



BOSONS DE SPIN-1/2 ET 1 SUR RÉSEAUX OPTIQUES EN UNE ET DEUX DIMENSIONS

Laurent De Forges de Parny

► **To cite this version:**

Laurent De Forges de Parny. BOSONS DE SPIN-1/2 ET 1 SUR RÉSEAUX OPTIQUES EN UNE ET DEUX DIMENSIONS. *Gaz Quantiques [cond-mat.quant-gas]*. Université Nice Sophia Antipolis, 2012. Français. <tel-00940582>

HAL Id: tel-00940582

<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00940582>

Submitted on 1 Feb 2014

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

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

UNIVERSITÉ DE NICE SOPHIA ANTIPOLIS - UFR Sciences

École doctorale des Sciences Fondamentales et Appliquées

THÈSE

pour obtenir le titre de
Docteur en Sciences
de l'Université de Nice Sophia Antipolis

Discipline: Physique Statistique

présentée et soutenue par
Laurent de FORGES de PARNY

BOSONS DE SPIN- $1/2$ ET 1 SUR RÉSEAUX OPTIQUES EN UNE ET DEUX DIMENSIONS

Thèse dirigée par George G. BATROUNI
soutenue à l'Institut Non Linéaire de Nice le 14 novembre 2012

Jury:

Mme	VIGNOLO Patrizia	Professeur	Présidente
Mme	LHUILIER Claire	Professeur Émérite	Rapporteur
M.	MILA Frédéric	Professeur	Rapporteur
M.	LAFLORENCIE Nicolas	Chargé de Recherches	Examineur
M.	HEBERT Frédéric	Maître de Conférences	Examineur
M.	BATROUNI George G.	Professeur	Directeur

*Le commencement de toutes les sciences,
c'est l'étonnement de ce que les choses sont ce qu'elles sont.*

Aristote

Remerciements

Cette thèse est le résultat d'un effort constant, effort qui n'aurait pu aboutir sans la contribution d'un certain nombre de personnes. Ainsi se présente l'occasion de les remercier.

Mes premières pensées sont pour mes parents et mes grand-parents qui m'ont sensibilisé à la connaissance et qui ont contribué à l'éveil de ma curiosité. Je remercie mon père et ma mère pour avoir fait preuve de tolérance à mon égard lorsque, enfant, je démontais et détruisais ce qui m'intriguait et semblait contenir un « mécanisme caché » intéressant. Je pense que ces expériences ont grandement contribué à mon intérêt actuel pour la Physique. Le bricolage et les soudures que je pratiquais tout jeune avec mon père m'ont, sans doute, amené à penser qu'il existe des mécanismes sous-jacents aux phénomènes qui nous entourent. Je remercie mon grand-père pour m'avoir donné goût à la connaissance générale et pour m'avoir permis de comprendre que le savoir se transmet sans se perdre. Comme le cite Léonard Nimoy: "Plus on partage, plus on possède. Voilà le miracle". Les discussions avec mon oncle Charles sur l'infiniment grand et sur l'infiniment petit ont nourri chez moi une certaine fascination. Je pense qu'il fut le premier à me parler de phases quantiques, que j'ai fini par étudier dans cette thèse. Merci Charles et Sylvie d'être venus assister à ma soutenance de thèse. Je remercie ma grand-mère et ma sœur Alice pour leur soutien constant et inconditionnel et je remercie affectueusement les autres membres de ma famille, qui chacun à sa façon m'a aidé. Je souhaite aussi remercier Eric pour avoir permis à ma sœur d'effectuer le trajet Montréal-Nice afin d'être présente le jour de ma soutenance. Enfin, un grand Merci à ma fiancée Solenne !

J'ai une pensée particulière pour ma période difficile, durant mon adolescence, où mon désintérêt pour l'école m'a mis en échec scolaire. Je pense à la majorité de mes professeurs au collège qui ont presque réussi à me faire croire que j'étais réellement un bon à rien et un incapable, me poussant à développer une certaine forme d'insolence à leur égard et accumulant des blâmes jusqu'à ma déscolarisation. Bien que cette thèse soit le fruit de mon travail, de mon intérêt et de ma fascination pour la Physique, j'avoue que l'aboutissement de ce travail est aussi une revanche sur ce système qui a bien failli me convaincre et me vaincre. Je dédie ces quelques lignes à certains de mes professeurs, bien que peu nombreux, doués d'un minimum de discernement et d'objectivité, qui m'ont simplement reconnu comme un élève désintéressé mais capable. Pendant cette période, durant laquelle je triplais ma classe de troisième, j'ai bénéficié d'un soutien moral de la part de vrais amis: Noam, Sébastien (*alias Kevin Jonson*), Tony, Gabi, et les Stéphanies, je vous remercie.

Suite à cette période difficile, j'ai intégré le lycée Honoré d'Estienne d'Orves à Nice, lycée qui m'a donné une chance que j'ai su saisir. Durant ces années, j'ai progressivement découvert la fierté et la satisfaction intellectuelle de récolter les bénéfices de mon travail. Je pense d'ailleurs que, depuis ce moment, je n'ai jamais cessé de prendre du plaisir en travaillant, chose qui me paraissait invraisemblable auparavant ! A cette période de ma vie, j'ai croisé le chemin de professeurs qui ont su m'encourager dans mes efforts et auxquels je dois beaucoup. Mesdames Ghibaud, Abolin, Chazottes et Lacour, ainsi que Messieurs Chareyron, Soléan et Perbost je vous adresse mes sincères remerciements.

Par la suite, durant mes années à l'Université, ma passion pour la Physique n'a cessé de s'accroître. J'ai découvert, avec stupéfaction, l'extraordinaire capacité que nous possédons pour décrire les phénomènes de la nature. Merci Jean-Pierre Romagnan pour tes enseignements qui m'ont, d'une part, confirmé que mon choix d'orientation était le bon et qui, d'autre part, m'ont donné l'envie de transmettre la passion de la Physique avec autant de pédagogie et d'enthousiasme. Dès ma première année à l'Université, j'ai aussi croisé le chemin d'un pédagogue hors pair, Frédéric Hébert, que je considère désormais comme un ami et qui me permet, aujourd'hui encore, d'évoluer dans ce vaste domaine qu'est la Physique. Durant cette année, j'ai aussi fait la connaissance de Fabrice Mortessagne, aujourd'hui directeur du Laboratoire de la Physique de la Matière Condensée (LPMC) à Nice. À la fin de ma première année de fac, Fabrice m'a ouvert les portes du LPMC et m'a permis de découvrir, à mon niveau, le monde de la recherche. Je souhaite te remercier pour ce geste, mais pas seulement ... Je te remercie surtout de m'avoir accueilli chaleureusement dans ton équipe pour effectuer mon stage de recherche de Master 2 et de m'avoir permis de finir mon Master dans d'excellentes conditions. Je remercie d'ailleurs tout le LPMC pour son accueil.

Ceci m'amène en thèse à l'Institut Non Linéaire de Nice (INLN). J'ai découvert la physique statistique en troisième année de Licence avec George Batrouni et Frédéric Hébert. De tous les domaines de la Physique, la physique statistique est celui qui m'a le plus plu. L'idée de pouvoir comprendre les propriétés de la matière en étudiant le comportement collectif d'éléments microscopiques m'a toujours stupéfié. Je pense que George et Fred ont su me donner goût à la physique statistique à travers leurs enseignements. Je les remercie particulièrement pour m'avoir proposé d'approfondir mes connaissances en thèse avec eux et pour m'avoir encadré sérieusement tout au long de ces trois années de thèse.

Je remercie aussi mes amis de tous horizons: Olivier, Carine, Pascale, Nathalie, Isabelle, Alphonse, Rémi, Maël, Fred, Romain, Benjamin et Carlo Andolfi Sensei, ainsi que mes amis thésards du labo pour les nombreux bons moments passés ensemble: Louis, Quentin, Marta, Margherita, Axel, Jean-François, Maryvonne, Florence, Tom, Nicolas, Lauris, Ardavan, Dong ... Je remercie l'Institut Non Linéaire de Nice et ses directeurs successifs, Jorge Tredicce et Jean-Marc Gambaudo, pour leur accueil chaleureux.

Mes derniers remerciements sont adressés à mes rapporteurs Claire Lhuillier et Frédéric Mila qui ont pris le temps de juger mon travail. La version finale de ce mémoire a bénéficié de leur lecture très attentive et de leurs remarques précieuses. Je tiens aussi à remercier Patrizia Vignolo d'avoir accepté d'être présidente du jury, ainsi que Nicolas Lafflorencie pour son soutien. Un grand merci à vous !

Table des matières

Remerciements	v
Introduction	1

I Atomes ultrafroids et bosons sur réseaux

Chapitre 1 Atomes ultrafroids ou simulateurs quantiques	7
1.1 Condensation de Bose-Einstein	7
1.2 Refroidissement et piégeage des atomes	9
Chapitre 2 Le modèle de Bose-Hubbard	15
2.1 Hamiltonien pour bosons sur réseau optique	15
2.2 Phases isolantes de Mott et phase superfluide	17

II Hamiltoniens et outils numériques

Chapitre 3 Hamiltoniens de Bose-Hubbard pour bosons de spin-1 et 1/2	25
3.1 Modèle de bosons de spin-1	25
3.2 Modèle à deux états de spins ou « bosons de spin-1/2 »	29
3.3 Hamiltoniens simplifiés : théorie du champ moyen	34

Chapitre 4 Un algorithme pour mélanges de bosons sur réseaux	39
4.1 Intégrales de chemins en temps imaginaire	39
4.2 Mélanges avec conversions: algorithme des Fonctions de Green Stochastiques	43

III Bosons de spin-1/2 sur réseaux optiques

Chapitre 5 Bosons de spin-1/2 sur réseau 1D	49
5.1 Analyse en champ moyen à température nulle	50
5.1.1 Comment obtenir le diagramme de phase?	50
5.1.2 Mélange sans conversion du spin: $U_2/U_0 = 0$	52
5.1.3 Mélange avec conversions du spin : $U_2/U_0 < 0$	56
5.1.4 Mélange avec conversions du spin : $U_2/U_0 > 0$	62
5.2 Analyse exacte: Monte Carlo quantique à température nulle	69
5.2.1 Comment obtenir le diagramme de phase?	70
5.2.2 Mélange sans conversion du spin et limite de température nulle	73
5.2.3 Mélange avec conversions du spin : $U_2/U_0 < 0$	83
5.2.4 Mélange avec conversions du spin : $U_2/U_0 > 0$	91
5.3 Conclusion du Chapitre 5: bosons de spin-1/2 sur réseau 1D	102
Chapitre 6 Bosons de spin-1/2 sur réseau 2D	105
6.1 Étude à température nulle	105
6.1.1 Cas $U_2/U_0 < 0$: ordre ferromagnétique de type Ising	106
6.1.2 Cas $U_2/U_0 > 0$: polarisation et transitions du premier ordre	111
6.1.3 Conclusion de la Section 6.1: étude 2D à température nulle	118
6.2 Influence des effets thermiques	120
6.2.1 Cas $U_2/U_0 > 0$: quasi-polarisation et disparition du premier ordre	120
6.2.2 Brève discussion du cas $U_2/U_0 < 0$	132
6.2.3 Conclusion de la Section 6.2: étude 2D à température finie	136

IV Bosons de spin-1 sur réseau optique 2D à température nulle

Chapitre 7 Étude en champ moyen	141
7.1 Diagramme de phase et quantités physiques mesurées	141
7.2 Mélange sans conversion du spin: $U_2/U_0 = 0$	142
7.3 Interaction ferromagnétique: $U_2/U_0 < 0$	146
7.4 Interaction antiferromagnétique: $U_2/U_0 > 0$	150
7.5 Conclusion du Chapitre 7: étude des bosons de spin-1 en champ moyen	156
Chapitre 8 Étude en Monte Carlo quantique	157
8.1 Diagramme de phase et quantités physiques mesurées	157
8.2 Interaction ferromagnétique: $U_2/U_0 < 0$	162
8.3 Interaction antiferromagnétique: $U_2/U_0 > 0$	170
8.4 Conclusion du Chapitre 8: étude des bosons de spin-1 en Monte Carlo quantique	184
Conclusion	187
Bibliographie	191

Introduction

Cette thèse est le fruit de trois années de recherches. Le sujet traité dans cette thèse est un sujet émergent dans le domaine de la physique des très basses températures. La technologie actuelle nous permet de piéger des atomes (fermions et/ou bosons) par des faisceaux lasers et nous permet de contrôler leurs interactions à une température de l'ordre du nanokelvin. Il est donc possible de contraindre les atomes piégés à adopter différentes phases compressibles, liquide ou superfluide par exemple, ou incompressibles (phases de Mott). La température extrêmement proche du zéro absolu autorise les effets quantiques à apparaître. Les phases adoptées par les atomes présentent donc des particularités extraordinaires dans le sens où elles n'apparaissent pas dans les conditions thermodynamiques quotidiennes et sont appelées « phases quantiques ». De tels pièges, ou simulateurs quantiques [1], rendent possible l'étude de phases quantiques de la matière condensée, autrement difficile à produire expérimentalement, ainsi que l'étude des transitions entre ces phases [2, 3].

L'apparition récente de pièges purement optiques sans champ magnétique a ouvert de nouvelles perspectives dans l'étude du magnétisme quantique. À l'inverse des pièges nécessitant un champ magnétique, tel que le piège magnéto-optique, les réseaux optiques permettent de piéger des particules sur un réseau sans figer le degré de liberté de leur moment cinétique, ou « spin ». La problématique de cette thèse est d'étudier l'influence du degré de liberté du spin des atomes dans des phases quantiques, telles que la phase superfluide, la phase condensée de Bose-Einstein et les phases isolantes de Mott. Le système peut-il spontanément adopter un ordre magnétique ? Existe-t-il différents arrangements magnétiques au sein d'une même phase ? La transition magnétique « nématique - singulet » du premier ordre, prédite théoriquement dans la phase isolante de Mott de densité deux [4, 5], est-elle observée ? Les transitions de phases sont-elles affectées par le degré de liberté du spin ?

Comme nous le verrons dans cette thèse, le système peut effectivement spontanément adopter un ordre magnétique, ce qui ajoute une richesse supplémentaire aux phases quantiques déjà connues. L'ordre des transitions de phases est lui aussi parfois affecté par le degré de liberté du spin des atomes. De plus, le contrôle des interactions *via* les résonances de Feshbach optiques permet la conversion du moment cinétique des atomes. Ces résonances permettent, d'une part, de contrôler à notre guise les interactions magnétiques entre les atomes et d'autre part d'introduire des conversions entre les différentes espèces de bosons piégés. Ces conversions vont introduire un ordre de complexité supérieur aux systèmes de bosons mixtes et seront à l'origine de l'équilibre ou de la polarisation des populations.

Les systèmes de particules fortement corrélées sont activement étudiés expérimentalement et théoriquement à 1D et 2D, dimensions pour lesquelles les fluctuations quantiques sont importantes. Cependant, ces études présentent des inconvénients majeurs: expérimentalement, le coût en matériel et en temps est élevé et, théoriquement, les résultats exacts sont très peu nombreux et beaucoup d'approximations sont utilisées. Dans ces circonstances, l'utilisation de méthodes numériques exactes, telles que la méthode de Monte Carlo quantique, représente une alternative précieuse et peut s'avérer d'une grande importance pour les expérimentateurs désireux d'effectuer de nouvelles études.

La physique de bosons fortement corrélés sur réseaux est décrite par le modèle de Bose-Hubbard. Le modèle de Hubbard [6], initialement introduit en 1963 par J. Hubbard pour décrire une transition de phase entre un état métallique et un état isolant en physique des solides, recouvre un ensemble de modèles de particules quantiques, bosons ou fermions, évoluant sur un réseau. De façon générale, ce modèle décrit un problème quantique à N -corps en interaction dont le hamiltonien est équivalent à l'équation de Schrödinger discrétisée.

Lorsque les particules sont indiscernables, le formalisme de seconde quantification utilisé dans ce modèle instaure naturellement la symétrie de la fonction d'onde associée à la nature des particules. La non-commutation du terme cinétique et d'interaction de ce modèle engendre une compétition de ces termes afin de minimiser l'énergie. À la différence des phases thermodynamiques classiques, cette compétition est à l'origine des propriétés intéressantes des phases adoptées par le système dans son état fondamental. De plus, la variation des interactions, contrôlables expérimentalement, permet le passage d'une phase à une autre. Lorsque les effets thermiques sont négligeables, de telles transitions sont nommées « transitions de phases quantiques » [3], par opposition aux transitions de phases classiques issues d'une compétition entre entropie et énergie.

