.3.3. Numerical solution. We solve the symmetric linear Eliashberg equation (5.3.10) numerically by decomposing  $\bar{\phi}$  on its components  $\Delta_{\pm, sd}$  on a grid  $\{\nu_s\}_{s \in [1, N_1]}$  of imaginary frequencies and  $\{k_d\}_{d \in [1, N_2]}$  of wavevectors

$$\bar{\phi}_{\pm}(i\omega_n, k) = \sum_{\substack{s \in [1, N_1] \\ d \in [1, N_2]}} \Delta_{\pm, sd} \Pi_s^{(1)}(\omega_n) \Pi_d^{(2)}(k). \quad (5.3.13)$$

In this decomposition we use the normalized rectangular functions  $\Pi_{s < N_1}^{(1)}(\omega_n)$  and  $\Pi_{d < N_2}^{(2)}(k)$  that are respectively constant in the intervals  $\omega_n \in [\nu_s, \nu_{s+1}]$  and  $k \in [k_d, k_{d+1}]$ , and zero otherwise. The asymptotic behaviour of the linear Eliashberg equation enforces that for  $\omega_n \gg 1$ ,  $\bar{\phi}_{\ell}(i\omega_n, k) \sim 1/\omega_n^2$  and that for  $k \gg 1$ ,  $\bar{\phi}_{\ell}(i\omega_n, k) \sim 1/k^5$  [151]. We thus complete the grid for  $\omega_n \geq \omega_{N_1}$  and for  $k \geq k_{N_2}$  with the normalized asymptotic functions  $\Pi_{s=N_1}^{(1)}(\omega_n) = \sqrt{6\pi T \omega_{N_1}^3} / \omega_n^2$  and  $\Pi_{d=N_2}^{(2)}(k) = \sqrt{9k_{N_2}^9} / k^5$ . The grid in frequency and in wavevectors is refined to converge to a stable solution (see Appendix 5.3.7.2).

With this decomposition, Eq. (5.3.10) becomes the matrix eigenvalue equation

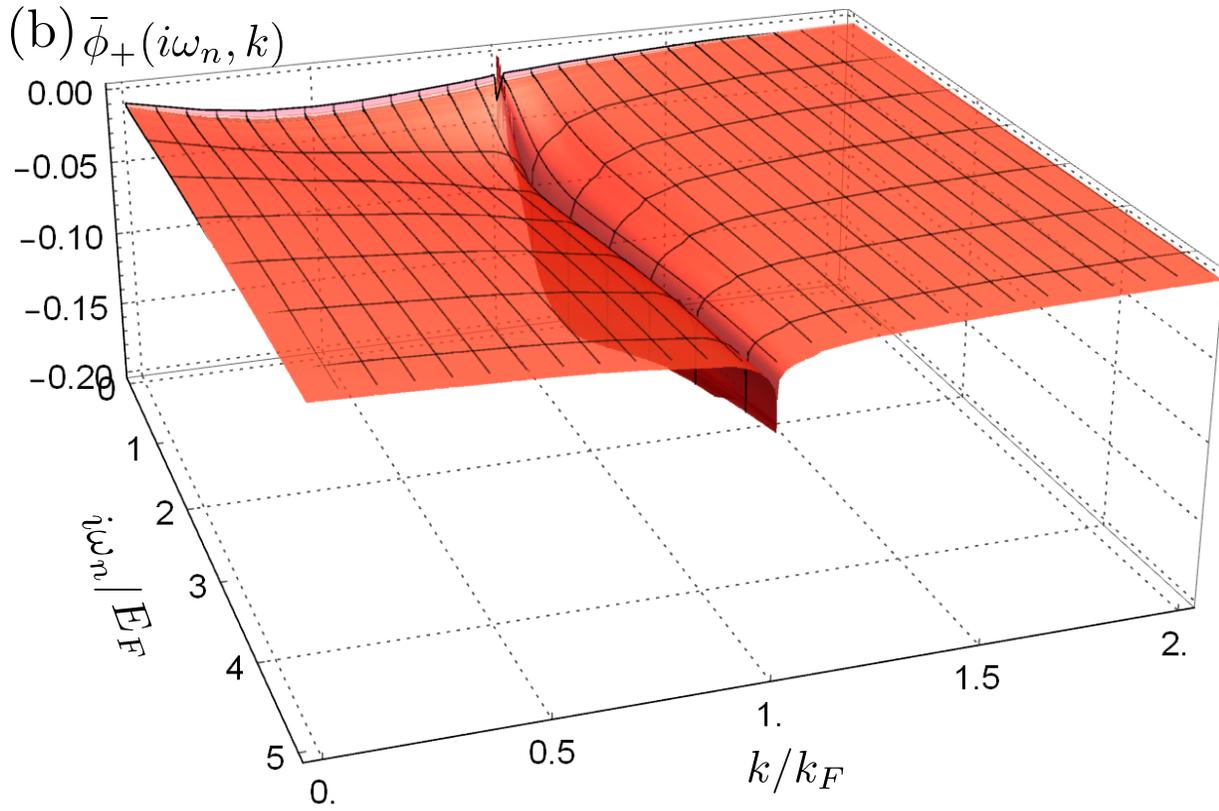
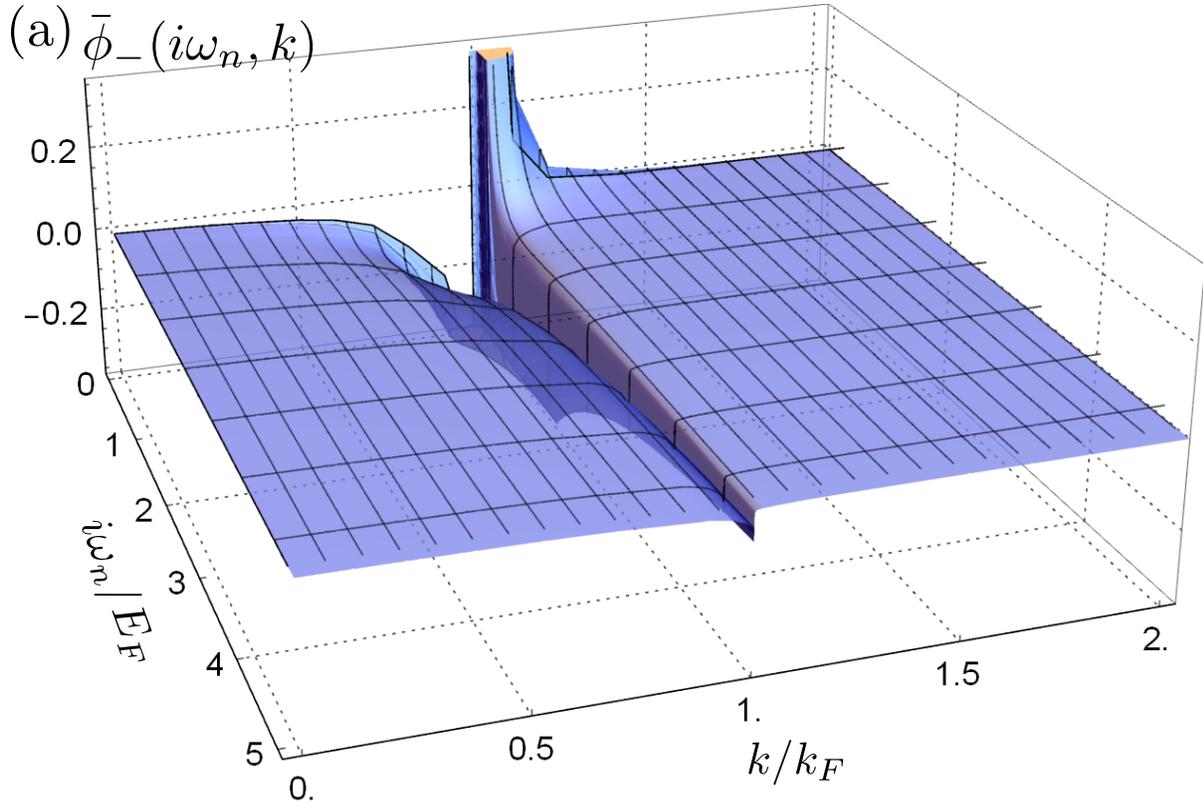
$$\rho \Delta_{\sigma_1 s_1 d_1} = \sum_{\sigma_2 = \pm} \sum_{s_2=1}^{N_1} \sum_{d_2=1}^{N_2} S_{\sigma_1 s_1 d_1, \sigma_2 s_2 d_2} \Delta_{\sigma_2 s_2 d_2}, \quad (5.3.14)$$

where the matrix components are

$$S_{\sigma_1 s_1 d_1, \sigma_2 s_2 d_2} = \frac{-1}{\sqrt{N_{s_1}(T) N_{s_2}(T)}} \sum_{\substack{\sigma_2 \nu_{s_1} \leq \omega_{n_1} < \nu_{s_1+1} \\ \nu_{s_2} \leq \omega_{n_2} < \nu_{s_2+1}}} \int_{k_{d_1}}^{k_{d_1+1}} \frac{dk_1}{\Delta k_{d_1}} \int_{k_{d_2}}^{k_{d_2+1}} \frac{dk_2}{\Delta k_{d_2}} (I_{0\sigma_1\sigma_2} - \delta_{k_1 k_2} \delta_{n_1 n_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} T^{-1} K_{\sigma_2}), \quad (5.3.15)$$

where the function  $N_s(T)$  counts the number of Matsubara frequencies in the interval  $[\nu_s, \nu_{s+1}]$ . The discrete summations over Matsubara frequencies, for  $\omega_{n_1}, \omega_{n_2} \leq \omega_{N_1}$ , are obtained with a linear interpolation of  $I_0$  and  $K$  over the grid of frequencies  $\{\nu_s\}_{s \in [1, N_1]}$ . We convert this summation to an integral for  $\omega_n \geq \omega_{N_1}$ ,  $\sum_{\omega_n} \approx \frac{1}{2\pi T} \int_{\omega_{N_1}}^{\infty} d\omega$ . Note that a decomposition similar to (5.3.15) is performed in Ref. [2] but the normalization factors do not appear explicitly. There, a sum and an integral are approximated with a Riemann summation that absorbs the normalization factors without affecting the eigenvalues.

We compute the critical temperature  $T_c$  by solving the equation  $\rho(T = T_c) = 0$  for different values of the Wigner-Seitz radius. We report our results in Fig. 5.2 with temperatures given in units of  $K^* = (m/m_e) / \epsilon^* K$ . We also show the results for a single quadratic band [2], which we have reproduced with the aforementioned methodology. In contrast to a single quadratic band, the superconductivity of a Luttinger semimetal persists in the regime



**Fig. 5.3.** Gap functions  $\bar{\phi}_\pm(i\omega_n, k)$  (5.3.9) on the (a) lower and (b) upper band for  $\ell = 0$  ( $s$ -wave) and  $r_s = 5$ , they are normalized such that  $\bar{\phi}_-(i\pi T_c, k_F) = 1/(\pi T_c)^2$ . The peak at  $k = k_F$  indicates that pairing mostly occurs at the Fermi surface.

of small Wigner-Seitz radii. We find a solution down to  $r_s = 0.01$  and the critical temperature drops below this limit. We observe that the critical temperature scales linearly, with  $T_c/T_F \approx 4.4(4) \times 10^{-4}$ . This can be compared to the ratio found for a single quadratic band at large  $r_s$  where  $T_c/T_F \approx 0.02$  [2].

5.3.3.4. Structure of the gap function. In Figs. 5.3(a,b) we show the components  $\bar{\phi}_\pm$  of the gap function (5.3.9). The gap function has a larger weight close to the Fermi surface, for  $\sigma = -$ ,  $k = k_F$  and small  $\omega_n$ . At  $k = k_F$  the gap function  $\bar{\phi}_-$  changes sign as a consequence of the repulsive nature of the Coulomb potential and this change of sign is also present for  $\phi_-$  in (5.3.8). We note that, at fixed  $k$ , the gap function  $\bar{\phi}_-$  does not change sign as a function of the imaginary frequency in contrast with the gap function in a single quadratic band [2, 87]. Interestingly, the contribution of the gap function on the upper band,  $\bar{\phi}_+$ , is non-negligible away from  $(\omega_n, k) = (0, k_F)$  and the sign of  $\bar{\phi}_+$  is opposite to  $\bar{\phi}_-$  for  $k > k_F$ . The opposite sign of the gap function on the two bands reminds observations of opposite  $s$ -wave order parameters on electron and hole bands in FeSe [152, 153]. In Fig. 5.5 in Appendix 5.3.7.2 we plot the ratio of  $\bar{\phi}_+$  and  $\bar{\phi}_-$  to further show the importance of  $\bar{\phi}_+$ . In absence of the contribution on the upper band, *i.e.* when setting  $\bar{\phi}_+ = 0$ , we do not find a critical temperature above the lowest temperature,  $T/T_F \approx 10^{-5}$ , achievable with our numerical accuracy (see Appendix 5.3.7.2). This indicates the importance of interband coupling due to the spin-orbit interaction in the present mechanism of superconductivity.

5.3.3.5. Superconductivity from polar phonon screening. The superconductivity of Luttinger semimetals mediated by the Coulomb repulsion was first discussed in Ref. [12] in the context of the superconductivity of YPtBi. There, corrections to the electronic self-energy are neglected and the Coulomb repulsion is mediated by the dynamic polarization of optical phonon modes :

$$\epsilon(i\Omega, q) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{1 + \Omega^2/\omega_T^2} + \frac{q_{TF}^2}{q^2}. \quad (5.3.16)$$

This dielectric function accounts for the screening by polar phonon modes of frequency  $\omega_T$  [154], and the electronic screening is described by the Thomas-Fermi wavevector  $q_{TF}^2 = 2\epsilon_\infty\alpha r_s/\pi$  [58]. The authors in [12] compute the critical temperature with a pseudo-potential approach [151, 155] where the characteristic frequency  $\omega_c$  equals the phonon frequency  $\omega_T$ . In this kind of approximation, emphasis is put on the retardation of the pairing potential, that is on its frequency dependence below and above a characteristic frequency  $\omega_c$ . Using their approximate expression for  $T_c$  and sensible values for YPtBi [156] we evaluate  $T_c < 0.01$  K for  $s$ -wave pairing in YPtBi, which corresponds to  $T_c/T_F < 4 \times 10^{-6}$ . This is consistent with our full numerical solution of the Eliashberg equation with the dielectric function (5.3.16), with and without the self-energy corrections. Indeed, we do not find any solution above the lowest

temperature achievable with our numerical accuracy, which corresponds to  $T/T_F \approx 10^{-5}$  (see Appendix 5.3.7.2).

The previous calculations show that the superconductivity from the Coulomb repulsion in Luttinger semimetals strongly relies on the interband coupling and on the screening mechanism. At large  $r_s$ , the critical temperature is much smaller than for a single quadratic band but extends to small values of the Wigner-Seitz radius, down to  $r_s \approx 0.01$ , due to the interband coupling. Even so, we compute a critical temperature about two orders of magnitude larger than with optical phonon modes [12]. In the following we make use of the symmetry in Eq. (5.3.10) and explore how each component  $(i\Omega_n, \mathbf{q})$  of  $\epsilon_{\text{RPA}}(i\Omega_n, \mathbf{q})$  in Eq. (5.3.4) affects the critical temperature.