Dans cette thèse, nous étudions deux systèmes de bosons sur réseaux optiques. L'étude numérique du hamiltonien de Bose-Hubbard de ces systèmes est effectuée par deux méthodes conceptuellement différentes. D'une part, nous employons une méthode de champ moyen qui simplifie le hamiltonien et permet une diagonalisation exacte du hamiltonien simplifié, diagonalisation numérique dans cette thèse. En plus d'être approximative, cette méthode présente, entre autre, le désavantage de restreindre le nombre de quantités calculables à des quantités locales, sur site. D'autre part, nous employons la méthode de Monte Carlo quantique, méthode numérique exacte impliquant un temps de calcul parfois assez long¹. Le principe de cette méthode est de calculer la valeur moyenne de grandeurs physiques associées à un système classique de dimension $d + 1$, exactement équivalent au système quantique de dimension d étudié, par une méthode de Monte Carlo classique. Une telle correspondance, généralement possible par une formulation en intégrale de chemin, requiert l'introduction d'une dimension supplémentaire, ou « temps imaginaire ».

Cette thèse est divisée en quatre parties. La [Partie 1](#) est une partie introductive concernant l'évolution des systèmes expérimentaux d'atomes ultrafroids. Le [Chapitre 1](#) explique comment les différentes techniques de piégeage d'atomes, à des températures toujours plus basses, nous ont progressivement amené à pouvoir simuler aujourd'hui différentes phases de la matière condensée avec un grand contrôle. En 1982, Richard P. Feynman [1] avait déjà émis l'hypothèse que de tels systèmes pourraient servir de simulateurs quantiques. La discussion du modèle de Bose-Hubbard au [Chapitre 2](#) permet d'introduire ce modèle, ainsi que les notations utilisées par la suite.

1. Simulations de 15 jours environ.

La [Partie 2](#) concerne les deux modèles étudiés, ainsi que les outils numériques et théoriques utilisés. Le [Chapitre 3](#) présente les hamiltoniens des deux systèmes, ainsi que leurs propriétés. Afin de simplifier la lecture de ce manuscrit, il nous semble judicieux de prévenir le lecteur que nous nous référerons à ce chapitre lors de l'étude de ces deux systèmes. À la différence d'une organisation conventionnelle linéaire, une organisation synthétique du manuscrit a été privilégiée afin de comparer les deux modèles dans un unique chapitre. La particularité des deux systèmes étudiés est le terme de conversion du spin des bosons. La méthode du champ moyen utilisée, conduisant à une simplification des hamiltoniens des deux systèmes, est aussi expliquée. D'autre part, la méthode de Monte Carlo quantique et l'algorithme utilisé sont discutés au [Chapitre 4](#).

La [Partie 3](#) concerne l'étude des propriétés à l'équilibre du système de bosons de spin-1/2. Ce système, dérivé de bosons de spin-1, met en jeu deux espèces de bosons, l'une correspond à des bosons de spin 0 et l'autre à l'état Λ . L'état Λ est obtenu *via* un couplage optique entre les deux états de spin ± 1 , couplage issu de la polarisation des lasers créant le réseau optique [7, 8]. Ce système est donc un système de bosons à deux états de spin effectifs, d'où l'appellation de « bosons de spin-1/2 ». De plus, le terme de conversion du spin de ces deux espèces autorise la conversion de deux particules d'une espèce en deux particules de l'autre espèce lors d'une collision sur site.

Au [Chapitre 5](#), ce système est étudié avec la méthode du champ moyen, présentée au Chapitre 3, ainsi qu'avec la méthode de Monte Carlo quantique à température nulle en 1D, dimension pour laquelle les fluctuations quantiques jouent un rôle capital. Les phases et les transitions de phases sont analysées et les deux méthodes sont comparées. Comme attendu, nous montrons que le champ moyen ne permet pas une description correcte des transitions de phases, bien que la description des propriétés sur site soit parfois acceptable. L'existence d'un condensat de Bose-Einstein est aussi invalidée par l'analyse en Monte Carlo quantique. Par ailleurs, nous présentons dans ce chapitre des résultats inattendus: un couplage effectif des spins des atomes, issus des déplacements de ceux-ci par effet tunnel, va permettre à un ordre ferromagnétique à longue portée, de type Ising, ou à un quasi-ordre magnétique dans le plan yz , de se développer dans les différentes phases étudiées. Des mouvements cohérents anticorrélés d'atomes de spin différents vont lever la dégénérescence des phases de Mott prédite par le champ moyen. Ces mouvements interviennent aussi dans la phase superfluide, dans laquelle des mouvements cohérents individuels existent déjà, rendant cette phase extrêmement complexe. Un autre résultat surprenant est la quasi-polarisation de la phase superfluide, qui n'a pas été prédite par les études précédentes en champ moyen [7, 8]. Ce résultat nous a amené à proposer un hamiltonien en champ moyen permettant une meilleure description du système que celui précédemment étudié dans la bibliographie par K.V. Krutitsky *et al.* [7, 8].

Le [Chapitre 6](#) est consacré à l'étude 2D de ce système à température nulle, puis à température finie. L'étude à température nulle permet d'isoler les différences liées au changement de dimension du système. L'accord entre le champ moyen et la méthode de Monte Carlo quantique est-il meilleur, comme attendu ? Existe-t-il des transitions de phases du premier ordre ainsi qu'une phase condensée de Bose-Einstein, comme le prédit le champ moyen ? Nous répondons à ces questions et nous montrons que les différents types d'ordres magnétiques observés à 1D sont conservés à 2D et que le quasi-ordre, associé à une symétrie continue, se transforme en un ordre à longue portée. Bien que les techniques de champ moyen échouent généralement à deux dimensions, cette méthode s'avérera être qualitativement acceptable à température nulle. Enfin, l'étude du système poursuivie en 2D à température finie montre l'influence des effets thermiques sur les phases et sur

les transitions de phases. Quelle est la robustesse des propriétés magnétiques face aux effets thermiques ? A quelle température les phases de Mott et la phase superfluide disparaissent-elles pour laisser place à un liquide de Bose normal ? Les mouvements cohérents anticorrélés disparaissent-ils à la même température dans les différentes phases ? L'ordre des transitions est-il affecté ? Les transitions de type BKT attendues sont-elles observées ? Nous répondons à ces questions et nous montrons, d'autre part, que le champ moyen utilisé échoue lorsque les effets thermiques ne sont plus négligeables.

Cette troisième partie révèle les défauts, les limites et les points forts de la théorie du champ moyen utilisée par de nombreuses équipes [3, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16]. Les résultats présentés dans cette troisième partie ont abouti à la publication de trois articles [17, 18, 19].

La [Partie 4](#) est consacrée à l'étude préliminaire du système de bosons de spin-1, à température nulle pour un réseau optique 2D. Ce système, plus complexe que le précédent, correspond à trois espèces de bosons de spin -1 , 0 et $+1$ évoluant sur un réseau optique. Dans ce modèle, deux particules de spin -1 et $+1$ peuvent se convertir en deux particules de spin 0 , et réciproquement, lors d'une collision sur site. L'intérêt de l'étude de ce modèle, comparé à celui des bosons de spin- $1/2$, est que de nouvelles phases magnétiques sont prédites, telles que la phase « nématique » [4, 5, 20, 21]. De plus, cette analyse permet de compléter les études précédemment effectuées [15, 22, 23, 24].

Les résultats obtenus en champ moyen, présentés au [Chapitre 7](#), serviront de base pour l'étude en Monte Carlo quantique actuellement en cours, présentée au [Chapitre 8](#). Une partie des résultats obtenus en champ moyen a déjà été publiée par V. Pai *et al.* [9]. Cependant, nous présentons une étude plus approfondie et plus complète, notamment en ce qui concerne les propriétés magnétiques sur site. Les résultats en Monte Carlo quantique montrent qu'un ordre ferromagnétique existe dans les différentes phases et confirment l'existence de transitions de phases du premier ordre, prédites par le champ moyen. La phase nématique est-elle observée ? La phase singulet prédite théoriquement est-elle présente [4, 5] ? Quelle sont les similarités avec le modèle de bosons de spin- $1/2$? Existe-t-il pour ce modèle aussi des mouvements cohérents anticorrélés et une polarisation de la phase superfluide ?

Cette étude préliminaire des bosons de spin-1 sur réseau optique s'ajoute aux nombreuses études expérimentales [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33] et théoriques [4, 5, 9, 12, 14, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45] effectuées dans ce champ de recherche.

Première partie

Atomes ultrafroids et bosons sur
réseaux

Chapitre 1

Atomes ultrafroids ou simulateurs quantiques

1.1 Condensation de Bose-Einstein

D'après la théorie cinétique des gaz, la température est une mesure indirecte du degré d'agitation microscopique des particules, soit principalement de la dispersion de leurs vitesses pour un gaz. En 1848, William Thomson, Lord Kelvin, propose une échelle de température absolue telle que le zéro absolu représente la température pour laquelle plus aucune chaleur ne peut être extraite d'un corps. Le zéro absolu correspond à -273.15° C. En Physique classique, cette température correspond donc à un état d'immobilité totale et d'entropie nulle. Cependant, la Physique Quantique invalide l'idée d'une immobilité totale puisque, d'après les inégalités d'Heisenberg, l'état fondamental d'un système à température nulle possède nécessairement une quantité de mouvement non nulle. Il est donc impossible de s'abstraire des fluctuations quantiques résiduelles.

Les effets dus à la nature quantique des particules émergent lorsque la température approche la limite du zéro absolu. Il existe deux familles de particules: les bosons (particules de Bose) et les fermions (particules de Fermi). Les bosons possèdent un spin entier, satisfont la statistique de Bose-Einstein et leur fonction d'onde globale est symétrique. Il n'y a aucune restriction sur le nombre de particules occupant le même état quantique. Cette famille regroupe des exemples très différents tels que les photons, l'hélium He^4 , ainsi que des quasi-particules comme les phonons, les excitons etc. *A contrario*, les fermions possèdent un spin demi-entier, satisfont la statistique de Fermi-Dirac et leur fonction d'onde globale est antisymétrique. Le principe d'exclusion de Pauli, satisfait par ces particules, impose qu'un état quantique ne peut pas être occupé par deux particules indiscernables ou plus. Cette famille regroupe aussi des exemples très différents tels que l'électron, le proton, le neutron, l'hélium He^3 , etc. Le nombre moyen $\langle n_l \rangle^{BE}$ ($\langle n_l \rangle^{FD}$) de bosons (fermions) occupant l'état quantique d'indice l d'énergie ε_l est:

$$\langle n_l \rangle^{BE} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_l - \mu)} - 1} \quad (1.1)$$

$$\langle n_l \rangle^{FD} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_l - \mu)} + 1} \quad (1.2)$$

où μ est le potentiel chimique et $\beta = 1/k_B T$ est l'inverse de la température, avec k_B la constante de Boltzmann. La différence du signe devant 1 au dénominateur entraîne de profondes conséquences! Lorsque le nombre moyen de particules de l'état d'énergie ε_l est très petit,

soit $e^{\beta(\varepsilon_l - \mu)} \gg 1$, la nature quantique des particules ne se distingue plus: $\langle n_l \rangle^{BE} \simeq \langle n_l \rangle^{FD} \simeq e^{-\beta(\varepsilon_l - \mu)}$. Cette approximation, appelée « approximation de Maxwell-Boltzmann », s'applique au régime des "hautes" températures et/ou aux systèmes dilués.

En 1924, Albert Einstein comprit, en s'inspirant des travaux de Satyendra Nath Bose, qu'un nombre macroscopique de bosons identiques sans interaction peut occuper l'état quantique de plus basse énergie lorsque la densité n satisfait la relation $n\lambda^3 \geq 2.612$ [46]. La quantité $\lambda = h/\sqrt{2\pi m k_B T}$ représente la longueur d'onde thermique de de Broglie des bosons de masse m et h est la constante de Planck. Le phénomène de condensation décrit par Einstein se produit lorsque les fonctions d'onde des particules commencent à se recouvrir entre elles. Il fallut attendre 1995 pour voir la première réalisation expérimentale d'une telle condensation réalisée simultanément par E. Cornell et C. Wieman dans le Colorado et par W. Ketterle au MIT [47, 48]. Cette prouesse leur valut le prix Nobel de Physique en 2001 pour la réalisation et l'étude d'un condensat de Bose-Einstein dans des gaz dilués d'atomes alcalins. Depuis, de nombreux type d'atomes ont été condensés, tels que l'hydrogène ^1H , l'hélium ^4He , le lithium ^7Li , le sodium ^{23}Na , le potassium ^{39}K et ^{41}K , le chrome ^{52}Cr , le rubidium ^{85}Rb et ^{87}Rb , le césium ^{133}Cs et ^{135}Cs et l'ytterbium ^{170}Yb et ^{174}Yb [49]. Des quasi-particules fictives telles que les excitons dans les semi-conducteurs présentent aussi des propriétés quantiques surprenantes liées à la condensation de Bose-Einstein.

La condensation de Bose-Einstein intervient dans d'autre phénomène tels que la superfluidité, la supraconductivité et peut également être rapprochée de l'effet laser (*Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*). En effet, lorsque la densité de photons atteint une certaine valeur critique, le nombre de photons dans le même état quantique (même énergie, même direction, même phase ...) devient macroscopique, ce qui confère à la lumière laser ses propriétés si particulières. Cependant, le potentiel chimique nul pour les photons implique que le nombre de photons n'est pas conservé. Cette différence entre l'effet laser et le condensat de Bose-Einstein est à l'origine de controverses. Des expériences récentes contournent désormais cette différence en créant des cavités dans lesquelles le nombre de photons est approximativement conservé et permettent d'observer une condensation de Bose-Einstein stricte, selon les auteurs [50].

A contrario, la superfluidité et la supraconductivité sont des phénomènes impliquant la condensation de particules en interaction. La superfluidité a été découverte en 1938 par P. Kapitza [51], J. F. Allen et A. D. Misener [52] alors qu'ils étudiaient de l'hélium liquide. Ce phénomène quantique permet à un liquide de présenter une viscosité nulle: il n'oppose aucune résistance à l'écoulement. Par ailleurs, le superfluide est un superconducteur de chaleur. Cette découverte valut à P. Kapitza le prix Nobel de Physique de 1978. La température de la transition superfluide $T_s \simeq 2.2$ K, remarquablement proche de celle de la condensation de Bose-Einstein d'un gaz parfait de même densité que l'hélium liquide, soit $T_s \simeq 3.2$ K, amena F. London à penser que les deux phénomènes étaient liés.

Concernant la supraconductivité, des interactions complexes entre phonons du réseau et électrons de conduction conduisent à l'apparition de paires liées d'électrons, appelées « paires de Cooper ». Bien que les électrons soient des fermions, ces paires d'électrons se comportent comme des bosons condensés dans le même état quantique, sous la forme d'un condensat de Bose-Einstein. Les matériaux supraconducteurs n'opposent plus aucune résistance au passage du courant électrique et expulsent les lignes de champ magnétique¹. Une théorie complète de la supraconducti-

1. Effet Meissner.

tivité, la théorie BCS, fut proposée en 1957 par J. Bardeen, L. Cooper et J. Schrieffer. Pour leurs travaux, les auteurs reçurent le prix Nobel de Physique de 1972.

1.2 Refroidissement et piégeage des atomes

Les effets impliquant la condensation de Bose-Einstein apparaissent pour de faibles températures. Il est possible d'observer l'effet Meissner avec des matériaux composés d'oxydes métalliques céramiques supraconducteurs refroidis par de l'azote liquide à environ -196°C , soit 77 K. Nous avons aussi mentionné la transition superfluide de l'hélium ^4He , observée pour la première fois en 1938, à une température de 2.2 K. À l'inverse des ces deux cas, il a fallu développer de nouvelles techniques de refroidissement afin d'observer, en 1995, le premier condensat de Bose-Einstein, au sens strict d'Einstein, d'un gaz dilué d'atomes de rubidium à une température proche de 170 nK.

La formation de condensats de Bose-Einstein de gaz dilués, d'une densité voisine de 10^{19} atomes/m³ environ, nécessite d'atteindre des températures plus basses que le microkelvin. Pour de telles températures, le phénomène d'adsorption des atomes par des parois matérielles est inévitable. Il est donc impossible de piéger un tel gaz par des parois matérielles. De façon générale, l'utilisation d'un champ magnétique inhomogène permet de maintenir le gaz en lévitation au centre d'une enceinte dans laquelle règne un vide profond (10^{-9} Pa). En effet, le moment magnétique $\boldsymbol{\mu}$ de chaque atome se couple au champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ pour donner une énergie d'interaction $\mathcal{E} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})$. Il résulte de cette énergie potentielle une force magnétique qui permet de piéger les atomes. Cependant, afin de stocker un grand nombre d'atomes, une étape préliminaire intervient avant le piégeage magnétique. Dans presque toutes ces expériences, cette étape fait intervenir un piège magnéto-optique, basé sur les échanges d'impulsions entre atomes et photons, afin de refroidir les atomes depuis la température ambiante jusqu'à des températures inférieures au millikelvin [46]. Ce type de piège permet d'obtenir le rapport $n\lambda^3 \simeq 10^{-6}$, ce qui est bien trop faible pour arriver à la condensation de Bose-Einstein, soit $n\lambda^3 \simeq 2.612$. Les atomes sont donc ensuite transférés dans le piège magnétique où les atomes les plus chauds sont éliminés par un processus d'évaporation radio-fréquence. Cette méthode permet encore de refroidir les atomes jusqu'à des températures de quelques centaines de nanokelvins et d'obtenir la condensation désirée. La Figure 1.1 montre la distribution de vitesses d'un gaz d'atomes de rubidium ^{87}Rb lors de la transition de Bose-Einstein.

Les techniques de refroidissement d'atomes par laser sont nombreuses (refroidissement Doppler, Sisyphus, subrecoil etc.). Le prix Nobel de Physique de 1997 a été décerné à C. Cohen-Tannoudji, W. D. Phillips et S. Chu pour avoir développé le refroidissement par gradient de polarisation. De plus, les expériences d'atomes ultrafroids promettent de nombreuses applications, notamment dans le champ de la métrologie (interférométrie atomique, horloge atomique [GPS], gravimètre, gyromètre, laser à atomes ...). En ce qui nous concerne, l'introduction de réseaux optiques dans les expériences d'atomes ultrafroids a ouvert de nouvelles perspectives dans le domaine de la matière condensée. Les réseaux optiques résultent de l'interférence de faisceaux lasers contra-propageants créant une onde stationnaire. Le champ électrique oscillant $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ des lasers induit un moment dipolaire atomique proportionnel à ce champ. Il en résulte un potentiel périodique $V(\mathbf{r})$ proportionnel à l'intensité des lasers, soit proportionnel à $|\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2$. Afin d'éviter au maximum le phénomène d'absorption des photons par les atomes, donc d'échauffement des atomes, la fréquence ω des lasers doit être désaccordée par rapport à la fréquence ω_0 d'absorption

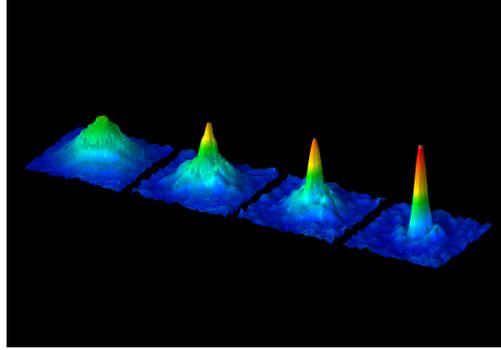


FIGURE 1.1 – Expérience du Professeur G. Rempe au [Max-Planck-Institut Für Quantenoptik](#) [53]. Après cinq secondes de refroidissement évaporatif, la température est diminuée d'environ 0.03 mK (à gauche) jusqu'à l'obtention d'un condensat de Bose-Einstein à 500 nK (à droite). La quantité d'atomes occupant l'état fondamental est alors macroscopique.

des atomes. Lorsque le désaccord $\Delta = \omega - \omega_0$ est négatif (positif), les atomes sont piégés sur les *minima* (*maxima*) du potentiel $V(\mathbf{r})$. Il est aujourd'hui possible de créer diverses géométries de réseaux périodiques en 1D, 2D et 3D [54].

En terme de mobilité, les atomes évoluant sur un réseau optique sont analogues aux électrons évoluant dans un solide. En effet, les particules piégées se déplacent de site en site du réseau optique par effet tunnel à l'instar des électrons évoluant d'un puits de potentiel à un autre créé de façon périodique par les ions positifs de la structure cristalline (*cf.* Figure 1.2). Cependant, la dimension des réseaux optiques permet de reproduire cette analogie à une échelle environ 1 000 fois plus grande. Il est donc possible d'analyser plus finement la physique de tels systèmes. Un autre avantage de ces expériences est la possibilité de réaliser et d'étudier des systèmes simples (contrôle du désordre, absence de phonons ...) correspondant à ceux étudiés théoriquement. Nous pouvons donc étudier indépendamment différents aspects de la physique de ces systèmes. Le fait de pouvoir reproduire des systèmes de la matière condensée à notre guise fait des réseaux optiques de vrais simulateurs quantiques. De plus, ces expériences sont complémentaires aux simulations numériques handicapées par l'accroissement exponentiel du nombre d'états de base de l'espace de Hilbert lorsque le nombre de particules augmente. Cette considération restreint les études numériques à de petites tailles seulement, comme nous le verrons dans cette thèse.

Le contrôle des interactions entre atomes rend possible l'observation de différentes phases, théoriquement bien décrites par le modèle de Hubbard. Une expérience spectaculaire, réalisée à Munich en 2001 avec du rubidium ^{87}Rb , a montré la transition entre deux phases quantiques très distinctes [55]. Dans cette expérience, les atomes évoluent sur un réseau 3D de symétrie cubique associé au potentiel périodique $V(\mathbf{r}) = V_0(\sin^2(k_x x) + \sin^2(k_y y) + \sin^2(k_z z))$. Lorsque l'amplitude du potentiel V_0 est faible, le couplage tunnel entre sites est important. Dans ce cas, le système adopte une phase condensée de Bose-Einstein superfluide, phase dans laquelle les particules se déplacent sans friction et dont la fonction d'onde est délocalisée dans l'ensemble du réseau [Figure 1.3 (a)]. La distribution en impulsion présente des pics signifiant que le mouvement des atomes est cohérent: il existe une cohérence de la phase de la fonction d'onde des particules. Lorsque V_0 est augmentée, le système adopte une phase très différente lorsque l'amplitude du couplage tunnel est notablement inférieure à l'énergie d'interaction entre deux atomes sur le

même site. La nouvelle phase adoptée, appelée « phase isolante de Mott », présente un nombre entier bien défini d'atomes par site [Figure 1.3 (b)]. Les fluctuations du nombre de particules par site, trop coûteuses en énergie, sont nulles: cette phase incompressible ne présente aucune cohérence de la phase de la fonction d'onde.

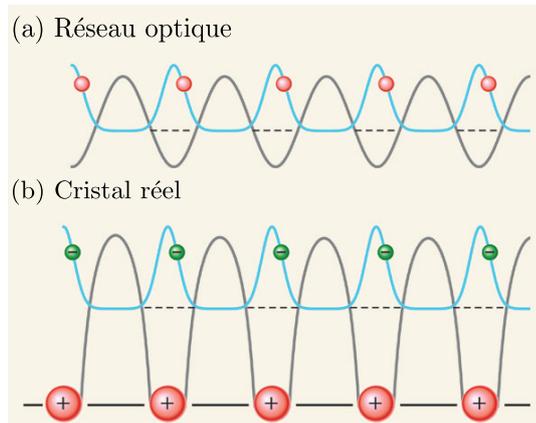


FIGURE 1.2 – (Source Réf. [54]) En noir, le potentiel périodique du réseau optique (a) est analogue au potentiel créé par les ions d'un cristal (b). Les particules piégées sur un réseau optique évoluent de site en site par effet tunnel comme les électrons évoluent sur le réseau ionique du cristal réel.

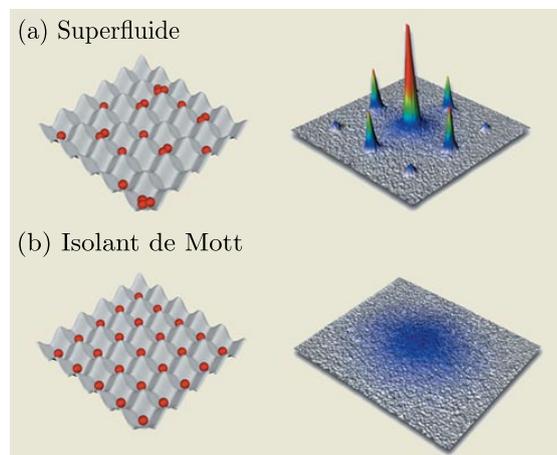


FIGURE 1.3 – (Source Réf. [54]) Représentation des particules évoluant sur un réseau optique (à gauche) et distribution de leurs impulsions (à droite). En (a): le système est superfluide. L'amplitude du potentiel V_0 est faible, les particules se déplacent de façon cohérente sans friction. Les pics de la distribution des impulsions révèlent une cohérence de la phase de la fonction d'onde des particules. En (b): le système adopte la phase isolante de Mott. L'amplitude du potentiel V_0 est importante, le nombre de particules sur chaque site est entier et sans fluctuation. La distribution des impulsions de cette phase incompressible montre qu'aucune cohérence n'existe. Il est possible de passer réversiblement d'une phase à l'autre en variant V_0 [55].

Dans cette expérience, la variation de l'amplitude V_0 du potentiel permet de passer réversiblement d'une phase à l'autre. Cette transition entre deux états fondamentaux est un exemple typique de transition de phase quantique. Depuis 2002, de nombreuses expériences sont menées dans ce domaine [2]. Les phénomènes fondamentaux de la matière condensée, tels que les oscillations de Bloch des atomes dans le réseau et la diffusion de Bragg, ont déjà été observés. Il est possible de réaliser des expériences avec des mélanges de type bosons-bosons, bosons-fermions [56] et mêmes fermions-fermions [57] en 1D, 2D et 3D pour différentes géométries de réseaux [49, 58]. La réalisation de systèmes de la matière condensée incluant des paires de Cooper représenterait un pas important dans notre compréhension de la supraconductivité, notamment dans la compréhension des mécanismes intervenant dans la supraconductivité à haute température critique. D'autres approches cherchent à utiliser ces systèmes pour stocker des qubits dans le but de développer des ordinateurs quantiques [59]. En ce qui nous concerne dans cette thèse, depuis 1998, les techniques de piégeage optique pur permettent aux atomes piégés de conserver le degré de liberté de leur spin, gelé auparavant par le champ magnétique du piège [26]. Le contrôle des interactions entre spin enrichit considérablement les phases quantiques étudiées dans ces expériences et permet de simuler des modèles impliquant le magnétisme quantique. Diverses études expérimentales effectuées par les groupes les plus actifs dans le domaine, tels que le groupe de **D. M. Stamper-Kurn** à Berkeley, de **W. Ketterle** au MIT, ou de **I. Bloch** à Munich, ont montré que des ordres magnétiques (*spin textures*) émergent spontanément (*cf.* Figure 1.4).

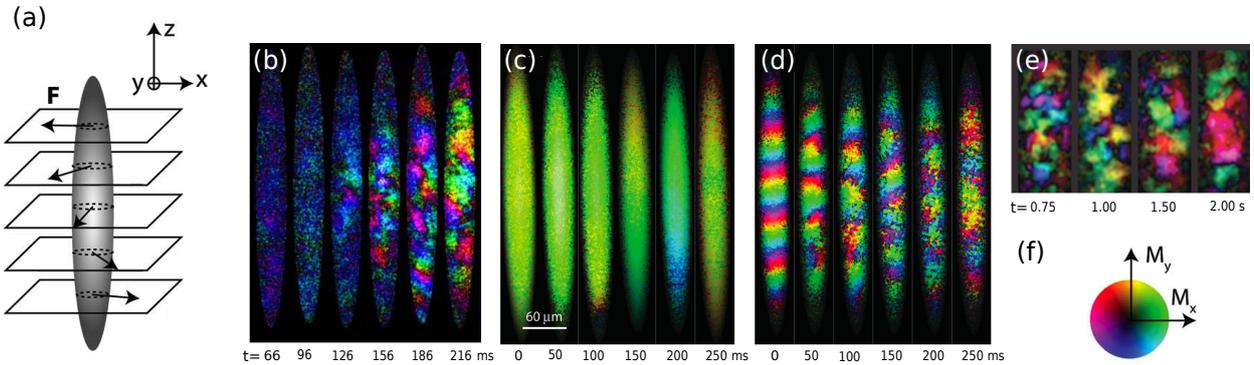


FIGURE 1.4 – (Source Stamper-Kurn) Diverses expériences du groupe de D. M. Stamper-Kurn concernant un superfluide magnétique sur un réseau optique. Les graphes (a) et (f) renseignent respectivement sur l'orientation spatiale du superfluide et sur l'amplitude et l'orientation de l'aimantation. Les graphes (b), (c), (d) et (e) montrent l'aimantation du superfluide au cours du temps. En (b): le superfluide initialement non magnétisé dans l'état $|m_z = 0\rangle$ évolue spontanément vers un état composé de domaines ferromagnétiques dans le plan xy [60]. En (c): le superfluide ferromagnétique reste dans le même état, alors qu'en (d) l'ordre hélicoïdal initial est détruit par les interactions magnétiques qui favorisent un ordre à très courte portée [25]. En (e): partant d'un superfluide paramagnétique inhomogène, une aimantation macroscopique se forme au cours du temps [61, 34].

Il est possible, grâce à ce type d'expériences, d'étudier des systèmes décrits par le modèle de Hubbard. Il est notamment permis de contrôler les interactions entre les spins des atomes par l'utilisation de résonances de Feshbach [62]. Ces résonances de diffusion concernent l'énergie de liaison d'un état moléculaire composé de deux atomes formé lors d'une collision sur site. Elles permettent donc de créer des molécules à partir d'atomes libres et réciproquement. Cependant, ces résonances font intervenir un champ magnétique qui gèle le degré de liberté du spin. Les résonances de Feshbach optiques sont une alternative à ce problème [63, 64]. La problématique de cette thèse est d'étudier les phases adoptées par des systèmes présentant des interactions spin-spin sur site modulables expérimentalement par les résonances de Feshbach optiques. Plus précisément, notre but est d'étudier numériquement les propriétés thermodynamiques à l'équilibre de telles phases, ainsi que l'organisation magnétique qui s'y développe.

Chapitre 2

Le modèle de Bose-Hubbard

2.1 Hamiltonien pour bosons sur réseau optique

À l'équilibre thermodynamique, la physique de particules quantiques sur réseau est régie par l'équation de Schrödinger $\hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$, avec $\hat{\mathcal{H}}$ le hamiltonien du système tel que $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{T}} + \hat{\mathcal{V}}$. Le terme cinétique $\hat{\mathcal{T}}$ représente les sauts des particules entre sites du système et le terme $\hat{\mathcal{V}}$ est le terme d'interaction entre particules. Nous décrivons dans cette section le hamiltonien de base d'une espèce de bosons, sans spin, piégée sur un réseau optique. Pour cela, nous considérons que les bosons se déplacent seulement de sites plus proches voisins en sites plus proches voisins et que le terme d'interaction intervient seulement lors de la répulsion entre particules sur le même site. Ce modèle est analogue à celui de la référence [55].

Dans l'espace des positions, pour lequel $|\Psi\rangle = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}(\mathbf{r})|\mathbf{r}\rangle$, le hamiltonien de bosons de masse m piégés par le potentiel $V(\mathbf{r})$ du réseau optique est [65]:

$$\hat{\mathcal{H}} = \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \int d\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

avec $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ l'opérateur de champ bosonique et a_s la longueur de diffusion (*scattering*) des atomes. Pour de tels systèmes, lorsque la densité est faible, les interactions entre atomes interviennent principalement lors de collisions élastiques binaires et peuvent être traitées par la théorie de la diffusion. Dans ce cas, l'énergie de répulsion sur site est donnée par un potentiel effectif proportionnel à la longueur de diffusion a_s issue de cette approche. Le potentiel $V(\mathbf{r})$ est la somme du potentiel périodique du réseau optique $V_{lat}(\mathbf{r})$ et du potentiel de confinement $V_{ext}(\mathbf{r})$.