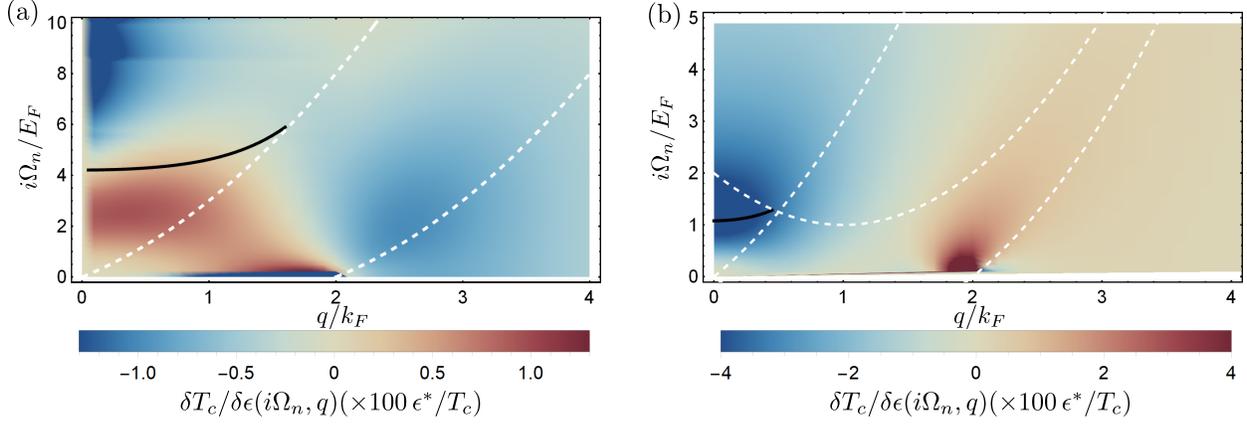
### 5.3.4. Sensitivity of the critical temperature to screening

The observed differences between the critical temperature of a single quadratic band and of the quadratic band touching Luttinger semimetal come from the wavefunction overlap and the effect of interband coupling on the screening function  $\epsilon_{\text{RPA}}(i\Omega, \mathbf{q})$  (5.3.4). They both reduce the pairing potential, leading to a smaller critical temperature compared to a single quadratic band in the regime of large  $r_s$ . However, the larger screening of the Coulomb potential also reduces the importance of the self-energy and allows for the observation of superconductivity at smaller values of the Wigner-Seitz radius. In order to further discuss the underlying mechanisms of superconductivity, one can explore the sensitivity of the critical temperature to changes in the dielectric permittivity.

As illustrated in the previous section, the critical temperature of a superconductor relies on an integral equation (5.3.10) over all the components of the dielectric permittivity  $\epsilon(i\Omega_n, q)$ . If one changes  $\epsilon(i\Omega_n, q)$  by  $\delta\epsilon(i\Omega_n, q)$  then the change in the critical temperature  $\Delta T_c$  is

$$\Delta T_c = 2\pi T \sum_{\Omega_n} \int dq \frac{\delta T_c}{\delta\epsilon(i\Omega_n, q)} \delta\epsilon(i\Omega_n, q). \quad (5.3.17)$$

The functional derivative  $\delta T_c / \delta\epsilon(i\Omega_n, q)$  measures the sensitivity of the critical temperature to screening, and it is large for components  $(i\Omega_n, q)$  responsible for the superconducting condensation. A similar quantity is defined in the context of the electron-phonon mechanism of superconductivity [148] to discuss the optimal phonon spectrum for the largest critical temperature [149, 157]. Note that in Eq. (5.3.17) we consider the sensitivity of the critical temperature to the dielectric permittivity for imaginary frequencies. As such, its physical interpretation is not straightforward but it is related to the behaviour at real frequencies by the continuation  $i\Omega \rightarrow \omega + i0^+$  and thus shows similar characteristic behaviour. We account for this aspect in our discussion.



**Fig. 5.4.** Functional derivative  $\delta T_c/\delta\epsilon(i\Omega_n, q)$  of the critical temperature over the dielectric permittivity at  $r_s = 20$  in percentage of  $T_c/\epsilon^*$  (a) for a single quadratic band and (b) for the quadratic band touching Luttinger model. The black line is the dispersion relation of plasmons and the white dashed lines are the branches of the particle-hole excitation diagram. These lines are a guide to the eye, since they are computed for real frequencies. These figures indicate that the critical temperature is mostly sensitive to the long-range screening from plasma oscillations, and from the static scattering at  $2k_F$ .

Since  $\rho(T_c) = 0$ , the functional derivative  $\delta T_c/\delta\epsilon(i\Omega_n, q)$  satisfies the relation

$$\frac{\delta T_c}{\delta\epsilon(i\Omega_n, q)} = - \left. \frac{\delta\rho}{\delta\epsilon(i\Omega_n, q)} \right|_{T=T_c} \bigg/ \left. \frac{\partial\rho}{\partial T} \right|_{T=T_c}, \quad (5.3.18)$$

which simplifies its numerical evaluation. Here  $\rho$  is the maximal eigenvalue of the Eliashberg equation (5.3.14) from which  $\partial\rho/\partial T|_{T=T_c}$  can be numerically approximated. Also, because Eq. (5.3.10) is symmetric, we use the Hellmann-Feynman theorem to write

$$\frac{\delta\rho}{\delta\epsilon(i\Omega_n, q)} = \frac{\bar{\phi} \cdot (\delta S/\delta\epsilon(i\Omega_n, q)) \bar{\phi}}{\bar{\phi} \cdot \bar{\phi}}, \quad (5.3.19)$$

where  $\bar{\phi}$  is the eigenvector corresponding to  $\rho_{\max}(T = T_c) = 0$ . For a normalized eigenvector the expression is

$$\begin{aligned} \left. \frac{\delta\rho}{\delta\epsilon(i\Omega_p, q)} \right|_{T_c} &= \frac{V_0(q)N_0}{\epsilon^2(i\Omega_p, q)} \sum_{\substack{\omega_{n_1}\omega_{n_2}>0 \\ \sigma_1\sigma_2}} \int_0^\infty dk_1 dk_2 \bar{\phi}_{\sigma_1}(i\omega_{n_1}, k_1) \bar{\phi}_{\sigma_2}(i\omega_{n_2}, k_2) \\ &\times \left\{ \frac{1}{4} \left( 2 + \sigma_1\sigma_2 \left[ 3 \left( \frac{k_1^2 + k_2^2 - q^2}{2k_1k_2} \right)^2 - 1 \right] \right) q\Theta(k_1 + k_2 - q)\Theta(q - |k_1 - k_2|)\delta_{p, n_1 - n_2} \right. \\ &- \delta(k_1 - k_2)\delta_{\sigma_1 n_1, \sigma_2 n_2} 2q^2 \left( \omega_{n_2} Z_{\sigma_2}(i\omega_{n_2}, k_2) \bar{G}_{\sigma_2}^{(2)}(i(\omega_{n_2} - \Omega_p), k_2, q) \right. \\ &\left. \left. - (\xi_{\sigma_2}(k_2) + \chi_{\sigma_2}(i\omega_{n_2}, k_2)) \bar{G}_{\sigma_2}^{(1)}(i(\omega_{n_2} - \Omega_p), k_2, q) \right) \right\} + (i\Omega_p \rightarrow -i\Omega_p), \end{aligned} \quad (5.3.20)$$

where  $\bar{G}_{\pm}^{(1)}$  and  $\bar{G}_{\pm}^{(2)}$  are coupling factors computed in Appendix 5.3.9 and  $\Theta(x)$  is the Heaviside step function. The last term in Eq. (5.3.20) appears because we consider a gap function even in frequency ( $\ell = 0$ ) and because  $\epsilon(-i\Omega_p, q) = \epsilon(i\Omega_p, q)$  [158]. This functional derivative includes the effect of the dielectric permittivity on both the pairing potential and the single-particle self-energy of a Luttinger semimetal. A similar expression is obtained for a single quadratic band by removing the wavefunction overlap. We compute the derivative (5.3.20) numerically with a procedure similar to that presented in Sec. 5.3.3.3.

In Fig. 5.4 we show the functional derivative  $\delta T_c / \delta \epsilon(i\Omega_n, q)$  in percentage of  $T_c / \epsilon^*$  for (a) the single quadratic band and for (b) the quadratic band touching Luttinger model. The screening mechanisms that act positively (negatively) on the critical temperature are in red (blue). For example, the change of sign of  $\delta T_c / \delta \epsilon(i\Omega_n, q)$  from positive below  $q = 2k_F$  to negative above it, indicates that increasing the discontinuity in the static dielectric function at  $2k_F$  increases the critical temperature. This is a signature of the Kohn-Luttinger mechanism of superconductivity [6] which relies on the discontinuity of screening at  $2k_F$ . This mechanism happens for the two bandstructures under study but it becomes negligible for larger values of  $r_s$  for a single quadratic band, where the plasmon mechanism of superconductivity dominates [2]. The signature of the plasmon mechanism appears in Fig. 5.4(a,b) for small values of  $q$  and at finite Matsubara frequencies. For a single quadratic band, in Fig. 5.4(a), the sign of  $\delta T_c / \delta \epsilon(i\Omega_n, q)$  is consistent with an increase in the critical temperature from an increase in the plasma frequency  $\omega_p$  in the optical permittivity  $\epsilon_0(i\Omega_n, q = 0) = 1 + \omega_p^2 / \Omega_n^2$  [58]. On the other side, in a Luttinger semimetal, in Fig. 5.4(b), the sign of  $\delta T_c / \delta \epsilon(i\Omega_n, q)$  is opposite, with a strong negative contribution above the plasma frequency. We associate this behaviour to the interband coupling that strongly increases the dielectric permittivity at the onset of interband transitions, at  $\omega = 2E_F$ , and is responsible for a decrease in the plasma frequency of Luttinger semimetals [17, 18]. Thus, an attenuation of interband transitions would increase the plasma frequency, while it would also increase the critical temperature. This increase in the plasma frequency can, for example, be obtained for a lighter upper band when  $\alpha_2 > 0$  in Eq. (5.3.1) [17, 18]. Finally, we observe in Fig. 5.4(a) that the critical temperature of a single quadratic band strongly decreases for an increase in the short-range (large  $q$ ) static screening. This effect is suppressed in a Luttinger semimetal, in Fig. 5.4(b), because of the weakening in the static repulsion due to the spin-orbit form-factor in the averaged Coulomb potential in Eq. (5.3.11).

The superconductivity mediated by the screened Coulomb repulsion is thus mostly sensitive to plasmons and to the discontinuity of the dielectric function at  $2k_F$ . The plasmon mechanism occurs for larger values of  $r_s$  and because the plasma frequency of a single quadratic band is larger than a Luttinger semimetal [17], it also has a larger critical temperature for larger Wigner-Seitz radii. In Luttinger semimetals, the spin-orbit correction (5.3.2) plays a non-negligible role because it is responsible for the interband coupling that competes with

the plasmon mechanism while it also weakens the short-range repulsion. Our observations for the superconductivity of Luttinger semimetals could translate to Dirac bandstructures because of the strong interband coupling [159] but which is neglected in Ref. [82].

### 5.3.5. Discussion

We can analyse the applicability of our description to the superconductivity of some candidate Luttinger semimetals such as the bismuth-based half-Heuslers YPtBi, YPdBi, LuPtBi and LuPdBi [24–28]. The critical temperature of these materials is in the range  $T_c = 0.7 - 1.5$  K for a carrier density  $n \approx 10^{19} \text{cm}^{-3}$ , a band mass  $m/m_e \approx 0.1 - 0.3$  and a background permittivity that can be roughly estimated to  $\epsilon^* \approx 20$  [83–86]. This corresponds to  $r_s \approx 0.5 - 1$  and  $T_c/T_F \approx 2 - 8 \times 10^{-4}$  which is within the order of magnitude of our calculations, where  $T_c/T_F \approx 4.4(4) \times 10^{-4}$ . Thus, within the present mechanism of superconductivity, we expect that the gap function of these materials is a singlet  $s$ -wave order parameter. This stands in contrast with the recent proposition that YPtBi is a line-node superconductor from indirect evidences like the behavior of its magnetic susceptibility with temperature [92, 160]. However, this interpretation of the measurements is arguable due to the small value of the lower critical field  $B_{c1}$  [161]. Moreover, YPtBi shows deviations of its upper critical field  $B_{c2}(T)$  with temperature [84, 162, 163] which are not explained with the assumption of nodal superconductivity [84]. These discrepancies may come from the approximation of a contact pairing potential used to compute  $B_{c2}(T)$  [162–164] which is questionable for the Coulomb potential and call for further theoretical investigation.

There is also evidence that the pyrochlore iridate  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  [34, 165] is a Luttinger semimetal with a carrier density  $n \approx 10^{18} \text{cm}^{-3}$ , a band mass  $m/m_e = 6.3$  and a background dielectric constant  $\epsilon^* \approx 10$ , such that  $r_s \approx 10 - 15$  and  $T_F \approx 8$  meV. This material was studied down to 30 mK [166] without any report of a superconducting behavior. Our model suggests that this is due to the very small Fermi temperature of this material. Using our result,  $T_c/T_F \approx 4.4 \times 10^{-4}$ , we propose that it would be superconducting below  $T_c \approx 40$  mK. The critical temperature can be lower because superconductivity would presumably compete against magnetic interactions in  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  [166].

These comparisons to experiments should however be treated with caution. First, one can question the validity of the Luttinger model for small and for large doping. Indeed, for a smaller carrier density (large  $r_s$ ) the Coulomb interaction may lead to a non-Fermi liquid behaviour [143–145] and to an interaction-driven topological insulator [167]. However, this regime with small carrier density appears difficult to observe experimentally, even in Luttinger semimetals with small Fermi temperatures such as the pyrochlore iridate  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  [34].

At large doping (small  $r_s$ ), the validity of the  $k \cdot P$  Hamiltonian (5.3.1) is questionable because other bands might be involved. And thus, even if we find  $T_c/T_F \approx 4.4 \times 10^{-4}$  down to  $r_s \approx 0.01$ , we expect strong deviations from this relation for large values of  $T_F$ .

A second reason for caution is that in the present work we only partially consider the coupling of electrons to phonons [4, 168, 169]. The competition of the electron-phonon coupling and the electron-electron repulsion is a long-standing issue where the Coulomb potential is usually evaluated as a perturbation [170, 171]. In YPtBi, superconductivity due to the electron-phonon coupling [80] and the polar-phonon mechanism [12] would happen for a critical temperature  $T_c < 10^{-3}$  K which is much smaller than in the present theory and in the experiments, where  $T_c \approx 0.7 - 0.9$  K [83–86]. This suggests that the electron-phonon coupling only affects the critical temperature perturbatively in YPtBi and we thus expect no isotopic effect for this material. However, this observation cannot be generalized to all Luttinger semimetals and further work is needed to understand the situation where the electron-phonon coupling and the Coulomb repulsion compete [172, 173].

Another limitation of the present description is that we neglect local-field corrections to the Coulomb potential, as described by vertex corrections [174–177]. Here, the amplitude of such terms cannot be simply related to the ratio of some characteristic frequency to the Fermi energy, as in Migdal’s theorem [178]. This was discussed in the context of superconductivity from Coulomb repulsion in a single quadratic band in [88, 179–182], where vertex corrections renormalize the critical temperatures for intermediate values of the Wigner-Seitz radius [182]. Similar behaviour may also happen for Luttinger semimetals but an explicit expression of the vertex corrections is currently missing.

### 5.3.6. Conclusion

We have investigated the superconductivity of the three-dimensional quadratic band touching Luttinger semimetal from the screened Coulomb repulsion. We have derived a symmetric form of the gap equation at the critical temperature and solved it numerically. The critical temperature is linear with the Fermi temperature,  $T_c/T_F \approx 4.4(4) \times 10^{-4}$ , and extends to small values of the Wigner-Seitz radius, which is not the case for a single quadratic band. We used a variational principle of the gap equation to compute the sensitivity of the critical temperature to changes in the dielectric function  $\epsilon(i\Omega, q)$ . It shows the importance of plasmons and the discontinuity of the dielectric function at  $2k_F$  in this mechanism of superconductivity, for both the single quadratic band and the quadratic band touching. The critical temperature we find is in the order of magnitude of some superconducting Luttinger semimetals, like YPtBi. Finally, we use our results to propose that the pyrochlore iridate  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  may be superconducting below  $T_c \approx 40$  mK.

There are multiple extensions to this work, such as describing the influence of the electron-phonon pairing on the critical temperature, determining the effect of asymmetric electron and hole masses [18] or introducing vertex corrections in the dielectric function. One could also study how the  $s$ -wave gap function competes with the other, anisotropic, superconducting order parameters proposed for Luttinger semimetals [12, 13, 25]. In the context of the mechanism considered in this work, the structure of the Eliashberg equation for superconducting order parameters beyond  $s$ -wave was recently discussed [183]. It was found that spin-orbit coupling could lead to an enhancement in the  $\ell = 1$  channel for instance. A numerical calculation will be needed to identify the preferred channel. Finally, because the magnetic response of superconductors is usually computed by assuming a contact pairing potential [162–164], it is worth considering how accurately it applies to pairing from the Coulomb repulsion.

We would like to thank E. Dupuis, M. Comin and V. Kaladzhyan for fruitful discussions. This project is funded by a grant from Fondation Courtois, a Discovery Grant from NSERC, a Canada Research Chair, and a “Établissement de nouveaux chercheurs et de nouvelles chercheuses universitaires” grant from FRQNT. This research was enabled in part by support provided by Calcul Québec (www.calculquebec.ca) and Compute Canada (www.computeCanada.ca)

### 5.3.7. Appendix A: Eliashberg equation for singlet superconductivity

In this section we derive the Eliashberg equation due to the electron-electron repulsion with account of screening, self-energy corrections and for a pseudo-spin singlet pairing, *i.e.* with opposite Kramer partners within a band. Because of rotation symmetry, the Eliashberg equation can be decomposed on the spherical harmonics  $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$  and in main text we only discuss the situation where  $\ell = 0$  ( $s$ -wave channel).

The eigenstates  $|\sigma, \lambda, \mathbf{k}\rangle$  of the Hamiltonian  $\hat{H}_0$  (5.3.1) define the fermionic operators  $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma\lambda} = \sum_s \langle \sigma, \lambda, \mathbf{k} | \psi_{\mathbf{k}s} \rangle \hat{\psi}_{\mathbf{k}s}$ , where  $\sigma = \pm$  indicates the upper or lower subband,  $\lambda = \pm$  the Kramer partners within a subband and  $s = \{3/2, 1/2, -1/2, -3/2\}$  indicates the eigenvalues of  $\hat{J}_z$  for the  $j = 3/2$  fermions. In this basis, the normal-ordered Hamiltonian is

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mathbf{k}, \sigma\lambda} \xi_{\sigma}(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma\lambda}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma\lambda} \\ & + \frac{1}{2\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \sigma_1 \tau_1 \\ \sigma_3 \lambda_3}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_2 \sigma_2 \tau_2 \\ \sigma_4 \lambda_4}} V_0(q) \langle \sigma_3 \lambda_3 \mathbf{k}_1 + \mathbf{q} | \sigma_1 \lambda_1 \mathbf{k}_1 \rangle \langle \sigma_4 \lambda_4 \mathbf{k}_2 - \mathbf{q} | \sigma_2 \lambda_2 \mathbf{k}_2 \rangle \hat{c}_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} \sigma_3 \lambda_3}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} \sigma_4 \lambda_4}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}_2 \sigma_2 \lambda_2} \hat{c}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1 \lambda_1}. \end{aligned} \quad (5.3.21)$$

We consider the equations of motion of the Green's functions  $G_{\sigma\lambda}(\tau, \mathbf{p}) = \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma\lambda}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma\lambda}^\dagger(0) \rangle$ ,  $F_\sigma(\tau, \mathbf{p}) = \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma+}(\tau) \hat{c}_{-\mathbf{p}\sigma-}(0) \rangle$  and  $F_\sigma^*(\tau, \mathbf{p}) = \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{-\mathbf{p}\sigma-}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma+}^\dagger(0) \rangle$ , for singlet superconductivity

$$\left( \frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_\sigma(\mathbf{p}) \right) G_{\sigma\lambda}(\tau, \mathbf{p}) = \delta(\tau) - \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_0(q) \sum_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2\sigma'\lambda_1\lambda_2\lambda'} \langle \sigma\lambda\mathbf{p} | \sigma'\lambda'\mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \\ \times \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'\lambda'}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma\lambda}^\dagger(0) \rangle, \quad (5.3.22)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial \tau} + \xi_\sigma(\mathbf{p}) \right) F_\sigma(\tau, \mathbf{p}) = - \sum_{\mathbf{q} \neq 0} V_0(q) \sum_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2\sigma'\lambda_1\lambda_2\lambda'} \langle \sigma+, \mathbf{p} | \sigma'\lambda'\mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \\ \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'\lambda'}(\tau) \hat{c}_{-\mathbf{p}\sigma-}(0) \rangle. \quad (5.3.23)$$

The retardation effects are included by deriving the time evolution of  $\langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau) \hat{O} \rangle$  in the random phase approximation (RPA). This is similar to the retardation effects from the electron-phonon coupling [168]. The detailed calculation can be found in Appendix 5.3.8 and leads to

$$V_0(q) \sum_{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2\lambda_1\lambda_2} \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau) \hat{O} \rangle \quad (5.3.24) \\ = \int d\tau' V(\tau - \tau', \mathbf{q}) \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2 \\ \lambda_1\lambda_2}} \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \langle \hat{T}_{\tau'} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau') \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau') \hat{O} \rangle,$$

where  $V(\tau, \mathbf{q})$  is the screened Coulomb potential. After including this retardation effect in the four-operators Green's functions, we decompose them over the normal and anomalous Green's functions with Wick's decomposition. For example,

$$\sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2\sigma' \\ \lambda_1\lambda_2\lambda'}} \langle \sigma\lambda\mathbf{p} | \sigma'\lambda'\mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau') \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau') \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'\lambda'}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma\lambda}^\dagger(0) \rangle \\ = \left( \sum_{\sigma'\lambda'} |\langle \sigma\lambda\mathbf{p} | \sigma'\lambda'\mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle|^2 \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'\lambda'}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'\lambda'}^\dagger(\tau') \rangle \right) \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma\lambda}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma\lambda}^\dagger(0) \rangle \\ - \sum_{\sigma'\lambda'} \langle \sigma\lambda\mathbf{p} | \sigma'\lambda'\mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle \langle \sigma\bar{\lambda}, -\mathbf{p} | \sigma'\bar{\lambda}' - \mathbf{p} - \mathbf{q} \rangle \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{-\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma'\bar{\lambda}'}(\tau') \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'\lambda'}(\tau) \rangle \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma\lambda}^\dagger(0) \hat{c}_{-\mathbf{p}\sigma\bar{\lambda}}^\dagger(\tau') \rangle. \quad (5.3.25)$$

where  $\bar{\lambda} = -\lambda$ . The index  $\lambda = \pm$  describes Kramer partners so, because the system is time-reversal symmetric, one has  $\langle \sigma \lambda \mathbf{p} | \sigma' \lambda' \mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle \langle \sigma \bar{\lambda}, -\mathbf{p} | \sigma' \bar{\lambda}' - \mathbf{p} - \mathbf{q} \rangle = |\langle \sigma \lambda \mathbf{p} | \sigma' \lambda' \mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle|^2$  and

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2\sigma' \\ \lambda_1\lambda_2\lambda'}} \langle \sigma \lambda \mathbf{p} | \sigma' \lambda' \mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle \langle \sigma_1 \lambda_1 \mathbf{k} | \sigma_2 \lambda_2 \mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \left\langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau') \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau') \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'\lambda'}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma\lambda}^\dagger(0) \right\rangle \\ &= \left( \sum_{\sigma'\lambda'} |\langle \sigma \lambda \mathbf{p} | \sigma' \lambda' \mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle|^2 G_{\sigma'\lambda'}(\tau - \tau', \mathbf{p} + \mathbf{q}) \right) G_{\sigma\lambda}(\tau', \mathbf{p}) \\ & \quad - \sum_{\sigma'\lambda'} |\langle \sigma \lambda \mathbf{p} | \sigma' \lambda' \mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle|^2 F_{\sigma'}(\lambda'(\tau - \tau'), \lambda'(\mathbf{p} + \mathbf{q})) F_\sigma^*(\lambda\tau', \lambda\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (5.3.26)$$

The equations being time-reversal and inversion symmetric, one can consider different anomalous Green's function with even or odd parity in either time and wavevector

$$F_\sigma(\tau, \mathbf{p}) = (-1)^{\pi_T} F_\sigma(-\tau, \mathbf{p}) = (-1)^{\pi_T + \pi_I} F_\sigma(-\tau, -\mathbf{p}), \quad (5.3.27)$$

with  $\pi_T, \pi_I \in \{0, 1\}$ . Then the anomalous Green's functions in the last line of Eq. (5.3.26) are

$$F_{\sigma'}(\lambda'(\tau - \tau'), \lambda'(\mathbf{p} + \mathbf{q})) = \lambda'^{\pi_T + \pi_I} F_{\sigma'}(\tau - \tau', \mathbf{p} + \mathbf{q}) \quad (5.3.28)$$

and the summation identically vanishes if  $\pi_T + \pi_I$  is odd. A non-zero gap function must be either even or odd for *both* time and space, and in the following we only consider the situation of an even gap function (*i.e.*  $\pi_T = \pi_I = 0$ ).

We replace these Wick decompositions in the original equation which we also Fourier transform over Matsubara frequencies  $\omega_n = (2n + 1)\pi T$

$$G_{\sigma\lambda}(\tau_1 - \tau_2, \mathbf{p}) = T \sum_{\omega_n} G_{\sigma\lambda}(i\omega_n, \mathbf{p}) e^{-i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)}, \quad (5.3.29)$$

$$F_\sigma(\tau_1 - \tau_2, \mathbf{p}) = T \sum_{\omega_n} F_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) e^{-i\omega_n(\tau_1 - \tau_2)}. \quad (5.3.30)$$

This leads to the following set of equations

$$(-i\omega_n + \xi_\sigma(\mathbf{p})) G_{\sigma\lambda}(i\omega_n, \mathbf{p}) = 1 - \Sigma_{\sigma\lambda}(i\omega_n, \mathbf{p}) G_{\sigma\lambda}(i\omega_n, \mathbf{p}) - \Delta_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) F_\sigma^*(i\omega_n, \mathbf{p}), \quad (5.3.31)$$

$$(-i\omega_n + \xi_\sigma(\mathbf{p})) F_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) = -\Sigma_{\sigma+}(i\omega_n, \mathbf{p}) F_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) + \Delta_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) G_{\sigma-}(-i\omega_n, -\mathbf{p}), \quad (5.3.32)$$

$$(-i\omega_n - \xi_\sigma(-\mathbf{p})) F_\sigma^*(i\omega_n, \mathbf{p}) = \Sigma_{\sigma-}(-i\omega_n, -\mathbf{p}) F_\sigma^*(i\omega_n, \mathbf{p}) - \bar{\Delta}_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) G_{\sigma+}(i\omega_n, \mathbf{p}), \quad (5.3.33)$$

where we have introduced the normal and anomalous self-energies

$$\Sigma_{\sigma\lambda}(i\omega_n, \mathbf{p}) = -T \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \omega_m, \sigma'\lambda'} V(i(\omega_n - \omega_m), \mathbf{q}) |\langle \sigma \lambda \mathbf{p} | \sigma' \lambda' \mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle|^2 G_{\sigma'\lambda'}(i\omega_m, \mathbf{p} + \mathbf{q}), \quad (5.3.34)$$

$$\Delta_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) = -T \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \omega_m, \sigma'\lambda'} V(i(\omega_n - \omega_m), \mathbf{q}) |\langle \sigma \lambda \mathbf{p} | \sigma' \lambda' \mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle|^2 F_{\sigma'}(i\omega_m, \mathbf{p} + \mathbf{q}),$$

$$\bar{\Delta}_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) = -T \sum_{\mathbf{q} \neq 0, \omega_m, \sigma'\lambda'} V(i(\omega_n - \omega_m), \mathbf{q}) |\langle \sigma \lambda \mathbf{p} | \sigma' \lambda' \mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle|^2 F_{\sigma'}^*(i\omega_m, \mathbf{p} + \mathbf{q}),$$

with  $V(i\Omega_n, \mathbf{q}) = V_0(q)/\epsilon(i\Omega_n, \mathbf{q})$  the screened Coulomb potential.

In the following we write the expression for the normal and anomalous self-energy that we consider throughout our work. There, we study the phase transition from the normal to the superconducting phase, that is the temperature  $T = T_c$  beyond which the anomalous Green's function  $F_\sigma$  vanishes ( $F_\sigma = 0$ ).

5.3.7.1. Self-energy in the normal phase. In the normal state ( $F_\sigma = 0$ ) the normal Green's functions are

$$G_{\sigma\lambda}^{(N)}(i\omega_n, \mathbf{p}) = (-i\omega_n + \xi_\sigma(\mathbf{p}) + \Sigma_{\sigma\lambda}(i\omega_n, \mathbf{p}))^{-1}, \quad (5.3.35)$$

where the self-energies in the normal phase are

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma\lambda}^{(N)}(i\omega_n, \mathbf{p}) &= -\beta^{-1} \sum_{\Omega_m \sigma' \lambda' \mathbf{q}} \frac{V_0(q)}{\epsilon(i\Omega_m, \mathbf{q})} |\langle \sigma \lambda \mathbf{p} | \sigma' \lambda' \mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle|^2 G_{\sigma' \lambda'}^{(N)}(i(\omega_n - \Omega_m), \mathbf{p} + \mathbf{q}) \quad (5.3.36) \\ &\approx -(2\beta)^{-1} \sum_{\Omega_m \sigma' \mathbf{q}} \frac{V_0(q)}{\epsilon(i\Omega_m, \mathbf{q})} \text{Tr} \left( \hat{P}_\sigma(\mathbf{p}) \hat{P}_{\sigma'}(\mathbf{p} + \mathbf{q}) \right) G_{\sigma'}^{(N0)}(i(\omega_n - \Omega_m), \mathbf{p} + \mathbf{q}), \end{aligned} \quad (5.3.37)$$

with the bosonic Matsubara frequencies  $\Omega_m = 2m\pi T$  with  $T$  the temperature and  $m$  an integer. In the last line we have approximated  $G_{\sigma\lambda}^{(N)}(i\omega_n, \mathbf{p}) \approx G_\sigma^{(N0)}(i\omega_n, \mathbf{p}) = (-i\omega_n + \xi_\sigma(\mathbf{p}))^{-1}$  which is independent of the index  $\lambda$ . We have discussed this expression of the self-energy for real frequencies in Ref. [17] and with the same approach we compute its behaviour for imaginary frequencies in Fig. 5.1(b,c). There we decompose the self-energy over two real-valued functions  $Z_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p})$  and  $\chi_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p})$

$$\Sigma_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) = \chi_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) + i\omega_n(1 - Z_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p})). \quad (5.3.38)$$

5.3.7.2. Anomalous self-energy. The anomalous Green's functions satisfy

$$F_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) = (-i\omega_n + \xi_\sigma(\mathbf{p}) + \Sigma_{\sigma+}(i\omega_n, \mathbf{p}))^{-1} G_{\sigma-}(-i\omega_n, -\mathbf{p}) \Delta_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) \quad (5.3.39)$$

where the anomalous self-energy is

$$\Delta_\sigma(i\omega_n, \mathbf{p}) = -T \sum_{\sigma' \lambda' \omega_m, \mathbf{q} \neq \mathbf{0}} V(i(\omega_n - \omega_m), \mathbf{q}) |\langle \sigma \lambda \mathbf{p} | \sigma' \lambda' \mathbf{p} + \mathbf{q} \rangle|^2 F_{\sigma'}(i\omega_m, \mathbf{p} + \mathbf{q}). \quad (5.3.40)$$

Close to the critical temperature one can neglect the amplitude of the anomalous Green's functions,  $F_\sigma \approx 0$ . The normal Green's functions can also be approximated with their normal state behaviour that we have discussed in Ref. [17],  $G_{\sigma\lambda}(i\omega_n, \mathbf{p}) \approx G_\sigma^{(N)}(i\omega_n, \mathbf{p})$ . This leads to the linearised Eliashberg equations that we discuss in the next subsections and that we transform to have it symmetric.