Le réseau périodique va induire, lorsque son amplitude est importante, une localisation de la fonction d'onde sur les sites de piégeage conduisant à la discrétisation de l'équation de Schrödinger. La base des fonctions de Wannier permet, dans ce cas, une discrétisation adéquate. De plus, lorsque les énergies impliquées dans la dynamique du système sont petites devant les énergies d'excitation de la seconde bande, seules les fonctions de Wannier de la première bande peuvent être considérées. Dans ces conditions, l'opérateur de champ $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ peut être approximativement développé dans la base des fonctions de Wannier de la première bande de la façon suivante:

$$\begin{cases} \hat{\Psi}(\mathbf{r}) & \simeq \sum_i \hat{a}_i w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \\ \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) & \simeq \sum_i \hat{a}_i^\dagger w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \end{cases} \quad (2.2)$$

Les équations (2.2) font intervenir le formalisme de seconde quantification pour lequel les opérateurs de création \hat{a}_i^\dagger et d'annihilation \hat{a}_i jouent un rôle majeur. L'opérateur \hat{a}_i [\hat{a}_i^\dagger] détruit [créé] une particule dans le mode de la fonction de Wannier $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ [$w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$] localisée sur le $i^{\text{ième}}$ site du réseau. L'avantage de ce formalisme est qu'il opère directement dans un espace d'états symétrisés (antisymétrisés) pour les bosons (fermions). L'état $|\varphi\rangle$ est créé par l'action de l'opérateur \hat{a}_φ^\dagger sur l'état vide $|0\rangle$, soit

$$|\varphi\rangle = \hat{a}_\varphi^\dagger |0\rangle. \quad (2.3)$$

Il est possible de créer un état à deux particules par l'action supplémentaire d'un opérateur \hat{a}_ψ^\dagger , soit

$$|\varphi\psi\rangle = \hat{a}_\psi^\dagger \hat{a}_\varphi^\dagger |0\rangle. \quad (2.4)$$

La symétrisation de la fonction d'onde des bosons impose l'égalité $|\varphi\psi\rangle = |\psi\varphi\rangle$, soit $\hat{a}_\psi^\dagger \hat{a}_\varphi^\dagger |0\rangle = \hat{a}_\varphi^\dagger \hat{a}_\psi^\dagger |0\rangle$. Il en découle la relation de commutation de l'opérateur de création:

$$[\hat{a}_\varphi^\dagger, \hat{a}_\psi^\dagger] \equiv \hat{a}_\varphi^\dagger \hat{a}_\psi^\dagger - \hat{a}_\psi^\dagger \hat{a}_\varphi^\dagger = 0. \quad (2.5)$$

Par ailleurs, le même raisonnement appliqué avec l'opérateur d'annihilation conduit à la relation

$$[\hat{a}_\varphi, \hat{a}_\psi] \equiv \hat{a}_\varphi \hat{a}_\psi - \hat{a}_\psi \hat{a}_\varphi = 0. \quad (2.6)$$

Ces opérateurs, appliqués sur un état quelconque de la base de Fock $\{|n\rangle\}$ composé de n particules, permettent de créer des états composés de $n - 1$ et $n + 1$ particules à partir des relations

$$\begin{aligned} \hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \\ \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Ces relations permettent de calculer le nombre n de particules dans l'état $|n\rangle$ en calculant la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$, soit $\langle n|\hat{n}|n\rangle = n$. Par ailleurs, les opérateurs de création et d'annihilation des bosons satisfont la relation canonique

$$[\hat{a}_\varphi, \hat{a}_\psi^\dagger] \equiv \hat{a}_\varphi \hat{a}_\psi^\dagger - \hat{a}_\psi^\dagger \hat{a}_\varphi = \delta_{\psi\varphi}, \quad (2.8)$$

où δ est la fonction de Kronecker telle que $\delta_{\psi\varphi} = 0$ si $\psi \neq \varphi$ et $\delta_{\psi\varphi} = 1$ si $\psi = \varphi$.

La base des fonctions de Wannier, ainsi que la seconde quantification, nous amène à la réécriture du hamiltonien Eq. (2.1) sous la forme du hamiltonien de Bose-Hubbard suivant

$$\hat{\mathcal{H}} = \underbrace{-t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i)}_{\hat{T}} + \underbrace{\frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \sum_i (V_{ext}(\mathbf{r}_i) - \mu) \hat{n}_i}_{\hat{V}}, \quad (2.9)$$

où l'opérateur $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ compte le nombre de particules sur le site i . Le terme cinétique \hat{T} décrit les déplacements des particules par effet tunnel entre sites plus proches voisins. Ce terme tend

à délocaliser la fonction d'onde des particules dans l'ensemble du système. L'amplitude de ces déplacements est donnée par l'élément de matrice t défini par

$$t = \int d\mathbf{r} w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V_{lat}(\mathbf{r}) \right) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \quad (2.10)$$

De façon plus conventionnelle, ce terme peut être défini par $t = \hbar^2/(2M^*\delta^2)$ où δ est le pas du réseau et M^* est la masse effective des bosons. Le potentiel périodique du réseau optique $V_{lat}(\mathbf{r})$ permet de faire varier la masse effective M^* des atomes en ajustant l'amplitude du potentiel *via* l'intensité des lasers. Il est aussi possible d'agrandir ou de réduire le pas du réseau δ en ajustant la longueur d'onde des lasers.

Concernant le terme $\hat{\mathcal{V}}$, la première partie décrit l'interaction de n bosons interagissant chacun avec $n - 1$ bosons sur le $i^{\text{ième}}$ site du réseau. L'énergie de répulsion de deux atomes sur le même site est donnée par le paramètre U défini par

$$U = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \int d\mathbf{r} |w(\mathbf{r})|^4. \quad (2.11)$$

L'interaction des atomes, de courte portée devant le pas du réseau, permet de négliger les interactions entre différents sites. Ce terme assure donc une bonne description des interactions et tend à localiser les atomes sur les sites du réseau. Enfin, la seconde partie du terme $\hat{\mathcal{V}}$ provient du potentiel de confinement $V_{ext}(\mathbf{r}_i)$ de l'ensemble des atomes et introduit le décalage d'énergie $V_{ext}(\mathbf{r}_i)$ sur le $i^{\text{ième}}$ site du réseau. Dans cette thèse, nous nous intéresserons seulement au centre du piège, zone homogène pour laquelle $V_{ext}(\mathbf{r}_i) \simeq 0, \forall i$. D'autre part, le potentiel chimique μ est le multiplicateur de Lagrange qui fixe le nombre moyen de particules dans l'ensemble grand canonique.

Le modèle de Hubbard [6] constitue un exemple typique de problème quantique à N -corps en interaction. Ce modèle a été initialement introduit par J. Hubbard en 1963 pour décrire la transition métal-isolant dans certains solides et permet depuis de traiter aussi bien des bosons (modèle de Bose-Hubbard) [35, 66] que des fermions (modèle de Hubbard).

2.2 Phases isolantes de Mott et phase superfluide

Le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ [Eq. (2.9)] décrit deux phases radicalement différentes associées aux limites de forte interaction $t/U \ll 1$ et de faible interaction $t/U \gg 1$. Pour ces cas limites, il est possible de diagonaliser le hamiltonien et donc d'accéder analytiquement aux informations physiques concernant ces phases. Nous présentons ci-dessous ces deux limites pour un système homogène ($V_{ext}(\mathbf{r}_i) = 0, \forall i$) et nous discutons le cas général. Les calculs suivants, effectués pour un réseau 2D carré composé de L^2 sites, se généralisent aisément pour des réseaux réguliers à d dimension(s).

Phases de Mott

Lorsque les déplacements par effet tunnel sont nuls ($t = 0$), le hamiltonien, réduit au terme d'interaction $\hat{\mathcal{V}}$, se diagonalise dans l'espace direct. Lorsque le nombre de particules est un multiple de L^2 , les interactions contraignent les particules à occuper les L^2 sites du réseau avec une densité entière de ρ bosons sur chaque site. Cette densité ne fluctue pas, cette phase est

incompressible. Cette phase, appelée « phase isolante de Mott » (*Mott Insulator*), est décrite, à un facteur de normalisation près, par la fonction d'onde

$$\begin{aligned} |\Psi_{MI}\rangle &\simeq \prod_{i=1}^{L^2} (\hat{a}_i^\dagger)^\rho |0\rangle \\ &\simeq \otimes_{i=1}^{L^2} |\rho\rangle_i, \end{aligned} \quad (2.12)$$

avec $|\rho\rangle_i$ l'état de la base de Fock $\{|n\rangle\}$ composé de ρ bosons sur le $i^{\text{ème}}$ site. L'énergie interne du système est donnée par

$$\begin{aligned} E_{MI} &= \langle \Psi_{MI} | \hat{\mathcal{V}} | \Psi_{MI} \rangle \\ &= \langle \Psi_{MI} | \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) | \Psi_{MI} \rangle \\ &= \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) \\ &= \frac{UL^2}{2} \rho (\rho - 1). \end{aligned} \quad (2.13)$$

On en déduit l'énergie par site $\epsilon_{MI}(\rho = 1) = 0$, $\epsilon_{MI}(\rho = 2) = U$, $\epsilon_{MI}(\rho = 3) = 3U$, $\epsilon_{MI}(\rho = 4) = 6U \dots$. À température nulle, la relation $\mu = E(N+1) - E(N)$ permet de montrer qu'une phase de Mott avec ρ bosons par site est adoptée par le système lorsque le potentiel chimique satisfait $\rho - 1 < \mu/U < \rho$ (cf. Figure 2.1).

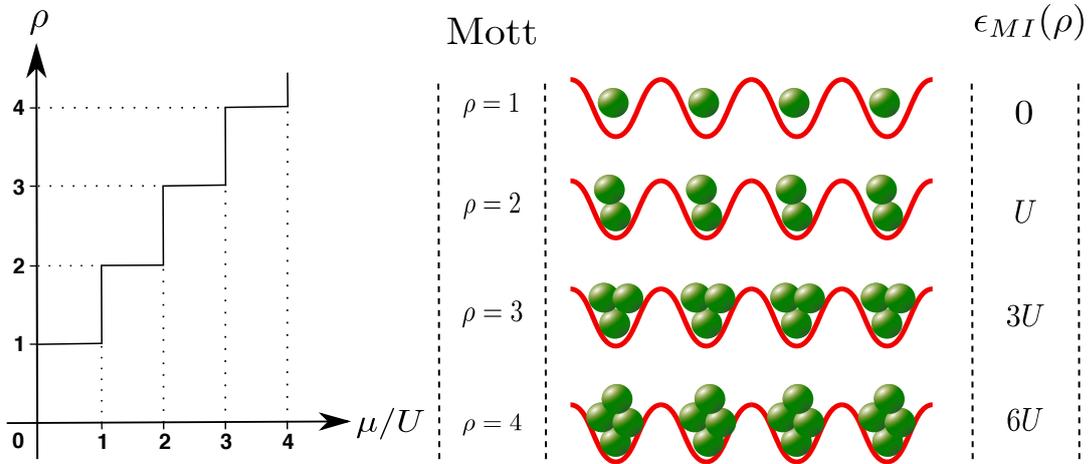


FIGURE 2.1 – À gauche: densité en fonction du potentiel chimique lorsque le terme cinétique est nul, soit pour $t = 0$. À droite: représentation des particules piégées sur un réseau optique 1D, représenté en rouge, dans les phases de Mott de densité $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$. Pour chaque phase, l'énergie sur site $\epsilon_{MI}(\rho) \equiv E_{MI}(\rho)/L^2$ est indiquée dans la colonne de droite.

Partant d'un système vide, on peut ajouter sans coût énergétique des particules au système jusqu'à atteindre la densité $\rho = 1$. Une fois ce seuil passé et jusqu'à la densité $\rho = 2$, le coût d'ajout d'une particule supplémentaire sera de U . De la densité $\rho = 2$ jusqu'à la densité $\rho = 3$, l'ajout d'une particule dans le système coûtera l'énergie $2U$. De même, l'ajout d'une particule coûtera l'énergie $3U$ de la densité $\rho = 3$ jusqu'à la densité $\rho = 4$ et ainsi de suite ...

Les plateaux de la densité de la Figure 2.1 à gauche impliquent que la compressibilité $\kappa = \partial\rho/\partial\mu$ est nulle. Les phases de Mott sont des phases incompressibles dans lesquelles aucune cohérence de la phase de la fonction d'onde des particules n'existe.

Condensat de Bose-Einstein et phase superfluide

Lorsque les interactions sont nulles $U = 0$, le hamiltonien, réduit au terme cinétique \hat{T} , se diagonalise dans l'espace réciproque et les particules sont délocalisées dans l'ensemble du réseau. Le nombre de particules sur chaque site ρ_i fluctue et sa distribution de probabilité est poissonnienne : $\text{Var}(\rho_i) = \rho_i$. Le système adopte la phase condensée de Bose-Einstein pour laquelle il existe un ordre de la phase de la fonction d'onde à longue portée. Cette phase est décrite par la fonction d'onde $|\Psi_{BE}\rangle$, telle que

$$|\Psi_{BE}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\hat{a}_{k=0}^\dagger \right)^N |0\rangle,$$

avec N le nombre total de particules et $\hat{a}_{k=0}^\dagger$ l'opérateur qui crée une particule dans le mode $k = 0$ de la base des ondes planes $\{|k\rangle\}$, telle que

$$|k\rangle = \hat{a}_k^\dagger |0\rangle = \frac{1}{L} \left(\sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{r}}^\dagger \right) |0\rangle, \quad (2.14)$$

avec $\mathbf{r} = (x, y)$ et $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ le vecteur d'onde tel que $k_{x(y)} = 2\pi l/L$ où l est un entier compris entre $-L/2$ et $+L/2$. Cette phase est compressible et l'énergie du système est donnée par

$$\begin{aligned} E_{BE} &= \langle \Psi_{BE} | \hat{T} | \Psi_{BE} \rangle \\ &= \langle \Psi_{BE} | -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i \right) | \Psi_{BE} \rangle \\ &= \sum_k \varepsilon_k n_k, \end{aligned} \quad (2.15)$$

où n_k est le nombre de bosons dans le mode k de la base des ondes planes et l'énergie cinétique ε_k du mode k est donnée par

$$\varepsilon_k = -2t (\cos(k_x) + \cos(k_y)). \quad (2.16)$$

La représentation graphique des courbes de niveaux de cette énergie est représentée sur la Figure 2.2 à droite. L'origine $k = 0$ se situe au centre de ce graphe et

$$\begin{aligned} \min(\varepsilon_k) = -4t &\Leftrightarrow k_x = k_y = 0 \\ \varepsilon = 0 &\Leftrightarrow k_x = \pm k_y \pm \pi \\ \max(\varepsilon_k) = +4t &\Leftrightarrow k_x = \pm k_y = \pm\pi. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Dans le cas idéal où toutes les particules sont condensées, celles-ci occupent l'état de plus basse énergie $\varepsilon_{k=0} = -4t$.