**a. Linear Eliashberg equations.** Near the phase transition,  $T = T_c$ , we expand Eq. (5.3.39) to the lowest order in  $F_\sigma$

$$F_{\sigma_1}(i\omega_{n_1}, \mathbf{k}_1) = -G_{\sigma_1}(i\omega_{n_1}, \mathbf{k}_1)G_{\sigma_1}(-i\omega_{n_1}, -\mathbf{k}_1)T \sum_{\omega_{n_2}} \sum_{\sigma_2 \mathbf{k}_2} I_{\sigma_1 \sigma_2}(i\omega_{n_1}, \mathbf{k}_1; i\omega_{n_2}, \mathbf{k}_2) F_{\sigma_2}(i\omega_{n_2}, \mathbf{k}_2) \quad (5.3.41)$$

where the coupling between electrons in a pair is described by

$$I_{\sigma_1 \sigma_2}(i\omega_{n_1}, \mathbf{k}_1; i\omega_{n_2}, \mathbf{k}_2) = \frac{V_0(|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|)}{\epsilon(i(\omega_{n_1} - \omega_{n_2}), \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)} \frac{1}{2} \text{Tr} \left( \hat{P}_{\sigma_1}(\mathbf{k}_1) \hat{P}_{\sigma_2}(\mathbf{k}_2) \right). \quad (5.3.42)$$

This equation is similar to that developed in previous studies on the superconductivity mediated by plasmons [2] up to the spin-orbit form factor  $\frac{1}{2} \text{Tr} \left( \hat{P}_{\sigma_1}(\mathbf{k}_1) \hat{P}_{\sigma_2}(\mathbf{k}_2) \right)$ .

We introduce the gap functions  $\phi_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k}) = G_\sigma^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k}) G_\sigma^{-1}(-i\omega_n, -\mathbf{k}) F_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k})$  for which the linearised Eliashberg equation writes

$$\phi_{\sigma_1}(i\omega_{n_1}, \mathbf{k}_1) = -T \sum_{\omega_{n_2}} \sum_{\sigma_2 \mathbf{k}_2} \frac{I_{\sigma_1 \sigma_2}(i\omega_{n_1}, \mathbf{k}_1; i\omega_{n_2}, \mathbf{k}_2)}{(\omega_{n_2} Z_{\sigma_2}(i\omega_{n_2}, \mathbf{k}_2))^2 + (\xi_{\sigma_2}(\mathbf{k}_2) + \chi_{\sigma_2}(i\omega_{n_2}, \mathbf{k}_2))^2} \phi_{\sigma_2}(i\omega_{n_2}, \mathbf{k}_2). \quad (5.3.43)$$

Due to the rotational symmetry of the non-interacting Hamiltonian and of the Coulomb interaction, the electron-electron coupling  $I_{\sigma_1 \sigma_2}(i\omega_{n_1}, \mathbf{k}_1, i\omega_{n_2}, \mathbf{k}_2)$  depends on  $\mathbf{k}_1$  and  $\mathbf{k}_2$  through their norms  $k_1 = |\mathbf{k}_1|$ ,  $k_2 = |\mathbf{k}_2|$  and their relative angle  $\theta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$ . This allows to decompose the gap functions over the spherical harmonics  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$

$$\phi_\sigma(i\omega_n, \mathbf{k}) = \sum_{\ell m} \phi_{\ell m \sigma}(i\omega_n, k) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (5.3.44)$$

where  $\theta$  is the angle between  $\mathbf{k}$  and the  $z$ -axis and  $\phi$  is the angle between the projection of  $\mathbf{k}$  in the  $xy$  plane and the  $x$ -axis. The Eliashberg equation is degenerate on the index  $m$  and the equations for the components  $\phi_\ell$  are

$$\phi_{\ell \sigma_1}(i\omega_{n_1}, k_1) = -T \sum_{\sigma_2 \omega_{n_2}} \int_0^\infty dk_2 \frac{k_2}{k_1} \frac{I_{\ell \sigma_1 \sigma_2}(i\omega_{n_1}, k_1; i\omega_{n_2}, k_2)}{(\omega_{n_2} Z_{\sigma_2}(i\omega_{n_2}, q))^2 + (\xi_{\sigma_2}(q) + \chi_{\sigma_2}(i\omega_{n_2}, q))^2} \phi_{\ell \sigma_2}(i\omega_{n_2}, k_2) \quad (5.3.45)$$

with

$$I_{\ell \sigma_1 \sigma_2}(i\omega_{n_1}, k_1; i\omega_{n_2}, k_2) = \int_{|k_1 - k_2|}^{k_1 + k_2} dq P_\ell \left( \frac{k_1^2 + k_2^2 - q^2}{2k_1 k_2} \right) \frac{1}{4} \left\{ 2 + \sigma_1 \sigma_2 \left[ 3 \left( \frac{k_1^2 + k_2^2 - q^2}{2k_1 k_2} \right)^2 - 1 \right] \right\} \\ \times \frac{q V_0(q) N_0}{\epsilon(i(\omega_{n_1} - \omega_{n_2}), q)}, \quad (5.3.46)$$

and where  $N_0 = 1/(4\pi^2)$  is the density of states per band at the Fermi surface. This equation is similar to that derived by Takada in Ref. [2] and accounts for the spin-orbit corrections of a Luttinger semimetal, as in Ref. [12]. In practice we consider a gap function even in

frequency, following our comment after Eq. (5.3.26), and we can symmetrize the equation to have the summation over positive Matsubara frequencies. This choice necessitates that the gap functions are even in momentum, which excludes odd spherical harmonics. We observe that in Ref. [2] the author finds solutions for a singlet gap function, even in frequency and with  $\ell = 1$  ( $p$ -wave) but it seems that the parity considerations in Eq. (5.3.27) were omitted in his derivation of the Eliashberg equation.

The numerical treatment of this equation was discussed in Ref. [2] where the gap function is made discrete over  $i\omega_n$  and  $k$ , such that for  $\omega_s < \omega_n < \omega_{s+1}$  and  $k_d < k < k_{d+1}$ ,  $\phi_{\sigma\ell}(i\omega_n, k) = \Delta_{\sigma\ell}(s, d)$ . The equation then resembles to an eigenvalue equation

$$\lambda(T)\Delta_\ell = \hat{M}_\ell \cdot \Delta_\ell, \quad (5.3.47)$$

for which we determine  $T_c$  by searching for the temperature where  $\lambda(T) = 1$ .

**b. Symmetrized linear Eliashberg equations.** In the main text we used a different formulation of Eq. (5.3.45). We have performed the transformation

$$\bar{\phi}_{\ell\sigma}(i\omega_n, k) = \frac{k}{(\omega_n Z_\sigma(i\omega_n, k))^2 + (\xi_\sigma(k) + \chi_\sigma(i\omega_n, k))^2} \phi_{\ell\sigma}(i\omega_n, k) \quad (5.3.48)$$

so that we instead have the following eigenvalue equation, with  $\rho(T = T_c) = 0$ ,

$$\begin{aligned} \rho \bar{\phi}_{\ell\sigma_1}(i\omega_{n_1}, k_1) = & - \sum_{\omega_{n_2}} \int_0^\infty dk_2 \left\{ I_{\ell\sigma_1\sigma_2}(i\omega_{n_1}, k_1; i\omega_{n_2}, k_2) \right. \\ & \left. + \delta_{n_1 n_2} \delta_{k_1 k_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} T^{-1} \left( (\omega_{n_2} Z_{\sigma_2}(k_2, i\omega_{n_2}))^2 + (\xi_{\sigma_2}(k_2) + \chi_{\sigma_2}(k_2, i\omega_{n_2}))^2 \right) \right\} \bar{\phi}_{\ell\sigma_2}(i\omega_{n_2}, k_2). \end{aligned} \quad (5.3.49)$$

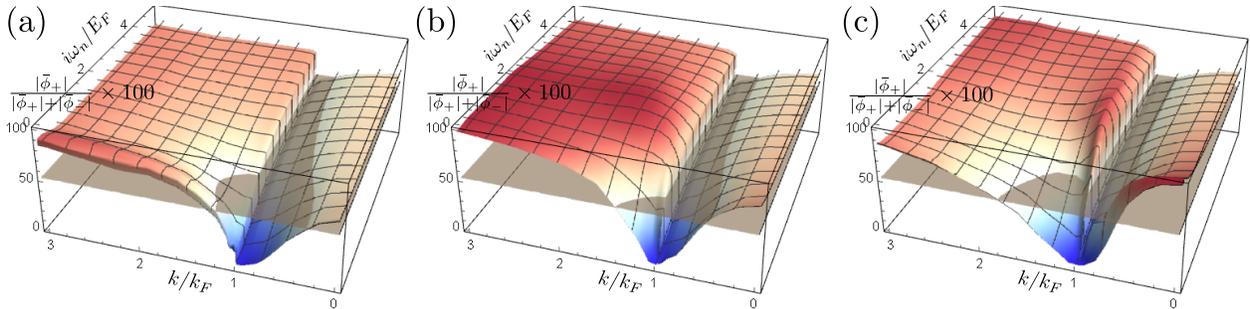
The asymptotic behaviour shows that the parameter  $\rho$  satisfies  $\rho(T) \sim -1/T$  as  $T \rightarrow 0$  and  $\rho(T) \sim -T$  as  $T \rightarrow \infty$ . Thus, the largest possible eigenvalue  $\rho(T)$  at a fixed temperature vanishes at the highest critical temperature [148, 149]

$$\rho_{\max}(T = T_c) = 0. \quad (5.3.50)$$

The equation (5.3.49) is symmetric when permuting the indices  $(\sigma_1, i\omega_{n_1}, k_1) \leftrightarrow (\sigma_2, i\omega_{n_2}, k_2)$ . Thus, for any trial gap function  $\bar{\phi}^t$ , one has the following variational principle

$$\rho_{\max} \geq \bar{\phi}^t \cdot \hat{S} \bar{\phi}^t / (\bar{\phi}^t \cdot \bar{\phi}^t) = \rho^t, \quad (5.3.51)$$

where  $\rho \bar{\phi}_\ell = \hat{S} \bar{\phi}_\ell$  represents Eq. (5.3.49). The scalar product refers to the canonical scalar product on indices  $(\sigma, i\omega_n, k)$ . This inequality implies that any critical temperature  $T_c^t$  one computes numerically with Eq. (5.3.49) is bounded from above by the analytic solution,  $T_c > T_c^t$ . This formulation is helpful when computing the variational derivative of the critical temperature over  $\epsilon(i\Omega_n, q)$  due to the Hellmann-Feynman theorem (see Sec. 5.3.4).



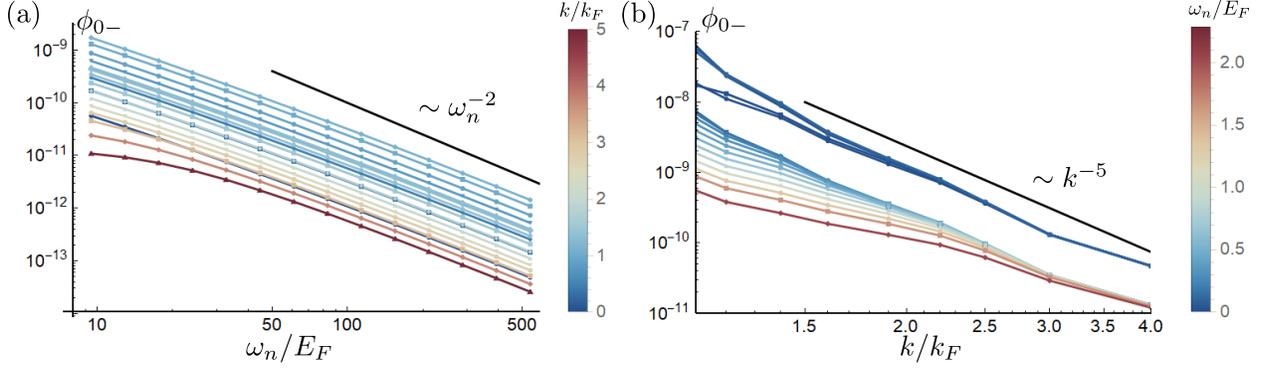
**Fig. 5.5.** Proportion of  $|\bar{\phi}_+(i\omega_n, k)|$  in percentage of  $|\bar{\phi}_-(i\omega_n, k)| + |\bar{\phi}_+(i\omega_n, k)|$  for  $\ell = 0$  ( $s$ -wave) and (a)  $r_s = 1$ , (b)  $r_s = 5$  and (c)  $r_s = 15$ . The components of  $\bar{\phi}_+$  that dominate over  $\bar{\phi}_-$  are above the gray plane, at 50%, and this happens away from the Fermi surface where  $k = k_F$  and  $\omega_n \approx 0$ .

**c. Grid and asymptotic behaviour.** The numerical solution of the symmetrized linear Eliashberg equation is obtained by decomposing the gap function over a grid in frequencies and wavevectors (see Sec. 5.3.3.3). We have refined the grid points in order to obtain a stable solution for the critical temperature. The eigenvalues  $\rho(T)$  are computed using a C implementation of the LAPACK library (Intel MKL). It is worth mentioning that we are limited by the precision of the numerical variables, which are double precision, and we observe numerical errors for temperatures below  $T/T_F \approx 10^{-5}$ .

The two components,  $\bar{\phi}_\pm$ , of the gap functions are accounted for. We observe that  $\bar{\phi}_+$  is non-negligible away from  $k \approx k_F$  and small  $\omega_n$  as depicted in Fig. 5.5. This is because both the  $s$ -wave pairing potential (5.3.11) and the kinetic energy (5.3.12) are almost independent on the band index,  $\sigma$ , for  $k$  far away from  $k_F$  and large frequency. In the case of non- $s$ -wave pairing channels, which we do not consider in the present work, the contributions of the two bands may be asymmetric due to their respective helicity [12].

The critical temperature is small compared to the characteristic energy scale of the dielectric function ( $T_c/T_F \approx 4.4 \times 10^{-4}$ ) and we have to use a grid in frequency that can account for both scales. The numerical results reported in this work are obtained with a grid of 80 logarithmically-spaced frequencies on the range  $[10^{-6}, 10]$ . We start with such a small frequency to be able to compute  $\rho(T)$  for smaller temperatures and compute its derivative  $\partial\rho/\partial T$  in Eq. (5.3.18). To this we add 20 linearly-spaced frequencies up to  $10^3$  in order to reach the expected asymptotic behaviour (see below). We do not have to introduce negative frequencies because we consider gap functions even in frequency.

The diagonal elements in the gap equation (5.3.10) are dominated by the matrix elements of  $K_\sigma$  defined in Eq. (5.3.12). The smallest value of  $K_\sigma$  is obtained for  $\sigma = -$ , the  $n = 0$  Matsubara frequency and  $k = k_F$ , where its value is  $K_-(n = 0, k = k_F) = Z_F^2 \pi^2 T$ . Here, because we average the equation on extended intervals  $[k_d, k_d + 1]$ , on the grid of wavevectors  $\{k_d\}_{d \in [1, N_2]}$ , this minimal value is only obtained for a very dense grid near  $k = k_F$ . Indeed,



**Fig. 5.6.** Asymptotic behaviour of the gap function for (a) large frequencies for different  $k/k_F$  and for (b) large wavevectors for different  $\omega_n/E_F$ , for  $\ell = 0$  and  $r_s = 5$ . The black line is a guide to the eye for the expected asymptotic behaviour.

the average of  $K_-$  (5.3.12) on the interval centered around  $k = k_F$ ,  $[1 - \Delta k/2, 1 + \Delta k/2]$  is

$$\frac{1}{\Delta k} \int_{1-\Delta k/2}^{1+\Delta k/2} dk K_-(n=0, k) = (\pi^2 T^2 + (1/3 + \Delta k^2/80)\Delta k^2)/T, \quad (5.3.52)$$

where we neglect self-energy corrections to make the expression simple. We thus properly describe the excitations at the Fermi surface for  $T_c/T_F \sim 10^{-4}$  if  $\Delta k/k_F \ll 10^{-4}$  near  $k = k_F$ . The necessity for such a narrow grid near the Fermi surface is also present in other related works [2, 82, 87] and is seen as a dip in the resulting gap function (see Fig. 5.3). We used a dense grid with 60 points in the interval  $k/k_F \in [0.99, 1.01]$  with the smallest interval of  $\Delta k/k_F = 10^{-6}$ , which constitutes the smallest spacing we can reach here with double numerical precision. This tight spacing close to the Fermi surface limits the exploration of the critical temperature down to  $T/T_F \approx 10^{-5}$ . To this we add 12 points in the interval  $[0, 0.98]$  and 14 points in the interval  $[1.02, 5]$ . This gives a smooth behaviour away from  $k \approx k_F$  and allows to describe the asymptotic behaviour.