Lorsque de faibles interactions entrent en jeu dans cette phase, soit $U \ll t$, une faible perturbation extérieure permettra aux particules de se déplacer de façon cohérente, sans aucune

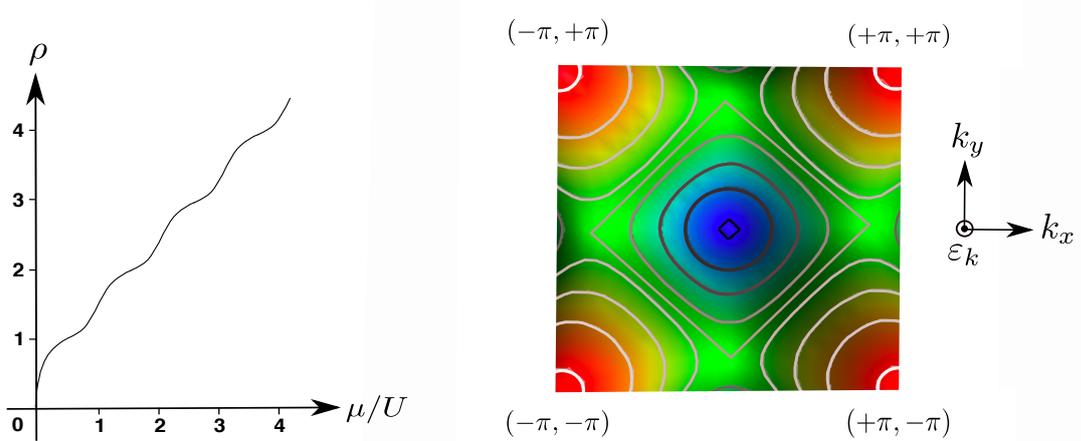


FIGURE 2.2 – À gauche: représentation schématique de la densité en fonction du potentiel chimique lorsque le terme d'interaction est très faible devant le terme cinétique, soit $U \ll t$. À droite: représentation des courbes de niveaux de l'énergie cinétique $\varepsilon_k = -2t (\cos(k_x) + \cos(k_y))$ du mode k . Au centre, le vecteur d'onde est nul $k = 0$ et l'énergie est *minimale* $\varepsilon_k = -4t$. Les quatre pics en rouge situés en $k_x = \pm k_y = \pm\pi$ correspondent à l'énergie *maximale* $\varepsilon_k = +4t$.

friction. Dans ce cas, la phase superfluide se développe, phase dans laquelle la symétrie de jauge $U(1)$ est spontanément brisée. Nous traçons sur la Figure 2.2 à gauche la densité en fonction du potentiel chimique lorsque le terme d'interaction est très faible devant le terme cinétique, soit $U \ll t$. À l'inverse du cas $t = 0$, aucun plateau n'apparaît sur ce graphe, ce qui implique que la compressibilité $\kappa = \partial\rho/\partial\mu$ ne s'annule jamais: le système est toujours compressible.

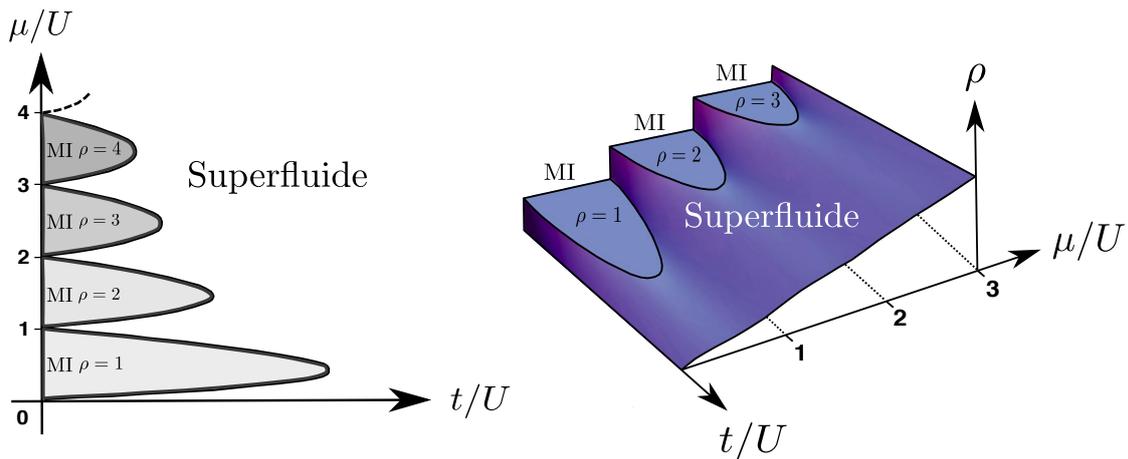


FIGURE 2.3 – À gauche: diagramme de phase dans le plan $(t/U, \mu/U)$ composé de quatre phases de Mott (MI) et de la phase superfluide. À droite: évolution de la densité pour chaque point $(t/U, \mu/U)$ du diagramme de phase de gauche. La phase de Mott $\rho = 4$ n'est pas représentée sur ce graphe (source Greiner [65]).

À l'inverse du condensat de Bose-Einstein, un ordre à longue portée n'est pas strictement nécessaire pour que cette phase apparaisse. En effet, un quasi-ordre à longue portée permet à la superfluidité de s'établir. En vertu du théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg [67, 68, 69], cette phase peut donc exister en 1D à température nulle ainsi qu'en 2D à basse température et à température nulle.

Cas général

Dans le cas général, lorsque t et U sont simultanément non nuls, une compétition entre le terme cinétique et le terme potentiel va se produire afin de minimiser l'énergie. Le rapport t/U et la densité, ou le rapport μ/U dans l'ensemble grand canonique, vont déterminer la phase adoptée par le système, *i.e.* à température nulle, soit une phase de Mott, soit la phase superfluide.

Partant du cas sans énergie cinétique, lorsque t/U augmente, le terme cinétique s'active et lisse la courbe de $\rho(\mu)$ présentée sur la Figure 2.1 à gauche. La largeur des plateaux de densité constante diminue progressivement pour finalement disparaître totalement. Dans ce cas, la courbe de $\rho(\mu)$ présente l'allure de la Figure 2.2 à gauche et seule la phase superfluide est adoptée par le système. L'évolution progressive de $\rho(\mu)$ pour différentes valeurs de t/U est présentée sur la Figure 2.3 à droite. Le diagramme de phase de la Figure 2.3 à gauche correspond à la projection de la figure de droite dans le plan $(t/U, \mu/U)$.

Deuxième partie

Hamiltoniens et outils numériques

Chapitre 3

Hamiltoniens de Bose-Hubbard pour bosons de spin-1 et $1/2$

Durant cette thèse, nous nous sommes intéressés à deux types de systèmes, l'un étant une variante plus simple du second. Nous présentons, tout d'abord, le système de bosons de spin-1, ainsi que le hamiltonien qui le modélise. Ce système, qui servira de référence pour le second, est le plus complexe des deux, bien qu'étant le plus naturel. La complexité de ce système résulte, d'une part, du fait que trois espèces de bosons interagissent et se convertissent entre elles et, d'autre part, des propriétés magnétiques émergentes. Un couplage optique entre deux des trois espèces permet de réduire ce système en un système moins complexe car composé de deux espèces seulement. Dans la seconde section, nous expliquons comment obtenir ce système et nous présentons son hamiltonien. Nous nommons ce système de bosons de spin-1 réduit à deux états de spins effectifs « système de bosons de spin- $1/2$ ».

Nous avons choisi d'utiliser deux méthodes afin d'étudier ces deux systèmes: la méthode de Monte Carlo quantique et la méthode du champ moyen. La méthode de Monte Carlo quantique est une méthode exacte dans le sens où elle ne nécessite aucune simplification du hamiltonien, à l'inverse de la méthode du champ moyen. Cette méthode permet aussi de calculer un plus grand nombre de quantités physiques¹, donnant ainsi accès à une compréhension plus approfondie du système étudié. Nous présentons la méthode du champ moyen utilisée à la troisième section de ce chapitre.

3.1 Modèle de bosons de spin-1

Considérons un système d'atomes bosoniques neutres polarisables de spin-1 avec trois sous-niveaux magnétiques fondamentaux dégénérés caractérisés par le nombre quantique $\sigma = \{-1, 0, 1\}$ (par exemple: rubidium ^{85}Rb et ^{87}Rb , sodium ^{23}Na , potassium ^{39}K , césium ^{133}Cs [54]). Supposons ces atomes piégés sur un réseau optique régulier 1D de longueur L ou 2D carré de taille $L \times L$ créé par des faisceaux lasers contra-propageants. Le pas δ de ce réseau est égal à la demi-longueur d'onde λ des lasers qui le crée, soit $\delta = \lambda/2$. Le système résultant est décrit par le hamiltonien

1. Comme les fonctions de corrélations, par exemple.

de Bose-Hubbard de spin-1 suivant [9, 35, 36]:

$$\mathcal{H}_{spin1} = -t \sum_{\sigma, \langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(a_{\sigma \mathbf{r}}^\dagger a_{\sigma \mathbf{r}'} + h.c. \right) \quad (3.1)$$

$$+ \frac{U_0}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}} (\hat{n}_{\mathbf{r}} - 1) \quad (3.2)$$

$$+ \frac{U_2}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left(\hat{\mathbf{F}}_{\mathbf{r}}^2 - 2\hat{n}_{\mathbf{r}} \right) \quad (3.3)$$

$$- \mu \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}}, \quad (3.4)$$

où $\hat{\mathbf{F}}_{\mathbf{r}}$ est l'opérateur de spin sur le site i défini par

$$\hat{\mathbf{F}}_{\mathbf{r}} = \sum_{\sigma, \sigma'} a_{\sigma \mathbf{r}}^\dagger \hat{\mathbf{J}}_{\sigma \sigma'} a_{\sigma' \mathbf{r}}, \quad (3.5)$$

avec $\hat{\mathbf{J}}_{\sigma \sigma'}$ les matrices de spin-1. Il est pratique d'écrire cet opérateur sous sa forme développée telle que $\hat{\mathbf{F}} = \hat{F}_x \hat{x} + \hat{F}_y \hat{y} + \hat{F}_z \hat{z}$ pour laquelle les trois composantes de cet opérateur sont

$$\begin{cases} \hat{F}_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left((a_{\downarrow}^\dagger + a_{\uparrow}^\dagger) a_0 + a_0^\dagger (a_{\downarrow} + a_{\uparrow}) \right) \\ \hat{F}_y &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left((a_{\downarrow}^\dagger - a_{\uparrow}^\dagger) a_0 - a_0^\dagger (a_{\downarrow} - a_{\uparrow}) \right) \\ \hat{F}_z &= a_{\uparrow}^\dagger a_{\uparrow} - a_{\downarrow}^\dagger a_{\downarrow} = \hat{n}_{\uparrow} - \hat{n}_{\downarrow}, \end{cases} \quad (3.6)$$

où les notations \downarrow (ou $-$) et \uparrow (ou $+$) correspondent respectivement aux spins $\sigma = -1$ et $\sigma = +1$.

Le terme (3.1) représente le terme cinétique du hamiltonien composé des opérateurs de création et de destruction¹ tels que $a_{\sigma \mathbf{r}}^\dagger$ ($a_{\sigma \mathbf{r}}$) crée (détruit) une particule de spin $\sigma = \{-1, 0, 1\}$ sur le site $\mathbf{r} = (x, y)$ du réseau périodique. Le paramètre t représente l'élément de matrice associé au saut d'un boson quelconque se déplaçant du site \mathbf{r} vers un site plus proche voisin noté \mathbf{r}' [cf. Figure 3.2 (a)]. Ce paramètre est lié à la longueur d'onde λ des lasers et définit la masse effective M^* des bosons dans le réseau:

$$\begin{aligned} t &= \hbar^2 / (2M^* \delta^2) \\ &= 2\hbar^2 / (M^* \lambda^2). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Le contrôle expérimental de l'intensité et de la longueur d'onde des lasers créant le réseau optique permet donc de contrôler le taux de déplacement des bosons piégés. Dans le cadre de cette thèse, nous fixerons toujours $t = 1$ comme référence énergétique.

Le terme (3.2) est l'énergie d'interaction indépendante du spin avec $U_0 > 0$ (cf. Figure 3.2 (b) à gauche) et $\hat{n}_{\mathbf{r}} \equiv \sum_{\sigma} \hat{n}_{\sigma \mathbf{r}} = \sum_{\sigma} a_{\sigma \mathbf{r}}^\dagger a_{\sigma \mathbf{r}}$ l'opérateur densité qui compte le nombre total de bosons sur le site \mathbf{r} .

1. Dans ce chapitre, nous omettons les chapeaux sur ces opérateurs afin d'alléger les notations.

Le terme (3.3) du hamiltonien représente les interactions spin-spin sur site d'amplitude U_2 . Ce terme modélise le changement possible du spin de deux particules lors d'une collision sur site [cf. Figure 3.2 (c)].

Les paramètres U_0 et U_2 sont définis par [9, 36]

$$U_0 = \frac{4\pi\hbar^2(a_0 + 2a_2)}{3m} \quad (3.8)$$

$$U_2 = \frac{4\pi\hbar^2(a_2 - a_0)}{3m}, \quad (3.9)$$

où m est la masse d'un boson et a_0 (a_2) est la longueur de diffusion du canal de spin-0 (spin-1) ajustable *via* les résonances de Feshbach optiques [25, 27, 62, 63, 64, 70, 71]. Le paramètre U_2 peut être positif ou négatif en fonction de la nature des bosons piégés. À titre d'exemples:

- $U_2 > 0$ pour le sodium ^{23}Na pour lequel $a_2 \simeq 52 a_B$ et $a_0 \simeq 46 a_B$;
- $U_2 < 0$ pour le rubidium ^{87}Rb pour lequel $a_2 \simeq 107 a_B$ et $a_0 \simeq 110 a_B$,

où a_B est le rayon de Bohr. L'évolution du rapport $U_2/U_0 = (a_2 - a_0)/(a_0 + 2a_2)$ en fonction des longueurs de diffusion a_0 et a_2 est montrée sur la Figure 3.1. Nous indiquons sur ce graphe la position du sodium ^{23}Na pour lequel $U_2/U_0 \simeq 0.04$, ainsi que la position du rubidium ^{87}Rb pour lequel $U_2/U_0 \simeq -0.01$ [28, 37, 72]. Le signe négatif (positif) du terme U_2 , en facteur devant le produit scalaire de l'opérateur de spin $\hat{\mathbf{F}}_{\mathbf{r}}$ sur site avec lui même, est à l'origine de l'appellation « ferromagnétique » (« antiferromagnétique ») dans la bibliographie [4, 36]. Cette appellation est quelque peu abusive puisqu'elle ne correspond pas au développement d'ordres à longue portée mais à la présence, ou à l'absence, d'un moment magnétique local, sur site.

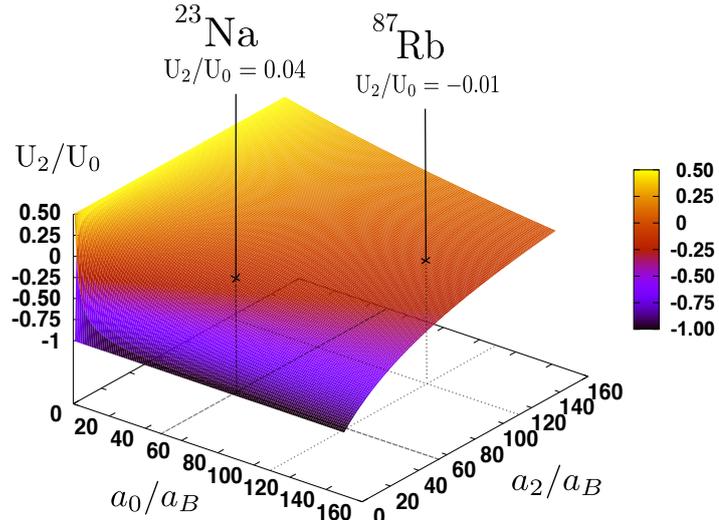


FIGURE 3.1 – Rapport $U_2/U_0 = (a_2 - a_0)/(a_0 + 2a_2)$ en fonction des longueurs de diffusion a_0 et a_2 en unité de rayon de Bohr a_B .

Le terme standard (3.4) du hamiltonien permet de travailler dans l'ensemble grand canonique et fait intervenir le potentiel chimique μ , identique pour chacune des trois espèces de bosons.