The asymptotic behaviour of  $\bar{\phi}_{\ell\sigma}(i\omega_n, k)$  is independent on  $\ell$  and can be determined from that of  $\phi_{\ell\sigma}(i\omega_n, k)$  in Ref. [151]

$$\bar{\phi}_{\ell\sigma}(i\omega_n, k) \sim \begin{cases} 1/\omega_n^2 & \text{for } \omega_n \gg E_F, \\ 1/k^5 & \text{for } k \gg k_F. \end{cases} \quad (5.3.53)$$

We use this asymptotic behaviour to describe the large frequency and large wavevector behaviour beyond a frequency  $\omega_{N_1}$  and a wavevector  $k_{N_2}$  (see Sec. 5.3.3.3). We check that the gap function indeed converges to these asymptotic behaviours by plotting it on a logarithmic scale (see Fig. 5.6). We typically use  $\omega_{N_2}/E_F = 10^3$  and  $k_{N_1}/k_F = 5$  to converge to the expected asymptotic behaviour.

### 5.3.8. Appendix B: Random phase approximation

The effect of retardation is discussed as for the electron-phonon coupling [168]. We have the equation of motion, for arbitrary  $\hat{O}$ ,

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} - (\xi_{\sigma_1}(\mathbf{k}) - \xi_{\sigma_2}(\mathbf{k} - \mathbf{q})) \right] \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau) \hat{O} \rangle = \\ & \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}' \neq 0} \sum_{\sigma_3\sigma_4\sigma_5\lambda_3\lambda_4\lambda_5} V_0(q) \left\langle \hat{T}_\tau \left( \langle \sigma_3\lambda_3\mathbf{k} - \mathbf{q} | \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} \rangle \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'\sigma_3\lambda_3}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2} - \langle \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} | \sigma_3\lambda_3\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{q}' \rangle \right. \right. \\ & \left. \left. \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}+\mathbf{q}'\sigma_3\lambda_3} \right) \langle \sigma_4\lambda_4\mathbf{p} + \mathbf{q}' | \sigma_5\lambda_5\mathbf{p} \rangle \hat{c}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}'\sigma_4\lambda_4}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma_5\lambda_5} \hat{O} \right\rangle, \end{aligned} \quad (5.3.54)$$

which we simplify in the random phase approximation (RPA) by discarding contributions with  $\mathbf{q} \neq \mathbf{q}'$  and applying a Wick decomposition on the right-hand side. Then

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} - (\xi_{\sigma_1}(\mathbf{k}) - \xi_{\sigma_2}(\mathbf{k} - \mathbf{q})) \right] \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau) \hat{O} \rangle = \\ & \frac{1}{\mathcal{V}} V_0(q) \langle \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} | \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} \rangle (f_D(\xi_{\sigma_2}(\mathbf{k} - \mathbf{q})) - f_D(\xi_{\sigma_1}(\mathbf{k}))) \\ & \times \sum_{\substack{\mathbf{p}\sigma_3\sigma_4 \\ \lambda_3\lambda_4}} \langle \sigma_3\lambda_3\mathbf{p} | \sigma_4\lambda_4\mathbf{p} - \mathbf{q} \rangle \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{p}\sigma_3\lambda_3}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\sigma_4\lambda_4}(\tau) \hat{O} \rangle, \end{aligned} \quad (5.3.55)$$

where  $f_D(\xi)$  is the Fermi-Dirac distribution. We perform the decomposition in a contribution independent on the potential and its correction, up to the contribution in  $\hat{O}$ ,  $\langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau) \hat{O} \rangle = \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau) \hat{O} \rangle_0 + \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau) \hat{O} \rangle_1$ . Then, after a Fourier transformation of the equation, multiplying it by a factor  $\langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle$  and summing over  $\sigma_1, \lambda_1, \sigma_2, \lambda_2$  and  $\mathbf{k}$  one finds

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2 \\ \lambda_1\lambda_1}} \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(i\omega_n) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(i\omega_n) \hat{O} \rangle_1 \\ & = V_0(q) \Pi(i\omega_n, \mathbf{q}) \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2 \\ \lambda_1\lambda_1}} \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(i\omega_n) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(i\omega_n) \hat{O} \rangle_0, \end{aligned} \quad (5.3.56)$$

with  $\Pi(i\omega_n, \mathbf{q}) = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\lambda_1\lambda_2} \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{p} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{p} - \mathbf{q} \rangle^2 \left( \frac{f_D(\xi_{\sigma_2}(\mathbf{p}-\mathbf{q})) - f_D(\xi_{\sigma_1}(\mathbf{p}))}{-i\omega_n + \xi_{\sigma_2}(\mathbf{p}-\mathbf{q}) - \xi_{\sigma_1}(\mathbf{p})} \right)$  is the RPA polarisability. The resulting expression is then

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2 \\ \lambda_1\lambda_1}} \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(i\omega_n) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(i\omega_n) \hat{O} \rangle \\ & = \frac{1}{1 - V_0(q) \Pi(i\omega_n, q)} \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2 \\ \lambda_1\lambda_1}} \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(i\omega_n) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(i\omega_n) \hat{O} \rangle_0 \end{aligned} \quad (5.3.57)$$

and the inverse Fourier transform gives

$$\begin{aligned}
V_0(q) \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2 \\ \lambda_1\lambda_2}} \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau) \hat{O} \rangle \\
= \int d\tau' V(\tau - \tau', \mathbf{q}) \sum_{\substack{\mathbf{k}\sigma_1\sigma_2 \\ \lambda_1\lambda_2}} \langle \sigma_1\lambda_1\mathbf{k} | \sigma_2\lambda_2\mathbf{k} - \mathbf{q} \rangle \langle \hat{T}_\tau \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma_1\lambda_1}^\dagger(\tau') \hat{c}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma_2\lambda_2}(\tau') \hat{O} \rangle_0,
\end{aligned} \tag{5.3.58}$$

where  $V(\tau, \mathbf{q}) = \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n\tau} V_0(q) / (1 - V_0(q) \Pi(i\omega_n, \mathbf{q}))$  is the retarded Coulomb potential.

### 5.3.9. Appendix C: Green function integrated over angles

The calculation of the self-energy in Eq. (5.3.36) involves the following integral

$$\begin{aligned}
\Sigma_{\sigma\lambda}^{(N)}(i\omega_n, \mathbf{p}) &= -(2\beta)^{-1} \sum_{\Omega_m\sigma'} \frac{1}{(2\pi)^3} \int dq q^2 \frac{V_0(q)}{\epsilon(i\Omega_m, q)} \int d\theta d\phi \sin(\theta) \text{Tr} \left( \hat{P}_\sigma(\mathbf{p}) \hat{P}_{\sigma'}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) \right) \\
&\times G_{\sigma'}^{(N0)}(i(\omega_n - \Omega_m), \mathbf{p} - \mathbf{q})
\end{aligned} \tag{5.3.59}$$

$$= \beta^{-1} \sum_{\Omega_m} \int dq q^2 \frac{V_0(q) N_0}{\epsilon(i\Omega_m, q)} \bar{G}_\sigma(i(\omega_n - \Omega_m), p, q) \tag{5.3.60}$$

where we have introduced the averaged coupling function over angles

$$\begin{aligned}
\bar{G}_\sigma(i(\omega_n - \Omega_m), p, q) &= \sum_{\sigma'} \int_{-1}^1 du \frac{1}{4} \left\{ 2 + \sigma\sigma' \left[ \frac{3(p+qu)^2}{p^2 + q^2 + 2pqu} - 1 \right] \right\} \\
&\times \frac{1}{i(\omega_n - \Omega_m) - (\sigma'(p^2 + q^2 + 2pqu) - \text{sgn}(E_F))}.
\end{aligned} \tag{5.3.61}$$

We decompose this function over the real and imaginary parts,  $\bar{G}^{(1)}$  and  $\bar{G}^{(2)}$ ,

$$\bar{G}_\sigma(i(\omega_n - \Omega_m), p, q) = \bar{G}_\sigma^{(1)}(i(\omega_n - \Omega_m), p, q) + i\bar{G}_\sigma^{(2)}(i(\omega_n - \Omega_m), p, q) \tag{5.3.62}$$

where

$$\begin{aligned}
\bar{G}_\sigma^{(1)}(i(\omega_n - \Omega_m), p, q) &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma'} \left\{ -\frac{3\sigma}{4p^2} + \frac{1}{16pq} \frac{1}{\sigma' p^2} \frac{3\sigma \text{sgn}(E_F)(p^2 - q^2)^2}{1 + (\Omega_m - \omega_n)^2} \log \left( \frac{(p+q)^2}{(p-q)^2} \right) \right. \\
&+ \frac{1}{16pq} \frac{1}{\sigma' p^2} 3\sigma(\Omega_m - \omega_n) \left( 1 - \frac{(p^2 - q^2)^2}{1 + (\Omega_m - \omega_n)^2} \right) \left( \arctan \left[ \frac{\text{sgn}(E_F) - \sigma'(p+q)^2}{\omega_n - \Omega_m} \right] \right. \\
&- \left. \left. \arctan \left[ \frac{\text{sgn}(E_F) - \sigma'(p-q)^2}{\omega_n - \Omega_m} \right] \right) + \frac{1}{32pq} \frac{1}{\sigma' p^2} \left( 8p^2 + (3\text{sgn}(E_F) + 2(p^2 - 3q^2)\sigma')\sigma \right. \right. \\
&\left. \left. + \frac{3(p^2 - q^2)^2 \text{sgn}(E_F)\sigma}{1 + (\Omega_m - \omega_n)^2} \right) \log \left( \frac{(\text{sgn}(E_F) - \sigma'(p-q)^2)^2 + (\Omega_m - \omega_n)^2}{(\text{sgn}(E_F) - \sigma'(p+q)^2)^2 + (\Omega_m - \omega_n)^2} \right) \right\}, \tag{5.3.63}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{G}_\sigma^{(2)}(i(\omega_n - \Omega_m), p, q) &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma'} \left\{ \frac{1}{16pq} \frac{1}{\sigma' p^2} \frac{3\sigma(p^2 - q^2)^2(\Omega_m - \omega_n)}{1 + (\Omega_m - \omega_n)^2} \log \left( \frac{(p+q)^2}{(p-q)^2} \right) \right. \\
&+ \frac{1}{16pq} \frac{1}{\sigma' p^2} \left( 8p^2 + (3\text{sgn}(E_F) + 2(p^2 - 3q^2)\sigma')\sigma + \frac{3(p^2 - q^2)^2 \text{sgn}(E_F)\sigma}{1 + (\Omega_m - \omega_n)^2} \right) \\
&\times \left( \arctan \left[ \frac{\text{sgn}(E_F) - \sigma'(p+q)^2}{\omega_n - \Omega_m} \right] - \arctan \left[ \frac{\text{sgn}(E_F) - \sigma'(p-q)^2}{\omega_n - \Omega_m} \right] \right) \\
&\left. - \frac{1}{32pq} \frac{1}{\sigma' p^2} 3\sigma(\Omega_m - \omega_n) \left( 1 - \frac{(p^2 - q^2)^2}{1 + (\Omega_m - \omega_n)^2} \right) \log \left( \frac{(\text{sgn}(E_F) - \sigma'(p-q)^2)^2 + (\Omega_m - \omega_n)^2}{(\text{sgn}(E_F) - \sigma'(p+q)^2)^2 + (\Omega_m - \omega_n)^2} \right) \right\}, \tag{5.3.64}
\end{aligned}$$

where we have kept track of the sign of the Fermi energy,  $\text{sgn}(E_F)$ , in the calculation. All results reported in the main text are obtained for  $\text{sgn}(E_F) = -1$ .



# Chapitre 6

---

## Conclusion et travaux futurs

À l'occasion de ce mémoire j'ai pu étudier la réponse linéaire et la transition de phase supraconductrice des semi-métaux de Luttinger. La particularité de ces matériaux tient à leur fort couplage interbande, ce qui affecte l'écrantage électrique et magnétique des électrons de conduction.

Nous avons considéré une impureté locale électrique ou magnétique au sein du matériau et à température nulle nous obtenons analytiquement la réponse du matériau. Nous trouvons trois réponses distinctes pour un signe donné de la masse, comme représenté à la Fig. 1.1. D'abord une réponse purement électrique associée aux oscillations de Friedel et indépendante de l'état propre qui contient l'énergie de Fermi. Les deux autres réponses, une transversale et une longitudinale par rapport au vecteur position, sont purement magnétiques et associées au mécanisme d'interaction RKKY: ces deux réponses sont affectées par le signe de la masse. Avec ces réponses magnétiques nous dérivons l'Hamiltonien effectif d'interaction RKKY entre deux impuretés magnétiques au sein d'un semi-métal de Luttinger. Nous calculons aussi la susceptibilité magnétique de spin, dont le signe est opposé à celle d'un gaz d'électrons libres 3-D. Nous présentons nos résultats dans un article scientifique intitulé *Impurities in three-dimensional quadratic band-touching Luttinger semimetals: Friedel and RKKY oscillations* présenté au chapitre 4.3.

Nous avons de plus étudié la supraconductivité des semi-métaux de Luttinger, comme le demi-Heusler à base de bismuth YPtBi, dont la température critique expérimentale ne peut pas être expliquée par un modèle conventionnel de la supraconductivité se basant principalement sur l'interaction électron-phonon. Nous considérons plutôt que l'appariement des électrons en paires de Cooper se fait par l'entremise de l'interaction Coulombienne écrantée. Nous obtenons une relation linéaire en énergie de Fermi pour la température critique d'un semi-métal de Luttinger et analysons la sensibilité de la température critique à l'écrantage. Avec les paramètres physiques des semi-métaux de Luttinger supraconducteurs étudiés nous obtenons un accord en ordre de grandeur entre la température critique calculée dans notre

modèle et celle mesurée. Nous présentons nos résultats dans un article scientifique intitulé *Superconductivity from Coulomb repulsion in three-dimensional quadratic band touching Luttinger semimetals* présenté au chapitre 5.3.

Nous avons continué d’explorer la question de l’écrantage d’une impureté dans un semi-métal de Luttinger afin de mieux comprendre la physique sous-jacente. Nous terminons ce manuscrit en soulignant comment modifier et traiter l’Hamiltonien symétrique eq. (1.1.3) de nos travaux afin d’explorer dans un travail futur le cas d’abord d’un modèle brisant la symétrie entre les bandes d’électrons et de trous, et dans un deuxième temps le cas d’un modèle brisant la symétrie par inversion spatiale.

## 6.1. Travaux futurs

### 6.1.1. Brisure de la symétrie électron-trou

Considérons l’Hamiltonien de Luttinger de nos travaux, eq (1.1.3), mais sans la symétrie particule-trou. L’Hamiltonien s’écrit comme:

$$H_{Asym} = \left( \alpha - \frac{5}{4}\beta \right) k^2 + \beta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{J})^2 \quad (6.1.1)$$

avec  $\alpha$  et  $\beta$  des nombres réels comme introduit au chapitre 1.1: la structure symétrique des bandes d’électrons et de trous de nos travaux est retrouvée pour  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 1$ . Pour étudier l’effet de l’asymétrie particule-trou et puisque nous travaillons toujours en unités de l’énergie de Fermi, il est pratique de fixer la dispersion de la bande du dessous à  $-k^2$ , comme dans nos travaux, et de faire varier la dispersion de la bande du dessus. En considérant toujours que l’énergie de Fermi est située dans la bande du dessous, ceci permet de ne modifier que le couplage interbande et de garder le couplage intrabande constant. Cette situation est plus simple à analyser: seul le couplage interbande varie. Nous souhaitons étudier ce dernier car c’est ce fort couplage qui risque d’affecter le plus l’écrantage.

Un semi-métal de Luttinger avec cet Hamiltonien possède toujours deux bandes, doublement dégénérées, de dispersions de signes opposés, et les énergies propres sont de  $(\alpha \pm \beta)k^2$ . Nous fixons  $\alpha - \beta = -1$  pour la bande du dessous et introduisons un paramètre  $\rho = \left| \frac{E(k)_{\pm 3/2}}{E(k)_{\pm 1/2}} \right|$  représentant le ratio absolu des dispersions des bandes d’énergie propres  $E(k)_{\pm 3/2, \pm 1/2}$  et d’états propres correspondants, dénotés par les indices  $\pm 3/2$  et  $\pm 1/2$ . Nous pouvons alors écrire les paramètres de l’Hamiltonien comme  $\alpha = \frac{\rho-1}{2}$  et  $\beta = \frac{\rho+1}{2}$  et faire varier seulement le paramètre  $\rho > 0$ :  $\rho = 1$  correspond évidemment au cas symétrique de nos travaux.

Dans notre travail nous avons vu que la loi de puissance à petite distance des réponses se réduit à une simple loi de puissance  $\sim r^{-4}$ . De plus, nous avons constaté que si nous

considérons un potentiel chimique nul, la réponse correspondante est non-oscillante et correspond exactement au cas limite  $r \ll 1$  à potentiel chimique non-nul. Nous pourrions par exemple considérer le cas à potentiel chimique nul, plus simple à traiter mathématiquement, et considérer un  $r \ll 1$  fixe et calculer les réponses à cette distance en fonction de  $\rho$ . Nous pouvons donc obtenir la dépendance de l’amplitude et du signe de la réponse à potentiel chimique nul en fonction de  $\rho$  et interpoler que c’est bien aussi la réponse correspondante à potentiel chimique donné à petite distance. Ce régime est intéressant, car pour les semi-métaux de Luttinger étudiés dans notre travail, la distance interatomique  $ak_F \approx 0.1 - 1$  et se situe donc dans le régime de petite distance. Étudier le signe et l’amplitude de la réponse permettrait de prédire quel ratio optimise ou minimise le couplage et même de prédire si le couplage magnétique change de signe à un certain ratio critique, afin d’explorer l’espace des phases magnétiques en fonction de la structure du matériau.

### 6.1.2. Brisure de la symétrie par inversion spatiale: couplage spin-orbite asymétrique

Nous avons souligné au chapitre 1.1 que le semi-métal de Luttinger YPtBi est un *non-centrosymmetric superconductor*, c’est-à-dire qu’un modèle le décrivant brise la symétrie par inversion spatiale, même dans la phase supraconductrice. Le terme correspondant à ajouter dans l’Hamiltonien de Luttinger de nos travaux est la matrice de Bloch de la forme  $H = \delta \sum_i k_i (\hat{J}_{i+1} \hat{J}_i \hat{J}_{i+1} - \hat{J}_{i+2} \hat{J}_i \hat{J}_{i+2})$ , où  $\delta$  est l’amplitude de ce terme de *asymmetrical spin-orbit coupling* (ASOC). Dans la littérature un tel terme est généralement de la forme  $\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma}$ , faisant intervenir le produit vectoriel entre le vecteur vecteur d’onde et le vecteur des matrices de spin  $\boldsymbol{\sigma}$  du modèle. L’ajout de ce terme dans l’Hamiltonien de Luttinger symétrique se traduit par l’ajout d’un terme de la forme  $\mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)$  dans l’Hamiltonien d’interaction RKKY effectif de notre travail, eq. (4.3.19), qu’on appelle un terme de couplage de type Dzyaloshinskii-Moriya. Ainsi un tel terme peut changer la nature de l’interaction magnétique RKKY entre deux impuretés magnétiques et aussi possiblement admettre un couplage charge-spin non nul, puisque levant la dégénérescence des bandes [17].

Pour YPtBi, le paramètre  $\delta$  est proposé très petit par rapport aux autres termes de l’Hamiltonien [9] et peut donc être traité de façon perturbative. Considérons l’Hamiltonien de Luttinger avec ce terme de la forme  $H_{Tot} = H_0 + H_{ASOC}$ , où  $H_0$  est l’Hamiltonien de nos travaux. Nous travaillons avec le formalisme des fonctions de Green et développons perturbativement la relation suivante dans l’espace initial des vecteurs d’ondes:

$$\begin{aligned}
H_{Tot}G(\mathbf{k}) = 1 &\Rightarrow H_0G(\mathbf{k}) = 1 - H_{ASOC}G(\mathbf{k}) \\
&\Rightarrow G(\mathbf{k}) = G_0(\mathbf{k}) - G_0(\mathbf{k})H_{ASOC}G(\mathbf{k}) = G_0(\mathbf{k}) - G_0(\mathbf{k})H_{ASOC}(G_0(\mathbf{k}) - G_0(\mathbf{k})H_{ASOC}G(\mathbf{k})) \\
&\Rightarrow G(\mathbf{k}) = G_0(\mathbf{k}) - G_0(\mathbf{k})H_{ASOC}G_0(\mathbf{k}) + O(H_{ASOC}^2) \tag{6.1.2}
\end{aligned}$$

où ici à l'Hamiltonien non-perturbé  $H_0$  correspond la fonction de Green  $G_0(\mathbf{k})$  de notre travail, eq. (4.3.2). La relation précédente nous indique donc qu'au premier ordre en  $H_{ASOC}$ , la fonction de Green perturbée que nous cherchons est simplement la fonction de Green non-perturbée moins un terme correctif,  $G_0H_{ASOC}G_0$ . Il suffit donc en pratique de calculer la transformée de Fourier des vecteurs d'onde en position et d'intégrer sur les fréquences de Matsubara afin d'obtenir la correction aux réponses d'un semi-métal de Luttinger. Il serait entre autres intéressant de voir si à cet ordre correctif nous pouvons obtenir un couplage charge-spin non nul dans un semi-métal de Luttinger, ou s'il faut passer à un ordre supérieur en perturbation.

# Références bibliographiques

---

- [1] Ian A. Leahy, Yu-Ping Lin, Peter E. Siegfried, Andrew C. Treglia, Justin C. W. Song, Rahul M. Nandkishore, and Minhyea Lee. Nonsaturating large magnetoresistance in semimetals. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 115(42):10570–10575, 2018. Supplementary information.
- [2] Yasutami Takada. Plasmon mechanism of superconductivity in the multivalley electron gas. *Journal of the Physical Society of Japan*, 61(1):238–253, 1992.
- [3] J. M. Luttinger. Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors: General theory. *Phys. Rev.*, 102:1030–1041, May 1956.
- [4] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 108:1175–1204, Dec 1957.
- [5] J. M. Luttinger. An exactly soluble model of a many-fermion system. *Journal of Mathematical Physics*, 4(9):1154–1162, 1963.
- [6] W. Kohn and J. M. Luttinger. New mechanism for superconductivity. *Phys. Rev. Lett.*, 15:524–526, Sep 1965.
- [7] L. J. Godbout, S. Tchoumakov, and W. Witczak-Krempa. Impurities in three-dimensional quadratic band-touching luttinger semimetals: Friedel and rkyk oscillations. *Phys. Rev. B*, 102:205202, Nov 2020.
- [8] S. Tchoumakov, L. J. Godbout, and W. Witczak-Krempa. Superconductivity from coulomb repulsion in three-dimensional quadratic band touching luttinger semimetals. *Phys. Rev. Research*, 2:013230, Feb 2020.
- [9] P. M. R. Brydon, Limin Wang, M. Weinert, and D. F. Agterberg. Pairing of  $j = 3/2$  fermions in half-Heusler superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 116:177001, Apr 2016.
- [10] E. I. Rashba and V. I. Sheka. Symmetry of energy bands in crystals of wurtzite type ii. symmetry of bands with spin-orbit interaction included. *Fiz. Tverd. Tela – Collected Papers (Leningrad)*, 2:162–176, 1959. English translation: Supplemental Material to the paper by G. Bihlmayer, O. Rader, and R. Winkler, Focus on the Rashba effect, *New J. Phys.* 17, 050202 (2015).
- [11] Shuichi Murakami, Naoto Nagosa, and Shou-Cheng Zhang. SU(2) non-abelian holonomy and dissipationless spin current in semiconductors. *Phys. Rev. B*, 69:235206, Jun 2004.
- [12] Lucile Savary, Jonathan Ruhman, Jörn W. F. Venderbos, Liang Fu, and Patrick A. Lee. Superconductivity in three-dimensional spin-orbit coupled semimetals. *Phys. Rev. B*, 96:214514, Dec 2017.
- [13] Bitan Roy, Sayed Ali Akbar Ghorashi, Matthew S. Foster, and Andriy H. Nevidomskyy. Topological superconductivity of spin-3/2 carriers in a three-dimensional doped luttinger semimetal. *Phys. Rev. B*, 99:054505, Feb 2019.
- [14] M. Bailyn and L. Liu. Simple treatment of the anomalous interband dielectric constant of zero-gap semiconductors. *Phys. Rev. B*, 10:759–766, Jul 1974.

- [15] J. G. Broerman. Random-phase-approximation dielectric function of  $\alpha$ -sn in the far infrared. *Phys. Rev. B*, 5:397–408, Jan 1972.
- [16] Igor Boettcher. Optical response of luttinger semimetals in the normal and superconducting states. *Phys. Rev. B*, 99:125146, Mar 2019.
- [17] S. Tchoumakov and W. Witczak-Krempa. Dielectric and electronic properties of three-dimensional luttinger semimetals with a quadratic band touching. *Phys. Rev. B*, 100:075104, Aug 2019.
- [18] Achille Mauri and Marco Polini. Dielectric function and plasmons of doped three-dimensional Luttinger semimetals. *arXiv e-prints*, page arXiv:1904.10825, Apr 2019.
- [19] Steven Groves and William Paul. Band structure of gray tin. *Phys. Rev. Lett.*, 11:194–196, Sep 1963.
- [20] Quentin Barbedienne, Julien Varignon, Nicolas Reyren, Alain Marty, Céline Vergnaud, Matthieu Jamet, Carmen Gomez-Carbonell, Aristide Lemaître, Patrick Le Fèvre, François Bertran, Amina Taleb-Ibrahimi, Henri Jaffrès, Jean-Marie George, and Albert Fert. Angular-resolved photoemission electron spectroscopy and transport studies of the elemental topological insulator  $\alpha$ -sn. *Phys. Rev. B*, 98:195445, Nov 2018.
- [21] Dongqin Zhang, Huaiqiang Wang, Jiawei Ruan, Ge Yao, and Haijun Zhang. Engineering topological phases in the luttinger semimetal  $\alpha$ -sn. *Phys. Rev. B*, 97:195139, May 2018.
- [22] Chenglong Shi, X. Xi, Zhipeng Hou, Xiaoming Zhang, G. Xu, Enke Liu, Wenquan Wang, Wenhong Wang, Jinglan Chen, and Guangheng Wu. Nmr investigation of atomic and electronic structures of half-Heusler topologically nontrivial semimetals. *physica status solidi (b)*, 252, 09 2014.
- [23] W. Al-Sawai, Hsin Lin, R. S. Markiewicz, L. A. Wray, Y. Xia, S.-Y. Xu, M. Z. Hasan, and A. Bansil. Topological electronic structure in half-Heusler topological insulators. *Phys. Rev. B*, 82:125208, Sep 2010.
- [24] Wanxiang Feng, Di Xiao, Ying Zhang, and Yugui Yao. Half-Heusler topological insulators: A first-principles study with the Tran-Blaha modified Becke-Johnson density functional. *Phys. Rev. B*, 82:235121, Dec 2010.
- [25] P. M. R. Brydon, Limin Wang, M. Weinert, and D. F. Agterberg. Pairing of  $j = 3/2$  fermions in half-Heusler superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 116:177001, Apr 2016.
- [26] F. F. Tafti, Takenori Fujii, A. Juneau-Fecteau, S. René de Cotret, N. Doiron-Leyraud, Atsushi Asamitsu, and Louis Taillefer. Superconductivity in the noncentrosymmetric half-Heusler compound LuPtBi: A candidate for topological superconductivity. *Phys. Rev. B*, 87:184504, May 2013.
- [27] Wenhong Wang, Yin Du, Guizhou Xu, Xiaoming Zhang, Enke Liu, Zhongyuan Liu, Youguo Shi, Jinglan Chen, Guangheng Wu, and Xi-xiang Zhang. Large linear magnetoresistance and Shubnikov-de Haas oscillations in single crystals of YPdBi Heusler topological insulators. *Scientific reports*, 3:2181, 2013.
- [28] Yasuyuki Nakajima, Rongwei Hu, Kevin Kirshenbaum, Alex Hughes, Paul Syers, Xiangfeng Wang, Ke-feng Wang, Renxiong Wang, Shanta R. Saha, Daniel Pratt, Jeffrey W. Lynn, and Johnpierre Paglione. Topological PdBi half-Heusler semimetals: A new family of noncentrosymmetric magnetic superconductors. *Science Advances*, 1(5), 2015.
- [29] A. T. Lonchakov, S. B. Bobin, V. V. Deryushkin, V. I. Okulov, T. E. Govorkova, and V. N. Neverov. Peculiar behavior of magnetoresistance in HgSe single crystal with low electron concentration. *Applied Physics Letters*, 112(8):082101, 2018.
- [30] S B Bobin, A T Lonchakov, V V Deryushkin, and V N Neverov. Nontrivial topology of bulk HgSe from the study of cyclotron effective mass, electron mobility and phase shift of Shubnikov-de Haas oscillations. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 31(11):115701, Jan 2019.