La forme développée du hamiltonien est

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{spin1} = & -t \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(a_{\downarrow \mathbf{r}}^\dagger a_{\downarrow \mathbf{r}'} + a_{0 \mathbf{r}}^\dagger a_{0 \mathbf{r}'} + a_{\uparrow \mathbf{r}}^\dagger a_{\uparrow \mathbf{r}'} + h.c. \right) \\
 & + \left(\frac{U_0 + U_2}{2} \right) \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\downarrow \mathbf{r}} (\hat{n}_{\downarrow \mathbf{r}} - 1) \\
 & + \left(\frac{U_0 + U_2}{2} \right) \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\uparrow \mathbf{r}} (\hat{n}_{\uparrow \mathbf{r}} - 1) \\
 & + \frac{U_0}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{0 \mathbf{r}} (\hat{n}_{0 \mathbf{r}} - 1) \\
 & + (U_0 + U_2) \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{0 \mathbf{r}} \hat{n}_{\downarrow \mathbf{r}} \\
 & + (U_0 + U_2) \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{0 \mathbf{r}} \hat{n}_{\uparrow \mathbf{r}} \\
 & + (U_0 - U_2) \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\uparrow \mathbf{r}} \hat{n}_{\downarrow \mathbf{r}} \\
 & + U_2 \sum_{\mathbf{r}} \left(a_{0 \mathbf{r}}^\dagger a_{0 \mathbf{r}}^\dagger a_{\downarrow \mathbf{r}} a_{\uparrow \mathbf{r}} + h.c. \right) \\
 & - \mu \sum_{\mathbf{r}} (\hat{n}_{\downarrow \mathbf{r}} + \hat{n}_{0 \mathbf{r}} + \hat{n}_{\uparrow \mathbf{r}}). \tag{3.10}
 \end{aligned}$$

Cette forme s'obtient en développant les termes (3.2) et (3.3) du hamiltonien initial. Cette écriture met en évidence les différents coûts d'interaction sur site entre chaque espèce représentés schématiquement sur la Figure 3.2 (b). De plus, cette forme d'écriture permet de voir clairement que ce hamiltonien est inchangé lorsque l'on permute les opérateurs densités $\hat{n}_{\uparrow \mathbf{r}}$ et $\hat{n}_{\downarrow \mathbf{r}}$. Le hamiltonien est donc invariant par transposition des opérateurs $\hat{n}_{\uparrow \mathbf{r}}$ et $\hat{n}_{\downarrow \mathbf{r}}$, soit $\mathcal{H}_{spin1}(\hat{n}_{\uparrow \mathbf{r}}, \hat{n}_{\downarrow \mathbf{r}}) = \mathcal{H}_{spin1}(\hat{n}_{\downarrow \mathbf{r}}, \hat{n}_{\uparrow \mathbf{r}})$. Cette propriété implique que les espèces de spin +1 et -1 ont des propriétés identiques. Ceci permet de comprendre pourquoi le modèle à deux états de spins, ou bosons de spin-1/2, présenté dans la section suivante et étudié à la Partie 3 possède de nombreux points communs avec ce modèle à trois états de spins.

La transformation globale de jauge du groupe U(1) laisse aussi inchangé ce hamiltonien, *i.e.* $\mathcal{H}_{spin1}(a_{\uparrow} e^{i\phi}, a_0 e^{i\phi}, a_{\downarrow} e^{i\phi}) = \mathcal{H}_{spin1}(a_{\uparrow}, a_0, a_{\downarrow})$. Nous soulignons cette propriété générale, car nous verrons par la suite que la méthode du champ moyen utilisée rompt cette symétrie. La forme compacte précédemment présentée [terme (3.3)] permet de remarquer une symétrie intéressante de ce hamiltonien: l'isotropie du spin. En effet, seul le carré de l'opérateur de spin \mathbf{F} intervient: aucune orientation spatiale n'est donc favorisée.

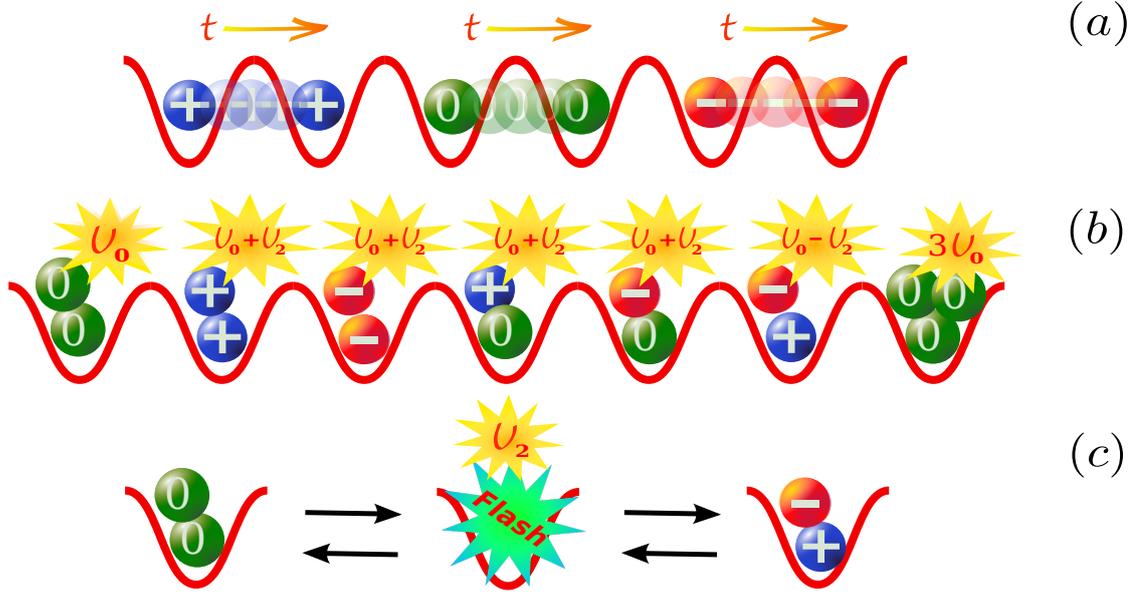


FIGURE 3.2 – Représentation des différents termes du hamiltonien [Eq. (3.10)] pour des bosons piégés sur un réseau optique 1D sinusoïdal représenté en rouge. En (a) l’effet tunnel, en (b) les interactions sur site pour les trois espèces de bosons et en (c) la conversion du moment cinétique de deux bosons situés sur le même site.

3.2 Modèle à deux états de spins ou « bosons de spin-1/2 »

Comme le cas précédent, considérons un système d’atomes bosoniques neutres polarisables de spin-1 avec trois sous-niveaux magnétiques dégénérés caractérisés par le nombre quantique $S_z = \{-1, 0, 1\}$. Supposons ces atomes piégés sur un réseau optique. Il est possible de coupler les états fondamentaux de spin $S_z = -1$ et $S_z = +1$ en utilisant la polarisation des lasers générant ce réseau optique et les transitions atomiques σ^- et σ^+ [73, 74]. Le hamiltonien du système de bosons de spin-1/2 est établi par Krutitsky *et al.* en décomposant l’opérateur de champ spinoriel dans la base des spineurs de Wannier. Il aboutit alors à deux modes propres orthogonaux de moment cinétique global nul, modes de Bloch, nommés respectivement 0 et Λ . Ce système présente l’avantage de réduire le système de bosons de spin-1 à un système de bosons à deux états de spin effectif $\sigma = \{0, \Lambda\}$, tout en conservant certaines propriétés. Les Parties 3 et 4 de cette thèse montrent que ce système présente des similarités avec celui des bosons de spin-1. En effet, l’invariance par transposition des opérateurs $\hat{n}_{\uparrow\mathbf{r}}$ et $\hat{n}_{\downarrow\mathbf{r}}$ du hamiltonien de boson de spin-1 [cf. Eq (3.10)] suggère que les espèces de spin +1 et -1 ont des observables égales en moyenne. Nous nous contentons ici de donner le résultat du calcul et renvoyons le lecteur intéressé par les détails de ce calcul vers les références [7, 8].

Le hamiltonien de Bose-Hubbard obtenu par Krutitsky *et al.* est

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{spin1/2}^K &= -t \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(a_{0\mathbf{r}}^\dagger a_{0\mathbf{r}'} + a_{\Lambda\mathbf{r}}^\dagger a_{\Lambda\mathbf{r}'} + h.c. \right) \\
 &+ \frac{U_0}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{0\mathbf{r}} (\hat{n}_{0\mathbf{r}} - 1) \\
 &+ \frac{U_0}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} (\hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} - 1) \\
 &+ (U_0 + U_2) \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{0\mathbf{r}} \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} \\
 &- \frac{|U_2|}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left(a_{0\mathbf{r}}^\dagger a_{0\mathbf{r}}^\dagger a_{\Lambda\mathbf{r}} a_{\Lambda\mathbf{r}} + h.c. \right) \\
 &- \mu \sum_{\mathbf{r}} (\hat{n}_{0\mathbf{r}} + \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}}), \tag{3.11}
 \end{aligned}$$

où l'opérateur $a_{\sigma\mathbf{r}}^\dagger$ ($a_{\sigma\mathbf{r}}$) crée (détruit) un boson de "spin" $\sigma = \{0, \Lambda\}$ sur le site $\mathbf{r} = (x, y)$ et l'opérateur $\hat{n}_{\sigma\mathbf{r}} = a_{\sigma\mathbf{r}}^\dagger a_{\sigma\mathbf{r}}$ compte le nombre de bosons de spin σ sur le site \mathbf{r} . Le paramètre $U_0 > 0$ est l'énergie de répulsion sur site de deux particules identiques et U_2 est l'énergie de conversion du spin ($U_2 > 0$ ou $U_2 < 0$). Pour ce modèle aussi, le potentiel chimique μ est supposé identique pour les deux espèces et le paramètre t associé au déplacement des particules par effet tunnel sur les sites plus proches voisins servira de référence énergétique en fixant $t = 1$.

Cependant, ce choix de hamiltonien n'est pas le seul possible. En effet, nous pouvons remarquer que le signe devant le terme

$$\frac{|U_2|}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left(a_{0\mathbf{r}}^\dagger a_{0\mathbf{r}}^\dagger a_{\Lambda\mathbf{r}} a_{\Lambda\mathbf{r}} + h.c. \right) \tag{3.12}$$

du hamiltonien Eq. (3.11) n'a aucune incidence sur l'énergie libre totale. Ce système est donc aussi bien décrit par le hamiltonien suivant:

$$\mathcal{H}_{spin1/2} = -t \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(a_{0\mathbf{r}}^\dagger a_{0\mathbf{r}'} + a_{\Lambda\mathbf{r}}^\dagger a_{\Lambda\mathbf{r}'} + h.c. \right) \tag{3.13}$$

$$+ \frac{U_0}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{0\mathbf{r}} (\hat{n}_{0\mathbf{r}} - 1) \tag{3.14}$$

$$+ \frac{U_0}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} (\hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} - 1) \tag{3.15}$$

$$+ (U_0 + U_2) \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{0\mathbf{r}} \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} \tag{3.16}$$

$$+ \frac{U_2}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left(a_{0\mathbf{r}}^\dagger a_{0\mathbf{r}}^\dagger a_{\Lambda\mathbf{r}} a_{\Lambda\mathbf{r}} + h.c. \right) \tag{3.17}$$

$$- \mu \sum_{\mathbf{r}} (\hat{n}_{0\mathbf{r}} + \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}}). \tag{3.18}$$

Il est évident que ce hamiltonien est identique à $\mathcal{H}_{spin1/2}^K$ [Eq. (3.11)] pour le cas $U_2 < 0$. Pour le cas $U_2 > 0$, nous pouvons voir que ce choix de phase n'a aucune incidence sur l'énergie du système en écrivant la fonction de partition

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta H_{spin1/2}^K} \quad (3.19)$$

et en développant l'exponentielle en série de puissances, soit

$$e^{-\beta H_{spin1/2}^K} = \sum_{k=0}^{\infty} (-\beta H_{spin1/2}^K)^k / k!. \quad (3.20)$$

Nous pouvons alors remarquer que seules les puissances paires du terme (3.12) peuvent contribuer à la trace en ramenant le système dans son état initial en effectuant un nombre pair de conversions. Le signe positif ou négatif devant le terme (3.12) est donc sans importance. Pour $U_2 > 0$, il est possible de transformer le hamiltonien étudié par Krutitsky $\mathcal{H}_{spin1/2}^K$ [Eq. (3.11)] en celui présenté ci-dessus $\mathcal{H}_{spin1/2}$ par la simple transformation de phase $a_{0\mathbf{r}} \rightarrow a_{0\mathbf{r}} e^{i\pi/2}$.

Ces arguments expliquent pourquoi ces deux choix de hamiltoniens sont tous deux valides et donnent la même énergie libre. Plus généralement, ces deux hamiltoniens donnent les mêmes résultats pour toutes les quantités laissées invariantes par la transformation $a_{0\mathbf{r}} \rightarrow a_{0\mathbf{r}} e^{i\pi/2}$ lorsque celles-ci sont calculées avec des méthodes exactes. Cependant, ceci n'est plus forcément le cas lorsque des approximations sont faites et nous montrons dans la Partie 3 que ces deux formulations ne sont plus équivalentes lorsque l'on étudie ce système avec la méthode du champ moyen présentée dans la section suivante. En effet, nous montrons que le choix de Krutitsky [Eq. (3.11)] n'est pas le choix le plus cohérent avec les résultats obtenus avec la méthode de Monte Carlo quantique pour $U_2 > 0$.

Nous avons donc choisi la formulation hamiltonienne $\mathcal{H}_{spin1/2}$ afin d'étudier ce système de bosons de spin-1/2. Comme nous l'avons fait précédemment pour le système de bosons de spin-1, nous allons maintenant détailler les différents termes de ce hamiltonien. Le terme (3.13) représente le terme cinétique du hamiltonien. Nous représentons schématiquement ce terme sur la Figure 3.3 en (a) sur un réseau optique 1D. Les termes (3.14), (3.15) et (3.16) du hamiltonien représentent les coûts d'interaction sur site. Ces trois termes sont schématisés sur la Figure 3.3 en (b).

Le terme (3.17) du hamiltonien modélise le changement possible du spin de deux particules sur site tout en conservant le moment cinétique total. Le mécanisme est le suivant: deux bosons de spin Λ peuvent se convertir en deux bosons de spin 0 lors d'une collision sur site, et réciproquement. Ces deux possibilités sont schématisées sur la Figure 3.3 en (c). D'après le terme (3.17) du hamiltonien, l'élément de matrice associé à une telle conversion est proportionnel à $U_2/2$. Les termes U_0 et U_2 sont respectivement définis à partir des longueurs de diffusion symétrique a_s et antisymétrique a_a :

$$U_0 \simeq 4\hbar^2 a_s / m a_{\perp}^2 \quad (3.21)$$

$$U_2 \simeq 4\hbar^2 a_a / m a_{\perp}^2, \quad (3.22)$$

$$(3.23)$$

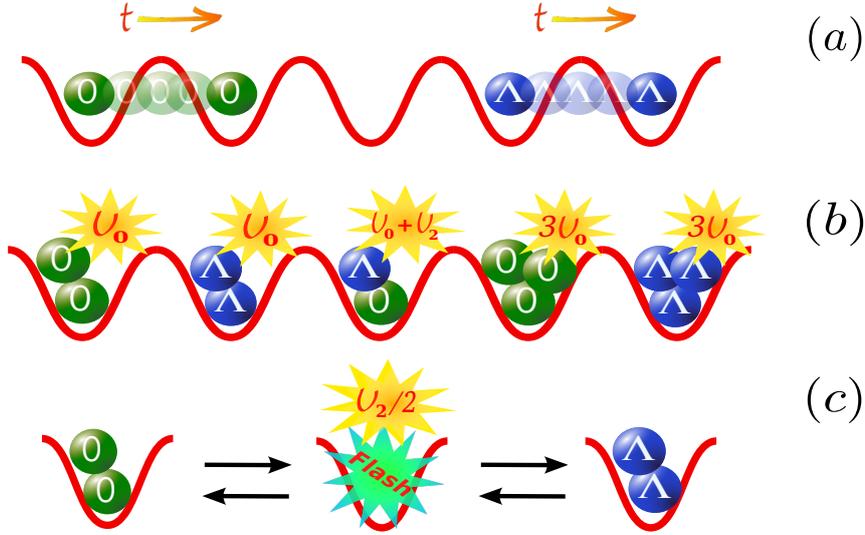


FIGURE 3.3 – Représentation des différents termes du hamiltonien $\mathcal{H}_{spin1/2}$ pour des bosons piégés sur un réseau optique 1D sinusoïdal représenté en rouge. En (a) l'effet tunnel, en (b) les interactions sur site pour les deux espèces de bosons et en (c) la conversion du moment cinétique de deux bosons situés sur le même site.

où m est la masse d'un boson et $a_{\perp} = \sqrt{2\hbar/m\omega_{\perp}}$ la largeur de l'état fondamental. La fréquence ω_{\perp} est la fréquence du potentiel harmonique qui confine les atomes dans la direction transverse [7, 8]. On peut écrire plus simplement $U_{0(2)} \simeq 2\hbar\omega_{\perp}a_{s(a)}$. Enfin, le terme standard (3.18) fait intervenir le potentiel chimique μ .