- [31] L. Śniadower, V. I. Ivanov-Omsky, and Z. Dziuba. Determination of the effective mass of electrons in hgte. *physica status solidi (b)*, 8(1):K43–K45, 1965.
- [32] J. Tsidilkovski. *Electron Spectrum of Gapless Semiconductors*. Springer Science & Business Media. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [33] Takeshi Kondo, M Nakayama, R Chen, JJ Ishikawa, E-G Moon, T Yamamoto, Y Ota, W Malaeb, H Kanai, Y Nakashima, et al. Quadratic fermi node in a 3d strongly correlated semimetal. *Nature communications*, 6(1):1–8, 2015.
- [34] Bing Cheng, T Ohtsuki, Dipanjan Chaudhuri, S Nakatsuji, Mikk Lippmaa, and NP Armitage. Dielectric anomalies and interactions in the three-dimensional quadratic band touching luttinger semimetal pr<sub>2</sub>ir<sub>2</sub>o<sub>7</sub>. *Nature communications*, 8(1):2097, 2017.
- [35] S. Y. Machida, H. Nakatsuji, T. Tonomura, T. Tayama, C. Sakakibara, J. van Duijn, and Y. Maeno Broholm. Crystalline electric field levels and magnetic properties of the metallic pyrochlore compound pr<sub>2</sub>ir<sub>2</sub>o<sub>7</sub>. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 66(8-9):1435–1437, 2005.
- [36] L. Balicas, S. Nakatsuji, Y. Machida, and S. Onoda. Anisotropic hysteretic hall effect and magnetic control of chiral domains in the chiral spin states of pr<sub>2</sub>ir<sub>2</sub>o<sub>7</sub>. *Phys. Rev. Lett.*, 106:217204, May 2011.
- [37] Taekoo Oh, Hiroaki Ishizuka, and Bohm-Jung Yang. Magnetic field induced topological semimetals near the quantum critical point of pyrochlore iridates. *Phys. Rev. B*, 98:144409, Oct 2018.
- [38] Dongqin Zhang, Huaqiang Wang, Jiawei Ruan, Ge Yao, and Haijun Zhang. Engineering topological phases in the luttinger semimetal  $\alpha$ -sn. *Phys. Rev. B*, 97:195139, May 2018.
- [39] C. Brüne, C. X. Liu, E. G. Novik, E. M. Hankiewicz, H. Buhmann, Y. L. Chen, X. L. Qi, Z. X. Shen, S. C. Zhang, and L. W. Molenkamp. Quantum hall effect from the topological surface states of strained bulk hgte. *Phys. Rev. Lett.*, 106:126803, Mar 2011.
- [40] P Baireuther, J A Hutasoit, J Tworzydło, and C W J Beenakker. Scattering theory of the chiral magnetic effect in a weyl semimetal: interplay of bulk weyl cones and surface fermi arcs. *New Journal of Physics*, 18(4):045009, apr 2016.
- [41] Sahal Kaushik, Dmitri E. Kharzeev, and Evan John Philip. Chiral magnetic photocurrent in dirac and weyl materials. *Phys. Rev. B*, 99:075150, Feb 2019.
- [42] A. L. Levy, A. B. Sushkov, Fengguang Liu, Bing Shen, Ni Ni, H. D. Drew, and G. S. Jenkins. Optical evidence of the chiral magnetic anomaly in the weyl semimetal taas. *Phys. Rev. B*, 101:125102, Mar 2020.
- [43] Ryo Okugawa and Shuichi Murakami. Dispersion of fermi arcs in weyl semimetals and their evolutions to dirac cones. *Phys. Rev. B*, 89:235315, Jun 2014.
- [44] Su-Yang Xu, Chang Liu, Satya K. Kushwaha, Raman Sankar, Jason W. Krizan, Ilya Belopolski, Madhab Neupane, Guang Bian, Nasser Alidoust, Tay-Rong Chang, Horng-Tay Jeng, Cheng-Yi Huang, Wei-Feng Tsai, Hsin Lin, Pavel P. Shibayev, Fang-Cheng Chou, Robert J. Cava, and M. Zahid Hasan. Observation of fermi arc surface states in a topological metal. *Science*, 347(6219):294–298, 2015.
- [45] Su-Yang Xu, Ilya Belopolski, Nasser Alidoust, Madhab Neupane, Guang Bian, Chenglong Zhang, Raman Sankar, Guoqing Chang, Zhujun Yuan, Chi-Cheng Lee, Shin-Ming Huang, Hao Zheng, Jie Ma, Daniel S. Sanchez, BaoKai Wang, Arun Bansil, Fangcheng Chou, Pavel P. Shibayev, Hsin Lin, Shuang Jia, and M. Zahid Hasan. Discovery of a weyl fermion semimetal and topological fermi arcs. *Science*, 349(6248):613–617, 2015.
- [46] D. T. Son and B. Z. Spivak. Chiral anomaly and classical negative magnetoresistance of weyl metals. *Phys. Rev. B*, 88:104412, Sep 2013.

- [47] Sangyun Lee, Jaekyung Jang, Sung-Il Kim, Soon-Gil Jung, Jihyun Kim, Suyeon Cho, Sung Wng Kim, Joo Yull Rhee, Kee-Su Park, and Tuson Park. Origin of extremely large magnetoresistance in the candidate type-ii weyl semimetal mote 2- x. *Scientific reports*, 8(1):1–8, 2018.
- [48] Ipsita Mandal Hermann Freire. Thermoelectric and thermal properties of the weakly disordered non-fermi liquid phase of luttinger semimetals. *Physics Letters A*, 407, 2021.
- [49] Ipsita Mandal and Hermann Freire. Transport in the non-fermi liquid phase of isotropic luttinger semimetals. *Phys. Rev. B*, 103:195116, May 2021.
- [50] András L. Szabó, Roderich Moessner, and Bitan Roy. Strain-engineered higher-order topological phases for spin- 32 luttinger fermions. *Physical Review B*, 101(12), Mar 2020.
- [51] András L. Szabó, Roderich Moessner, and Bitan Roy. Interacting spin- $\frac{3}{2}$  fermions in a luttinger semimetal: Competing phases and their selection in the global phase diagram. *Phys. Rev. B*, 103:165139, Apr 2021.
- [52] J. Friedel. Metallic alloys. *Il Nuovo Cimento (1955-1965)*, 7(2):287–311, Sep 1958.
- [53] G.F. Giuliani and G. Vignale. *Quantum Theory of the Elecron Liquid*. Cambridge University Press, 2005.
- [54] M. A. Ruderman and C. Kittel. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. *Phys. Rev.*, 96:99–102, October 1954.
- [55] Tadao Kasuya. A theory of metallic ferro- and antiferromagnetism on zener’s model. *Progress of Theoretical Physics*, 16(1):45–57, 07 1956.
- [56] Kei Yosida. Magnetic properties of cu-mn alloys. *Phys. Rev.*, 106:893–898, Jun 1957.
- [57] R.M. White. *Quantum theory of magnetism*. Springer series in solid-state sciences. Springer-Verlag, 1983.
- [58] G.D. Mahan. *Many Particle Physics: 3rd edition*. Physics of Solids and Liquids. Springer US, 2000.
- [59] Shi-Xiong Wang, Hao-Ran Chang, and Jianhui Zhou. Rkky interaction in three-dimensional electron gases with linear spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B*, 96:115204, Sep 2017.
- [60] Reza G. Mohammadi and Ali G. Moghaddam. Anisotropic rkky interactions mediated by  $j = \frac{3}{2}$  quasiparticles in half-heusler topological semimetals. *Phys. Rev. B*, 101:075421, Feb 2020.
- [61] Jin-Hua Sun, Dong-Hui Xu, Fu-Chun Zhang, and Yi Zhou. Magnetic impurity in a weyl semimetal. *Phys. Rev. B*, 92:195124, Nov 2015.
- [62] Hao-Ran Chang, Jianhui Zhou, Shi-Xiong Wang, Wen-Yu Shan, and Di Xiao. Rkky interaction of magnetic impurities in dirac and weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, 92:241103, Dec 2015.
- [63] Mir Vahid Hosseini and Mehdi Askari. Ruderman-kittel-kasuya-yosida interaction in weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, 92:224435, Dec 2015.
- [64] V. Kaladzhyan, A. A. Zyuzin, and P. Simon. Rkky interaction on the surface of three-dimensional dirac semimetals. *Phys. Rev. B*, 99:165302, Apr 2019.
- [65] Sayed Ali Akbar Ghorashi. Hybrid dispersion dirac semimetal and hybrid weyl phases in luttinger semimetals: A dynamical approach. *Annalen der Physik*, 532(2):1900336, 2020.
- [66] Sayed Ali Akbar Ghorashi, Pavan Hosur, and Chin-Sen Ting. Irradiated three-dimensional luttinger semimetal: A factory for engineering weyl semimetals. *Physical Review B*, 97(20), May 2018.
- [67] Chang Liu, Yongbin Lee, Takeshi Kondo, Eun deok Mun, Malinda Caudle, B. N. Harmon, Sergey L. Bud’ko, Paul C. Canfield, and Adam Kamiński. Metallic surface electronic state in half-heusler compounds r ptbi ( r = lu, dy, gd). *Physical Review B*, 83:205133, 2011.
- [68] Chandra Shekhar, Nitesh Kumar, V. Grinenko, Sanjay Singh, R. Sarkar, H. Luetkens, Shu-Chun Wu, Yang Zhang, Alexander C. Komarek, Erik Kampert, Yurii Skourski, Jochen Wosnitza, Walter Schnelle,

- Alix McCollam, Uli Zeitler, Jürgen Kübler, Binghai Yan, H.-H. Klauss, S. S. P. Parkin, and C. Felser. Anomalous hall effect in weyl semimetal half-Heusler compounds  $\text{RPtBi}$  ( $\text{R} = \text{Gd}$  and  $\text{Nd}$ ). *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 115(37):9140–9144, 2018.
- [69] SungBin Lee, Arun Paramakanti, and Yong Baek Kim. Rkky interactions and the anomalous hall effect in metallic rare-earth pyrochlores. *Phys. Rev. Lett.*, 111:196601, Nov 2013.
- [70] Xu-Ping Yao and Gang Chen.  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ : When Luttinger semimetal meets Melko-Hertog-Gingras spin ice state. *Phys. Rev. X*, 8:041039, Dec 2018.
- [71] Rebecca Flint and T. Senthil. Chiral Rkky interaction in  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ . *Phys. Rev. B*, 87:125147, Mar 2013.
- [72] E. Bustarret. Superconductivity in doped semiconductors. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 514:36 – 45, 2015.
- [73] Lilia Boeri, Jens Kortus, and O. K. Andersen. Three-dimensional  $\text{MgB}_2$ -type superconductivity in hole-doped diamond. *Phys. Rev. Lett.*, 93:237002, Nov 2004.
- [74] K.-W. Lee and W. E. Pickett. Superconductivity in boron-doped diamond. *Phys. Rev. Lett.*, 93:237003, Nov 2004.
- [75] Jesse Noffsinger, Feliciano Giustino, Steven G. Louie, and Marvin L. Cohen. Origin of superconductivity in boron-doped silicon carbide from first principles. *Phys. Rev. B*, 79:104511, Mar 2009.
- [76] Xiao Lin, German Bridoux, Adrien Gourgout, Gabriel Seyfarth, Steffen Krämer, Marc Nardone, Benoît Fauqué, and Kamran Behnia. Critical doping for the onset of a two-band superconducting ground state in  $\text{SrTiO}_{3-\delta}$ . *Phys. Rev. Lett.*, 112:207002, May 2014.
- [77] Lev P. Gor'kov. Back to mechanisms of superconductivity in low-doped strontium titanate, 2016.
- [78] Lev P. Gor'kov. Phonon mechanism in the most dilute superconductor n-type  $\text{SrTiO}_3$ . *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113(17):4646–4651, 2016.
- [79] Lisa Buchauer. Superconductivity and Fermi surface of  $\text{TlPtBi}$ , September 2014.
- [80] Markus Meinert. Unconventional superconductivity in  $\text{YPtBi}$  and related topological semimetals. *Phys. Rev. Lett.*, 116:137001, Apr 2016.
- [81] Y. Takada. Theory of superconductivity in polar semiconductors and its application to n-type semiconducting  $\text{SrTiO}_3$ . *Journal of the Physical Society of Japan*, 49(4):1267–1275, 1980.
- [82] Jonathan Ruhman and Patrick A. Lee. Pairing from dynamically screened Coulomb repulsion in bismuth. *Phys. Rev. B*, 96:235107, Dec 2017.
- [83] N. P. Butch, P. Syers, K. Kirshenbaum, A. P. Hope, and J. Paglione. Superconductivity in the topological semimetal  $\text{YPtBi}$ . *Phys. Rev. B*, 84:220504, Dec 2011.
- [84] T. V. Bay, T. Naka, Y. K. Huang, and A. de Visser. Superconductivity in noncentrosymmetric  $\text{YPtBi}$  under pressure. *Phys. Rev. B*, 86:064515, Aug 2012.
- [85] Chandra Shekhar, M. Nicklas, Ajaya K. Nayak, Siham Ouardi, W. Schnelle, Gerhard H. Fecher, Claudia Felser, and Keisuke Kobayashi. Electronic structure and nonsaturating magnetoresistance of superconducting Heusler topological insulators. *Journal of Applied Physics*, 113(17):17E142, 2013.
- [86] Orest Pavlosiuk, Dariusz Kaczorowski, and Piotr Wiśniewski. Superconductivity and Shubnikov-de Haas oscillations in the noncentrosymmetric half-Heusler compound  $\text{YPtBi}$ . *Phys. Rev. B*, 94:035130, Jul 2016.
- [87] C. F. Richardson and N. W. Ashcroft. Effective electron-electron interactions and the theory of superconductivity. *Phys. Rev. B*, 55:15130–15145, Jun 1997.
- [88] Yasutami Takada. s- and p-wave pairings in the dilute electron gas: Superconductivity mediated by the Coulomb hole in the vicinity of the Wigner-crystal phase. *Phys. Rev. B*, 47:5202–5211, Mar 1993.

- [89] Jonathan Ruhman and Patrick A. Lee. Superconductivity at very low density: The case of strontium titanate. *Phys. Rev. B*, 94:224515, Dec 2016.
- [90] GiBaik Sim, Archana Mishra, Moon Jip Park, Yong Baek Kim, Gil Young Cho, and SungBin Lee. Topological  $d + s$  wave superconductors in a multiorbital quadratic band touching system. *Phys. Rev. B*, 100:064509, Aug 2019.
- [91] Igor Boettcher and Igor F. Herbut. Superconducting quantum criticality in three-dimensional luttinger semimetals. *Phys. Rev. B*, 93:205138, May 2016.
- [92] Jiabin Yu and Chao-Xing Liu. Singlet-quintet mixing in spin-orbit coupled superconductors with  $j = \frac{3}{2}$  fermions. *Phys. Rev. B*, 98:104514, Sep 2018.
- [93] Igor Boettcher and Igor F. Herbut. Unconventional superconductivity in luttinger semimetals: Theory of complex tensor order and the emergence of the uniaxial nematic state. *Phys. Rev. Lett.*, 120:057002, Feb 2018.
- [94] Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 8 edition, 2004.
- [95] Jens Lindhard. On the properties of charged particles. *Kgl. Danske Videnskab. Selskab Mat.-fys. Medd.*, 28(8), 1954.
- [96] L. H. Thomas. The calculation of atomic fields. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 23(5):542–548, 1927.
- [97] Enrico Fermi. Un metodo statistico per la determinazione di alcune prioprietà dell’atomo. *Rendiconti Accademia Dei Lincei*, 6:602–607, 1927.
- [98] Stefan A. Maier. *Plasmonics: Fundamentals and Applications*. 2007.
- [99] H. Ehrenreich and M. H. Cohen. Self-consistent field approach to the many-electron problem. *Phys. Rev.*, 115:786–790, Aug 1959.
- [100] G. M. Eliashberg. Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor. *Zh. Eksp. Teor. Fiz*, 38:696–702, 1960.
- [101] H.K Onnes. The superconductivity of mercury. *Comm. Phys. Lab. Univ., Leiden*, 119b:122–124, 1911.
- [102] R. Meissner, W. & Ochsenfeld. Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit. *Die Naturwissenschaften*, 21:787–788, 1933.
- [103] F. London, H. London, and Frederick Alexander Lindemann. The electromagnetic equations of the supraconductor. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences*, 149(866):71–88, 1935.
- [104] V. L. Ginzburg and L. D. Landau. *On the Theory of Superconductivity*, pages 113–137. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2009.
- [105] E. Maxwell. Isotope effect in the superconductivity of mercury. *Physical Review*, 78:477, 1950.
- [106] C. A. *et al.* Reynold. Superconductivity of isotopes of mercury. *Physical Review*, 78:487, 1950.
- [107] Leon N. Cooper. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Phys. Rev.*, 104:1189–1190, 1956.
- [108] P. Morel and P. W. Anderson. Calculation of the superconducting state parameters with retarded electron-phonon interaction. *Phys. Rev.*, 125:1263–1271, Feb 1962.
- [109] W. L. McMillan. Transition temperature of strong-coupled superconductors. *Phys. Rev.*, 167:331–344, Mar 1968.
- [110] P. B. Allen and R. C. Dynes. Transition temperature of strong-coupled superconductors reanalyzed. *Phys. Rev. B*, 12:905–922, Aug 1975.
- [111] G. Bergmann and D. Rainer. The sensitivity of the transition temperature to changes in  $\alpha^2 f(\omega)$ . *Z. Physik*, 263:59–63, 1973.