Nous pouvons remarquer que ce hamiltonien est inchangé lorsque l'on permute les opérateurs densités $\hat{n}_{0\mathbf{r}}$ et $\hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}}$. Le hamiltonien est donc invariant par transposition des opérateurs $\hat{n}_{0\mathbf{r}}$ et $\hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}}$, soit $\mathcal{H}_{spin1/2}(\hat{n}_{0\mathbf{r}}, \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}}) = \mathcal{H}_{spin1/2}(\hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}}, \hat{n}_{0\mathbf{r}})$. La transformation globale de jauge du groupe $U(1)$ laisse aussi inchangé ce hamiltonien. La méthode du champ moyen utilisée par la suite rompt cette symétrie générale qui assure la conservation du nombre de particules.

Une autre formulation du hamiltonien $\mathcal{H}_{spin1/2}$, basée sur l'approche des bosons de Schwinger [75], sera utile par la suite. Celle-ci fait intervenir les opérateurs de spin $\hat{S}_{\mathbf{r}}^z = (\hat{n}_{0\mathbf{r}} - \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}})/2$, $\hat{S}_{\mathbf{r}}^- = a_{\Lambda\mathbf{r}}^{\dagger}a_{0\mathbf{r}}$ et $\hat{S}_{\mathbf{r}}^+ = a_{0\mathbf{r}}^{\dagger}a_{\Lambda\mathbf{r}}$, ce qui permet d'écrire

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{spin1/2} &= -t \sum_{\sigma, \langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\sigma\mathbf{r}'} + h.c. \right) + \frac{U_0}{2} \sum_{\sigma, \mathbf{r}} \hat{n}_{\sigma\mathbf{r}} (\hat{n}_{\sigma\mathbf{r}} - 1) + (U_0 + U_2) \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{0\mathbf{r}} \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} \\ &\quad + \frac{U_2}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left(a_{0\mathbf{r}}^{\dagger} a_{0\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\Lambda\mathbf{r}} a_{\Lambda\mathbf{r}} + a_{\Lambda\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\Lambda\mathbf{r}}^{\dagger} a_{0\mathbf{r}} a_{0\mathbf{r}} \right) - \mu \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (3.24)$$

$$\begin{aligned} &= -t \sum_{\sigma, \langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\sigma\mathbf{r}'} + h.c. \right) + \frac{U_0}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}} (\hat{n}_{\mathbf{r}} - 1) + \frac{U_2}{4} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}}^2 \\ &\quad + \frac{U_2}{2} \sum_{\mathbf{r}} \left(\hat{S}_{\mathbf{r}}^+ \hat{S}_{\mathbf{r}}^+ + \hat{S}_{\mathbf{r}}^- \hat{S}_{\mathbf{r}}^- - 2\hat{S}_{\mathbf{r}}^z \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \right) - \mu \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

où l'opérateur $\hat{n}_{\mathbf{r}} = \hat{n}_{0\mathbf{r}} + \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}}$ compte le nombre total de bosons sur le site \mathbf{r} . Afin d'obtenir une forme plus intuitive, nous utilisons les opérateurs $\hat{S}_{\mathbf{r}}^x$ et $\hat{S}_{\mathbf{r}}^y$ tels que $\hat{S}_{\mathbf{r}}^+ = \hat{S}_{\mathbf{r}}^x + i\hat{S}_{\mathbf{r}}^y$ et $\hat{S}_{\mathbf{r}}^- = \hat{S}_{\mathbf{r}}^x - i\hat{S}_{\mathbf{r}}^y$. Nous obtenons alors les écritures suivantes:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{spin1/2} &= -t \sum_{\sigma, \langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(a_{\sigma\mathbf{r}}^\dagger a_{\sigma\mathbf{r}'} + h.c. \right) + \frac{U_0}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}} (\hat{n}_{\mathbf{r}} - 1) + \frac{U_2}{4} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}}^2 \\
 &\quad + U_2 \sum_{\mathbf{r}} \left(2(\hat{S}_{\mathbf{r}}^x)^2 - (\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{r}})^2 \right) - \mu \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}} \\
 &= -t \sum_{\sigma, \langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(a_{\sigma\mathbf{r}}^\dagger a_{\sigma\mathbf{r}'} + h.c. \right) + \frac{U_0}{2} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}} (\hat{n}_{\mathbf{r}} - 1) + \frac{U_2}{4} \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}}^2 \\
 &\quad + U_2 \sum_{\mathbf{r}} \left((\hat{S}_{\mathbf{r}}^x)^2 - \left[(\hat{S}_{\mathbf{r}}^y)^2 + (\hat{S}_{\mathbf{r}}^z)^2 \right] \right) - \mu \sum_{\mathbf{r}} \hat{n}_{\mathbf{r}}. \tag{3.26}
 \end{aligned}$$

Ces dernières formulations seront exploitées dans la troisième partie de cette thèse. À l'inverse du système de bosons de spin-1, la minimisation de l'énergie libre va imposer une orientation spatiale préférentielle aux spins selon le signe de U_2 . Lorsque la température est faible ou nulle, les spins auront tendance à adopter:

- un ordre de symétrie discrète, de type Ising, suivant l'axe x lorsque $U_2 < 0$ afin de minimiser le terme $(\hat{S}_{\mathbf{r}}^x)^2$;
- un ordre de symétrie continue dans le plan yz lorsque $U_2 > 0$ afin de minimiser le terme $(\hat{S}_{\mathbf{r}}^y)^2 + (\hat{S}_{\mathbf{r}}^z)^2$.

Nous distinguons théoriquement deux types d'ordres: l'ordre à longue portée (LRO) et le quasi-ordre à longue portée (QLRO). Le LRO est tel que les fonctions de corrélations $C(R)$ tendent asymptotiquement vers une valeur constante: $C(R \rightarrow \infty) \sim cste$. Le QLRO est tel que les fonctions de corrélations présentent asymptotiquement une faible décroissance en loi de puissance: $C(R \rightarrow \infty) \propto R^{-\eta}$, avec typiquement $\eta \leq 1/4$.

Cette considération théorique nous servira de référence afin d'interpréter les résultats numériques, qui à eux seuls, ne nous permettent pas de discriminer le LRO du QLRO pour les tailles étudiées. Par ailleurs, l'intérêt d'étudier le QLRO est lié aux tailles limitées des systèmes expérimentaux, typiquement composés de quelques milliers de sites. Les effets de taille finie rencontrés dans nos simulations numériques peuvent donc aussi apparaître expérimentalement.

D'après le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg [67, 68, 69], la température, nulle ou finie et la dimension spatiale sont d'une importance capitale pour le développement de ces ordres. Les différents types d'ordres possibles et attendus sont résumés dans le Tableau 3.1.

		$k_B T = 0$	$k_B T \lesssim t, U$
$U_2 < 0$	1D	LRO, type Ising, axe x	absence d'ordre
	2D	LRO, type Ising, axe x	LRO, type Ising, axe x
$U_2 > 0$	1D	QLRO, symétrie continue, plan yz	absence d'ordre
	2D	LRO, symétrie continue, plan yz	QLRO, symétrie continue, plan yz

TABLE 3.1 – Ordre (LRO) et quasi-ordre (QLRO) de spin à longue portée possibles et attendus en fonction de la température et de la dimension.

3.3 Hamiltoniens simplifiés : théorie du champ moyen

Dans les sections précédentes, nous avons présenté le hamiltonien des deux systèmes étudiés dans cette thèse. L'étude analytique exacte très limitée de tels systèmes, même en 1D, donne tout son sens à l'approche numérique. Il existe différentes façons d'étudier ces systèmes numériquement [76]:

- la diagonalisation exacte [77, 78];
- la DMRG, pour l'étude de système 1D: *Density-Matrix Renormalization Group*, proposée par White en 1992 [79, 80, 81, 82, 83, 84, 85, 86];
- la méthode de Monte Carlo quantique dont les algorithmes les plus courants sont: le *World-Line algorithm* [87], le *Loop algorithm* [88, 89, 90], ainsi que des algorithmes plus évolués en temps imaginaire continu, tels que le *Worm algorithm* [91, 92, 93] et le développement en séries stochastiques (SSE) [94].

La théorie du champ moyen, approche la plus simple, est aussi souvent utilisée. Cette approche permet de simplifier le hamiltonien *via* une approximation et nécessite parfois une résolution numérique du hamiltonien simplifié. Afin d'obtenir des informations sur la physique à l'équilibre de ces deux systèmes, nous avons principalement utilisé deux méthodes: la méthode de Monte Carlo quantique avec l'algorithme des Fonctions de Green Stochastiques [95, 96] et la théorie du champ moyen. Nous verrons dans la partie suivante qu'à température nulle ces deux méthodes présentent des avantages. En effet, la théorie du champ moyen permet parfois d'obtenir les informations physiques essentielles, bien qu'approximatives, pour le coût d'une diagonalisation numérique assez rapide, alors que la méthode de Monte Carlo quantique permet une analyse exacte bien plus détaillée mais est complexe à implémenter et nécessite un temps de calcul parfois assez long¹.

L'approximation usuelle de la théorie du champ moyen consiste à découpler les termes d'interactions entre les particules afin d'obtenir un système effectif à une particule interagissant avec la moyenne de la densité. Les conversions du spin des particules des systèmes étudiés dans cette thèse rend cette approche difficile. Nous avons donc appliqué cette transformation

1. Simulations de quatre jours, en moyenne.

au terme cinétique des hamiltoniens afin de réduire le problème à un problème sur "un site" [7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15]. Cette approximation diminue considérablement l'espace des états du système, réduit à un site, ce qui permet une diagonalisation numérique exacte du hamiltonien en champ moyen. Considérons le terme cinétique standard, à d dimension(s), suivant

$$\mathcal{T} = -t \sum_{\sigma, \langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \left(a_{\sigma \mathbf{r}}^\dagger a_{\sigma \mathbf{r}'} + h.c. \right), \quad (3.27)$$

avec $\sigma = \{-1, 0, +1\}$ ou $\sigma = \{0, \Lambda\}$ selon le modèle considéré. Nous supposons que le système est homogène, *i.e.* que les opérateurs $a_{\sigma \mathbf{r}}^\dagger$ et $a_{\sigma \mathbf{r}}$ fluctuent autour de leur valeur moyenne $\langle a_{\sigma \mathbf{r}}^\dagger \rangle^* = \langle a_{\sigma \mathbf{r}} \rangle \equiv \psi_\sigma$ invariante par translation dans l'espace, où $\psi_\sigma \in \mathbb{C}$. Avec cette méthode, le paramètre d'ordre de la phase condensée est représenté par le champ $\boldsymbol{\psi} = (\psi_-, \psi_0, \psi_+)$ pour le modèle de bosons de spin-1 et $\boldsymbol{\psi} = (\psi_0, \psi_\Lambda)$ pour le modèle de bosons de spin-1/2.

Cette quantité est telle que:

- $\boldsymbol{\psi} = \mathbf{0}$ est la signature d'une phase non condensée. À température nulle, la phase adoptée par le système sera la phase isolante de Mott: phase incompressible pour laquelle le nombre de particules par site est un nombre entier dont les fluctuations sont nulles. Lorsque la température est non nulle, le système peut aussi adopter une phase liquide de Bose compressible. Dans ce cas, une analyse plus approfondie des quantités thermodynamiques, telle que la compressibilité, est nécessaire afin de discriminer la phase isolante de Mott de la phase liquide de Bose, ces deux « phases » n'étant que deux limites de la même phase séparées par un « corosover » ;
- $\boldsymbol{\psi} \neq \mathbf{0}$ est la signature d'une phase condensée qui brise spontanément la symétrie de jauge U(1).

La dimension du système et la température ont un impact sur cette phase condensée de symétrie continue, nommée « condensat de Bose-Einstein ». En effet, le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg [67, 68, 69] démontre qu'aucune brisure spontanée de symétrie continue ne peut exister à température finie pour une dimension inférieure ou égale à $d = 2$. À température finie, le condensat de Bose-Einstein n'existe donc que pour un système 3D à très basse température ($T < T_c$) [76].

Lorsque l'énergie thermique $k_B T$ peut être négligée devant toutes les autres échelles d'énergie du système, nous pouvons considérer la température comme nulle. Dans cette limite, la formulation en intégrales de chemins de Feynman de la Physique Quantique permet l'équivalence de la Mécanique Statistique d'un système quantique de dimension d à $T = 0$ à celle d'un système classique de dimension $d + 1$ [97]. L'analogie entre la fonction de partition et l'opérateur d'évolution en Physique Quantique permet d'interpréter l'inverse de la température β comme un temps imaginaire, dimension additionnelle à température nulle.

Ainsi, en vertu du théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg à température nulle, une phase condensée de Bose-Einstein ne peut exister que pour un système de dimension $d \geq 2$. Cependant, à température nulle, il est possible qu'un quasi-ordre à longue portée se développe dans un système 1D, permettant ainsi à la phase superfluide d'exister. Dans ce cas, la densité superfluide, égale à la fraction condensée selon la méthode du champ moyen, qui confond la phase

condensée de Bose-Einstein avec la phase superfluide quelle que soit la dimension, est donnée par $\rho_s = |\boldsymbol{\psi}|^2 = \sum_{\sigma} |\psi_{\sigma}|^2$. Nous pouvons donc conclure que, en 1D à température nulle en présence d'interactions, seule la phase superfluide se développe lorsque $\boldsymbol{\psi} \neq 0$.

Les composantes ψ_{σ} peuvent être supposées réelles sans affecter la physique. En effet, M. Foss-Feig *et al.* ont montré que ce choix implique uniquement que $\langle \hat{S}_{\mathbf{r}}^y \rangle = 0, \forall \mathbf{r}$: le spin est donc restreint à évoluer uniquement dans le plan xz [11]. Cette brisure de symétrie spatiale n'a pas d'autre conséquence et peut être utilisée afin de simplifier le problème. En admettant ces hypothèses, il nous est donc permis d'écrire $a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} = \delta_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} + \psi_{\sigma}$ et $a_{\sigma\mathbf{r}} = \delta_{\sigma\mathbf{r}} + \psi_{\sigma}$ où $\delta_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger}$ et $\delta_{\sigma\mathbf{r}}$ représentent les fluctuations, ce qui donne:

$$\begin{aligned} a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\sigma\mathbf{r}'} &= (\delta_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} + \psi_{\sigma})(\delta_{\sigma\mathbf{r}'} + \psi_{\sigma}) \\ &= \delta_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} \delta_{\sigma\mathbf{r}'} + \psi_{\sigma} \delta_{\sigma\mathbf{r}'} + \delta_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} \psi_{\sigma} + \psi_{\sigma}^2 \\ &= (a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} - \psi_{\sigma})(a_{\sigma\mathbf{r}'} - \psi_{\sigma}) + \psi_{\sigma}(a_{\sigma\mathbf{r}'} - \psi_{\sigma}) + (a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} - \psi_{\sigma})\psi_{\sigma} + \psi_{\sigma}^2 \\ &= (a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} - \psi_{\sigma})(a_{\sigma\mathbf{r}'} - \psi_{\sigma}) + \psi_{\sigma}(a_{\sigma\mathbf{r}'} + a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger}) - \psi_{\sigma}^2. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Soit en négligeant les termes quadratiques des écarts par rapport à l'équilibre: $a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger} a_{\sigma\mathbf{r}'} \simeq \psi_{\sigma}(a_{\sigma\mathbf{r}'} + a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger}) - \psi_{\sigma}^2$. Le terme cinétique devient donc, à d dimension(s) avec l'approximation du champ moyen (CM):

$$\mathcal{T}^{CM} = -2dt \sum_{\sigma, \mathbf{r}} \left(\psi_{\sigma}(a_{\sigma\mathbf{r}} + a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger}) - \psi_{\sigma}^2 \right). \quad (3.29)$$