- [112] Yasutami Takada. Plasmon mechanism of superconductivity in the multivalley electron gas. *Journal of the Physical Society of Japan*, 61(1):238–253, 1992.
- [113] Shuichi Murakami, Naoto Nagosa, and Shou-Cheng Zhang. SU(2) non-abelian holonomy and dissipationless spin current in semiconductors. *Phys. Rev. B*, 69:235206, Jun 2004.
- [114] P. D. Kurilovich, V. D. Kurilovich, and I. S. Burmistrov. Indirect exchange interaction between magnetic impurities in the two-dimensional topological insulator based on cdte/hgte/cdte quantum wells. *Phys. Rev. B*, 94:155408, Oct 2016.
- [115] V. D. Kurilovich, P. D. Kurilovich, and I. S. Burmistrov. Indirect exchange interaction between magnetic impurities near the helical edge. *Phys. Rev. B*, 95:115430, Mar 2017.
- [116] E. H. Hwang and S. Das Sarma. Screening, kohn anomaly, friedel oscillation, and rkky interaction in bilayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 101:156802, Oct 2008.
- [117] Min Lv and Shou-Cheng Zhang. Dielectric function, friedel oscillations and plasmons in weyl semimetals. *International Journal of Modern Physics B*, 27(25):1350177, 2013.
- [118] Jun-Won Rhim and Yong Baek Kim. Anisotropic density fluctuations, plasmons, and friedel oscillations in nodal line semimetal. *New Journal of Physics*, 18(4):043010, 2016.
- [119] A. Kundu and S. Zhang. Temperature dependence of rkky interaction. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 393:331 – 333, 2015.
- [120] Eun Kyung Lee, Eok Kyun Lee, and Soonchil Lee. Temperature-dependent RKKY interaction in one dimension. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 6(5):1037–1046, jan 1994.
- [121] Mir Vahid Hosseini and Mehdi Askari. Ruderman-kittel-kasuya-yosida interaction in weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, 92:224435, Dec 2015.
- [122] Sonu Verma, Arijit Kundu, and Tarun Kanti Ghosh. Rkky interaction in mn-doped  $4 \times 4$  luttinger systems. *Journal of Applied Physics*, 125(23):233903, Jun 2019.
- [123] S. Nakatsuji, Y. Machida, Y. Maeno, T. Tayama, T. Sakakibara, J. van Duijn, L. Balicas, J. N. Millican, R. T. Macaluso, and Julia Y. Chan. Metallic spin-liquid behavior of the geometrically frustrated kondo lattice  $\text{pr}_2\text{ir}_2\text{o}_7$ . *Phys. Rev. Lett.*, 96:087204, Mar 2006.
- [124] Dongqin Zhang, Huaiqiang Wang, Jiawei Ruan, Ge Yao, and Haijun Zhang. Engineering topological phases in the luttinger semimetal  $\alpha\text{-sn}$ . *Phys. Rev. B*, 97:195139, May 2018.
- [125] Achille Mauri and Marco Polini. Dielectric function and plasmons of doped three-dimensional luttinger semimetals. *Phys. Rev. B*, 100:165115, Oct 2019.
- [126] Sayandip Ghosh and Carsten Timm. Charge-spin response and collective excitations in weyl semimetals. *Phys. Rev. B*, 99:075104, Feb 2019.
- [127] Hiroshi Imamura, Patrick Bruno, and Yasuhiro Utsumi. Twisted exchange interaction between localized spins embedded in a one- or two-dimensional electron gas with rashba spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B*, 69:121303, Mar 2004.
- [128] The 3D Fourier transform of  $F(\mathbf{q}) = q$  in real space is  $f(r) = -2/r^4$ .
- [129] Mikito Koshino and Intan Fatimah Hizbullah. Magnetic susceptibility in three-dimensional nodal semimetals. *Phys. Rev. B*, 93:045201, Jan 2016.
- [130] Bing Cheng, T Ohtsuki, Dipanjan Chaudhuri, S Nakatsuji, Mikk Lippmaa, and NP Armitage. Dielectric anomalies and interactions in the three-dimensional quadratic band touching luttinger semimetal  $\text{pr}_2\text{ir}_2\text{o}_7$ . *Nature communications*, 8(1):2097, 2017.
- [131] Hiroshi Takatsu, Kunihiko Watanabe, Kazuki Goto, and Hiroaki Kadowaki. Comparative study of low-temperature x-ray diffraction experiments on  $R_2\text{ir}_2\text{o}_7$  ( $r = \text{Nd, eu, and pr}$ ). *Phys. Rev. B*, 90:235110, Dec 2014.

- [132] Ohtsuki Cheng, B. and D. T., Chaudhuri. Dielectric anomalies and interactions in the three-dimensional quadratic band touching luttinger semimetal  $\text{pr}_2\text{ir}_2\text{o}_7$ . *Nat comun*, 8, 2017.
- [133] W. Wang, Y. Du, and G. Xu. Large linear magnetoresistance and shubnikov-de hass oscillations in single crystals of  $\text{ypdbi}$  heusler topological insulators. *Sci Rep* 3, 2013.
- [134] Orest Pavlosiuk, Dariusz Kaczorowski, and Piotr Wiśniewski. Shubnikov-de haas oscillations, weak antilocalization effect and large linear magnetoresistance in the putative topological superconductor  $\text{lupdbi}$ . *Scientific reports*, 5:9158, 2015.
- [135] Serguei Tchoumakov, Louis J. Godbout, and William Witczak-Krempa. Interplay of coulomb repulsion and spin-orbit coupling in superconducting 3d quadratic band touching luttinger semimetals. 2019.
- [136] William Witczak-Krempa, Gang Chen, Yong Baek Kim, and Leon Balents. Correlated quantum phenomena in the strong spin-orbit regime. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 5(1):57–82, 2014.
- [137] George E. Simion and Gabriele F. Giuliani. Friedel oscillations in a fermi liquid. *Phys. Rev. B*, 72:045127, Jul 2005.
- [138] Rahul M. Nandkishore and S. A. Parameswaran. Disorder-driven destruction of a non-fermi liquid semimetal studied by renormalization group analysis. *Phys. Rev. B*, 95:205106, May 2017.
- [139] Ipsita Mandal and Rahul M. Nandkishore. Interplay of coulomb interactions and disorder in three-dimensional quadratic band crossings without time-reversal symmetry and with unequal masses for conduction and valence bands. *Physical Review B*, 97(12), Mar 2018.
- [140] Maxim Kharitonov, Julian-Benedikt Mayer, and Ewelina M. Hankiewicz. Universality and stability of the edge states of chiral-symmetric topological semimetals and surface states of the luttinger semimetal. *Phys. Rev. Lett.*, 119:266402, Dec 2017.
- [141] J. Schliemann. Dielectric function of the semiconductor hole gas. *EPL (Europhysics Letters)*, 91(6):67004, sep 2010.
- [142] Maxim Kharitonov, Julian-Benedikt Mayer, and Ewelina M. Hankiewicz. Universality and stability of the edge states of chiral-symmetric topological semimetals and surface states of the luttinger semimetal. *Phys. Rev. Lett.*, 119:266402, Dec 2017.
- [143] Eun-Gook Moon, Cenke Xu, Yong Baek Kim, and Leon Balents. Non-fermi-liquid and topological states with strong spin-orbit coupling. *Phys. Rev. Lett.*, 111:206401, Nov 2013.
- [144] A Abrikosov. Calculation of critical indices for zero-gap semiconductors. *JETP*, 39:709, 1974.
- [145] AA Abrikosov and Beneslavskiĭ. Possible existence of substances intermediate between metals and dielectrics. 32:699, 1971.
- [146] William Witczak-Krempa, Gang Chen, Yong Baek Kim, and Leon Balents. Correlated quantum phenomena in the strong spin-orbit regime. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 5(1):57–82, 2014.
- [147] Saurabh Maiti and Andrey V. Chubukov. Superconductivity from repulsive interaction. *AIP Conference Proceedings*, 1550(1):3–73, 2013.
- [148] G Bergmann and D Rainer. The sensitivity of the transition temperature to changes in  $\alpha^2 f(\omega)$ . *Zeitschrift für Physik*, 263(1):59–68, 1973.
- [149] P. B. Allen and R. C. Dynes. Transition temperature of strong-coupled superconductors reanalyzed. *Phys. Rev. B*, 12:905–922, Aug 1975.
- [150] N. Rösch. Time-reversal symmetry, kramers’ degeneracy and the algebraic eigenvalue problem. *Chemical Physics*, 80(1):1 – 5, 1983.

- [151] H. Rietschel and L. J. Sham. Role of electron coulomb interaction in superconductivity. *Phys. Rev. B*, 28:5100–5108, Nov 1983.
- [152] T. Hanaguri, S. Niitaka, K. Kuroki, and H. Takagi. Unconventional s-Wave Superconductivity in Fe(Se,Te). *Science*, 328(5977):474, Apr 2010.
- [153] P. O. Sprau, A. Kostin, A. Kreisel, A. E. Böhrer, V. Taufour, P. C. Canfield, S. Mukherjee, P. J. Hirschfeld, B. M. Andersen, and J. C. Séamus Davis. Discovery of orbital-selective cooper pairing in fese. *Science*, 357(6346):75–80, Jul 2017.
- [154] R. H. Lyddane, R. G. Sachs, and E. Teller. On the polar vibrations of alkali halides. *Phys. Rev.*, 59:673–676, Apr 1941.
- [155] G. Gladstone, M. A. Jensen, and J.R. Schrieffer. *Superconductivity*, 2:665, 1969.
- [156] We use  $(\epsilon_0 - \epsilon_\infty)/\epsilon_\infty = 15$  and  $\omega_T = 400$  K from Refs. [ **86, 184, 185**].
- [157] C R Leavens. Important parameters in strong-coupling superconductivity. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 7(9):1911–1922, sep 1977.
- [158] John J. Quinn and Richard A. Ferrell. Electron self-energy approach to correlation in a degenerate electron gas. *Phys. Rev.*, 112:812–827, Nov 1958.
- [159] Seongjin Ahn, EH Hwang, and Hongki Min. Collective modes in multi-weyl semimetals. *Scientific reports*, 6:34023, 2016.
- [160] Hyunsoo Kim, Kefeng Wang, Yasuyuki Nakajima, Rongwei Hu, Steven Ziemak, Paul Syers, Limin Wang, Halyna Hodovanets, Jonathan D. Denlinger, Philip M. R. Brydon, Daniel F. Agterberg, Makariy A. Tanatar, Ruslan Prozorov, and Johnpierre Paglione. Beyond triplet: Unconventional superconductivity in a spin-3/2 topological semimetal. 4(4), 2018.
- [161] T.V. Bay, M. Jackson, C. Paulsen, C. Baines, A. Amato, T. Orvis, M.C. Aronson, Y.K. Huang, and A. de Visser. Low field magnetic response of the non-centrosymmetric superconductor yptbi. *Solid State Communications*, 183:13 – 17, 2014.
- [162] E. Helfand and N. R. Werthamer. Temperature and purity dependence of the superconducting critical field,  $H_{c2}$ . ii. *Phys. Rev.*, 147:288–294, Jul 1966.
- [163] K. Scharnberg and R. A. Klemm.  $p$ -wave superconductors in magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 22:5233–5244, Dec 1980.
- [164] E. Langmann. Theory of the upper critical magnetic field without local approximation. *Physica C: Superconductivity*, 159(5):561 – 569, 1989.
- [165] Takeshi Kondo, M Nakayama, R Chen, JJ Ishikawa, E-G Moon, T Yamamoto, Y Ota, W Malaeb, H Kanai, Y Nakashima, et al. Quadratic fermi node in a 3d strongly correlated semimetal. *Nature communications*, 6:10042, 2015.
- [166] Yo Machida, Satoru Nakatsuji, Shigeki Onoda, Takashi Tayama, and Toshiro Sakakibara. Time-reversal symmetry breaking and spontaneous hall effect without magnetic dipole order. *Nature*, 463(7278):210, 2010.
- [167] Lukas Janssen and Igor F. Herbut. Phase diagram of electronic systems with quadratic fermi nodes in  $2lt; dlt; 4$ :  $2 + \epsilon$  expansion,  $4 - \epsilon$  expansion, and functional renormalization group. *Phys. Rev. B*, 95:075101, Feb 2017.
- [168] G. Rickayzen. *Theory of superconductivity*. Number vol. 14 in Interscience monographs and texts in physics and astronomy. Interscience Publishers, 1965.
- [169] Yasutami Takada. Consideration of the mechanism of superconductivity in fullerenes: Beyond migdal’s theorem and the dynamic coulomb effect. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 54(12):1779 – 1788, 1993.

- [170] P. Morel and P. W. Anderson. Calculation of the superconducting state parameters with retarded electron-phonon interaction. *Phys. Rev.*, 125:1263–1271, Feb 1962.
- [171] W. L. McMillan. Transition temperature of strong-coupled superconductors. *Phys. Rev.*, 167:331–344, Mar 1968.
- [172] Kazuhiro Sano, Mithuki Seo, and Kohji Nakamura. Plasmon effect on the coulomb pseudopotential \* in the mcmillan equation. *Journal of the Physical Society of Japan*, 88(9):093703, 2019.
- [173] T. Klein, P. Achatz, J. Kacmarcik, C. Marcenat, F. Gustafsson, J. Marcus, E. Bustarret, J. Pernot, F. Omnes, Bo E. Sernelius, C. Persson, A. Ferreira da Silva, and C. Cytermann. Metal-insulator transition and superconductivity in boron-doped diamond. *Phys. Rev. B*, 75:165313, Apr 2007.
- [174] P. Vashishta and K. S. Singwi. Electron correlations at metallic densities. v. *Phys. Rev. B*, 6:875–887, Aug 1972.
- [175] Flavio Toigo and Truman O. Woodruff. Calculation of the dielectric function for a degenerate electron gas with interactions. i. static limit. *Phys. Rev. B*, 2:3958–3966, Nov 1970.
- [176] Flavio Toigo and Truman O. Woodruff. Calculation of the dielectric function for a degenerate electron gas with interaction. ii. frequency dependence. *Phys. Rev. B*, 4:4312–4315, Dec 1971.
- [177] Carl A. Kukkonen and A. W. Overhauser. Electron-electron interaction in simple metals. *Phys. Rev. B*, 20:550–557, Jul 1979.
- [178] AB Migdal. Interaction between electrons and lattice vibrations in a normal metal. *Sov. Phys. JETP*, 7(6):996–1001, 1958.
- [179] M. Grabowski and L. J. Sham. Superconductivity from nonphonon interactions. *Phys. Rev. B*, 29:6132–6142, Jun 1984.
- [180] M. Grabowski and L. J. Sham. Erratum: Superconductivity from nonphonon interactions. *Phys. Rev. B*, 37:3726–3726, Mar 1988.
- [181] T. Büche and H. Rietschel. Superconductivity in the homogeneous electron gas: Exchange and correlation effects. *Phys. Rev. B*, 41:8691–8697, May 1990.
- [182] Yasutami Takada. Insignificance of vertex corrections in the plasmon mechanism of superconductivity at low electron concentration: Migdal’s theorem in the antiadiabatic region. *Journal of the Physical Society of Japan*, 61(11):3849–3852, 1992.
- [183] Serguei Tchoumakov, Louis J. Godbout, and William Witczak-Krempa. Interplay of coulomb repulsion and spin-orbit coupling in superconducting 3d quadratic band touching luttinger semimetals. <http://arxiv.org/abs/1911.03712>, 2019.
- [184] Anindya Roy, Joseph W. Bennett, Karin M. Rabe, and David Vanderbilt. Half-heusler semiconductors as piezoelectrics. *Phys. Rev. Lett.*, 109:037602, Jul 2012.
- [185] P. G. Pagliuso, C. Rettori, M. E. Torelli, G. B. Martins, Z. Fisk, J. L. Sarrao, M. F. Hundley, and S. B. Oseroff. Crystal-field study in rare-earth-doped semiconducting ybip. *Phys. Rev. B*, 60:4176–4180, Aug 1999.