◦ **Modèle de bosons de spin-1:** le hamiltonien \mathcal{H}_{spin1} présenté à la Section 3.1 devient donc en champ moyen: $\mathcal{H}_{spin1}^{CM} = \sum_{\mathbf{r}} \mathcal{H}_{spin1}^{\mathbf{r}}$, avec $\mathcal{H}_{spin1}^{\mathbf{r}}$ le hamiltonien de spin-1 sur site tel que:

$$\mathcal{H}_{spin1}^{\mathbf{r}} = -2dt \sum_{\sigma} \left(\psi_{\sigma}(a_{\sigma\mathbf{r}} + a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger}) - \psi_{\sigma}^2 \right) + \frac{U_0}{2} \hat{n}_{\mathbf{r}} (\hat{n}_{\mathbf{r}} - 1) + \frac{U_2}{2} (\hat{\mathbf{F}}_{\mathbf{r}}^2 - 2\hat{n}_{\mathbf{r}}) - \mu \hat{n}_{\mathbf{r}} \quad (3.30)$$

◦ **Modèle de bosons de spin-1/2:** de même, le hamiltonien $\mathcal{H}_{spin1/2}$ [Eq. (3.24)] présenté à la Section 3.2 devient en champ moyen: $\mathcal{H}_{spin1/2}^{CM} = \sum_{\mathbf{r}} \mathcal{H}_{spin1/2}^{\mathbf{r}}$, avec $\mathcal{H}_{spin1/2}^{\mathbf{r}}$ le hamiltonien de spin-1/2 sur site tel que:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{spin1/2}^{\mathbf{r}} &= -2dt \sum_{\sigma} \left(\psi_{\sigma}(a_{\sigma\mathbf{r}} + a_{\sigma\mathbf{r}}^{\dagger}) - \psi_{\sigma}^2 \right) + \frac{U_0}{2} \sum_{\sigma} \hat{n}_{\sigma\mathbf{r}} (\hat{n}_{\sigma\mathbf{r}} - 1) \\ &+ (U_0 + U_2) \hat{n}_{0\mathbf{r}} \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} + \frac{U_2}{2} \left(a_{0\mathbf{r}}^{\dagger} a_{0\mathbf{r}} a_{\Lambda\mathbf{r}} a_{\Lambda\mathbf{r}} + h.c. \right) - \mu \hat{n}_{\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Cette méthode fait interagir les particules situées au site \mathbf{r} avec un réservoir de bosons supposés condensés avec le paramètre d'ordre $\boldsymbol{\psi}$. Ce réservoir, représenté par les nuages verts sur la Figure 3.4, peut injecter des bosons de spin σ sur le site \mathbf{r} [Figure. 3.4 (b)] ou recevoir des bosons de spin σ de ce site [Figure. 3.4 (c)]. Les opérateurs $a_{\sigma\mathbf{r}-1}$, $a_{\sigma\mathbf{r}+1}$, $a_{\sigma\mathbf{r}-1}^{\dagger}$ et $a_{\sigma\mathbf{r}+1}^{\dagger}$ sont remplacés par leur valeur moyenne ψ_{σ} .

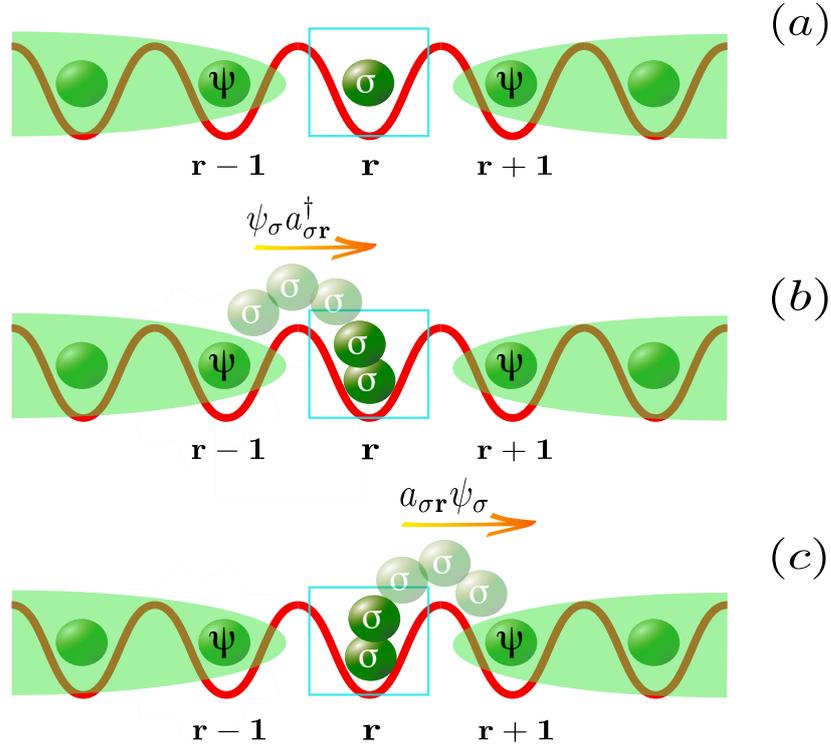


FIGURE 3.4 – Les particules situées au site \mathbf{r} interagissent avec le réservoir de bosons condensés représenté par des nuages verts. Ce réservoir peut créer des bosons de spin σ au site \mathbf{r} (b) ou détruire des bosons de spin σ de ce site (c). Les opérateurs $a_{\sigma\mathbf{r}-1}$, $a_{\sigma\mathbf{r}+1}$, $a_{\sigma\mathbf{r}-1}^\dagger$ et $a_{\sigma\mathbf{r}+1}^\dagger$ sont remplacés par leur valeur moyenne ψ_σ .

Afin d'obtenir des informations physiques sur le système étudié, il convient d'écrire la matrice hamiltonienne et de la diagonaliser numériquement. Pour cela, nous utilisons la base de Fock, base du nombre de particules sur le site \mathbf{r} telle que $\{|n\rangle\} = \{|n_-, n_0, n_+\rangle\}$ pour le modèle de spin-1 et $\{|n\rangle\} = \{|n_0, n_\Lambda\rangle\}$ pour le modèle de spin-1/2. Nous avons tronqué cette base à la valeur $n^{max} = n_-^{max} = n_0^{max} = n_+^{max} = 8$ pour le modèle de spin-1, ce qui donne une matrice de taille $(n^{max} + 1)^3 \times (n^{max} + 1)^3 = 729 \times 729$. Pour le modèle de spin-1/2, nous avons choisi $n^{max} = n_0^{max} = n_\Lambda^{max} = 12$, ce qui donne une matrice de taille $(n^{max} + 1)^2 \times (n^{max} + 1)^2 = 169 \times 169$. Ces choix nous assurent que les résultats obtenus avec cette méthode, pour des densités inférieures à $\rho = 4$, sont affectés de façon négligeable par cette troncature.

La diagonalisation numérique de la matrice hamiltonienne considérée [Eq. (3.30) ou Eq. (3.31)] donne les vecteurs propres $|\varphi_\alpha\rangle$ et les valeurs propres \mathcal{E}_α associées satisfaisant l'équation aux valeurs propres

$$\mathcal{H}^{\mathbf{r}}|\varphi_\alpha\rangle = \mathcal{E}_\alpha|\varphi_\alpha\rangle. \quad (3.32)$$

Ceci permet de calculer l'énergie libre $\mathcal{F}(\mu, U_0, U_2, T; \boldsymbol{\psi}) = -k_B T \ln \mathcal{Z}(\mu, U_0, U_2, T; \boldsymbol{\psi})$, où $\mathcal{Z}(\mu, U_0, U_2, T; \boldsymbol{\psi})$ est la fonction de partition telle que:

$$\mathcal{Z}(\mu, U_0, U_2, T; \boldsymbol{\psi}) = \sum_{\alpha} e^{-\beta \mathcal{E}_{\alpha}}, \quad (3.33)$$

avec $\beta = 1/k_B T$ et k_B la constante de Boltzmann. Remarquons qu'à température nulle, *i.e.* lorsque $\beta \rightarrow \infty$, la fonction de partition se réduit à $\mathcal{Z}(\mu, U_0, U_2, T; \boldsymbol{\psi}) = C e^{-\beta \mathcal{E}_g}$, où C est la dégénérescence de l'état fondamental d'énergie \mathcal{E}_g . Dans ce cas précis, l'énergie libre devient $\mathcal{F}(\mu, U_0, U_2, T; \boldsymbol{\psi}) = \mathcal{E}_g$.

L'équilibre est atteint lorsque

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{\sigma} \partial \mathcal{F} / \partial \psi_{\sigma} = 0 \\ \mathcal{F}(\mu, U_0, U_2, T; \boldsymbol{\psi}_{eq}) = \min(\mathcal{F}). \end{array} \right. \quad (3.34)$$

La formulation variationnelle, *i.e.* la recherche de $\boldsymbol{\psi}_{eq}$ telle que \mathcal{F} soit un minimum global, assure l'autoconsistance de la théorie du champ moyen: $\langle a_{\sigma \mathbf{r}}^{\dagger} \rangle = \langle a_{\sigma \mathbf{r}} \rangle \equiv \psi_{\sigma}^{eq}$, soit l'unicité de la solution. Dans la limite de température nulle, ceci revient simplement à déterminer le minimum de l'énergie interne car $\mathcal{E}_g = \min(\mathcal{F})$.

Chapitre 4

Un algorithme pour mélanges de bosons sur réseaux

4.1 Intégrales de chemins en temps imaginaire

En Physique Statistique Quantique, toute l'information thermodynamique se trouve dans la fonction de partition \mathcal{Z} donnée par la trace de la matrice densité $\exp(-\beta\hat{\mathcal{H}})$, soit

$$\mathcal{Z} = \sum_{\Psi} \langle \Psi | \exp(-\beta\hat{\mathcal{H}}) | \Psi \rangle, \quad (4.1)$$

avec $\hat{\mathcal{H}}$ le hamiltonien et $\beta = 1/k_B T$. La somme s'effectue sur tous les états possibles $|\Psi\rangle$. Le calcul de la valeur moyenne d'une observable quelconque définie par l'opérateur $\hat{\mathcal{O}}$ est alors donné par

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\Psi} \langle \Psi | \hat{\mathcal{O}} \exp(-\beta\hat{\mathcal{H}}) | \Psi \rangle. \quad (4.2)$$

L'analogie entre la matrice densité $\exp(-\beta\hat{\mathcal{H}})$ et le propagateur $\exp(-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar)$ permet de penser que l'inverse de la température β joue le rôle d'un temps imaginaire. La fonction de partition $\mathcal{Z} = A_1 + A_2 + A_3 + \dots + A_f$ est donc la somme d'amplitudes de transition telles que le système initialement dans l'état $|\Psi_i\rangle$ finisse dans le même état après avoir évolué durant le temps imaginaire β . Le temps d'évolution est d'autant plus grand que la température est petite car β diverge lorsque $T \rightarrow 0$. Il n'est cependant pas toujours possible de calculer analytiquement les amplitudes de transition A_i . Les intégrales de chemin de Feynman permettent une formulation pratique des amplitudes de transition A_i . En effet, selon ce formalisme, il est possible de calculer l'amplitude de transition

$$A_i = \langle \Psi_i | \exp(-\beta\hat{\mathcal{H}}) | \Psi_i \rangle \quad (4.3)$$

par la somme de toutes les amplitudes des chemins possibles entre l'état initial et l'état final. Le chemin emprunté par le système est défini en spécifiant l'état du système à chaque pas de temps imaginaire $\delta\tau$. Formellement, cela revient tout d'abord à écrire

$$e^{(-\beta\hat{\mathcal{H}})} = \underbrace{e^{(-\hat{\mathcal{H}}\delta\tau)} e^{(-\hat{\mathcal{H}}\delta\tau)} e^{(-\hat{\mathcal{H}}\delta\tau)} \dots e^{(-\hat{\mathcal{H}}\delta\tau)}}_N, \quad (4.4)$$

avec $\beta = N\delta\tau$ tel que $\delta\tau \ll N$. Il suffit maintenant d'introduire l'opérateur unité $\mathbb{1} = \sum_m |m\rangle\langle m|$ correspondant à un ensemble d'états intermédiaires appartenant à une base complète entre chaque exponentielle pour obtenir la formulation en intégrale de chemin de l'amplitude de probabilité A_i . Soit,

$$A_i = \sum_{m_1, m_2, \dots, m_N} \langle \Psi_i | e^{(-\hat{H}\delta\tau)} | m_1 \rangle \langle m_1 | e^{(-\hat{H}\delta\tau)} | m_2 \rangle \langle m_2 | \dots | m_N \rangle \langle m_N | e^{(-\hat{H}\delta\tau)} | \Psi_i \rangle. \quad (4.5)$$

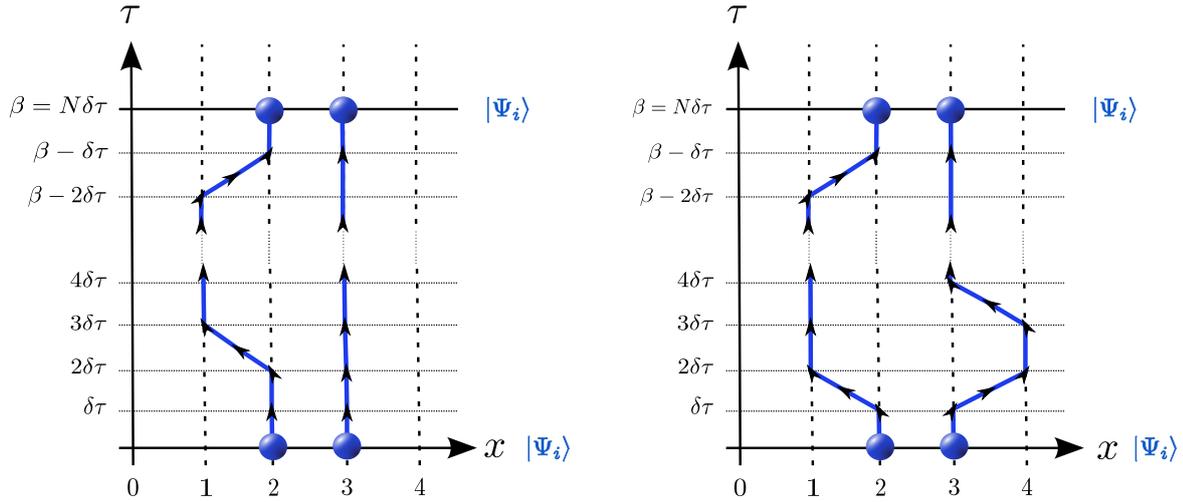


FIGURE 4.1 – Système 1D de quatre sites avec deux particules évoluant en temps imaginaire de l'état initial $|\Psi_i\rangle$ vers l'état final $|\Psi_i\rangle$. Ces deux graphes sont deux exemples dont les trajectoires donnent des amplitudes de probabilité contribuant au calcul de l'amplitude A_i [Eq. (4.5)].

L'amplitude de probabilité A_i se calcule en effectuant la somme des amplitudes de tous les chemins possibles que peuvent prendre les particules initialement dans l'état $|\Psi_i\rangle$ et finissant dans le même état $|\Psi_i\rangle$. Nous montrons sur la Figure 4.1 deux exemples quelconques d'évolution en temps imaginaire contribuant au calcul de l'amplitude A_i . Les trajectoires des particules en temps imaginaire s'appellent « lignes d'univers » (*World-Lines*). Il est évident que plus la température est petite, plus β est grand et donc plus le temps durant lequel les particules évoluent est grand. Dans ce cas, les particules pourront visiter une plus grande partie du système, voire l'ensemble du système lorsque les interactions le permettent. De grandes déformations des lignes d'univers, par rapport à leur état de départ, contribuent à la délocalisation de la fonction d'onde des particules. Lorsque $T \rightarrow 0$, cette dimension supplémentaire diverge et le système peut être considéré comme un système effectif évoluant en $d + 1$ dimensions classiques. Formellement, il existe une équivalence entre un système quantique à d dimension(s) et un système classique à $d + 1$ dimensions [97].

Nous allons présenter brièvement un exemple concret afin d'expliquer par la suite l'avantage de l'algorithme utilisé dans cette thèse. Considérons un système 1D composé de quatre sites ($L = 4$) avec des conditions aux bords périodiques telles que les sites 1 et 5 soient identiques. Supposons que N_b bosons indiscernables évoluent sur ce réseau et que le hamiltonien du système soit:

$$\hat{\mathcal{H}} = \underbrace{-t \sum_{i=1}^4 (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_{i+1} + \hat{a}_{i+1}^\dagger \hat{a}_i)}_{\text{cinétique}} + \underbrace{\frac{U}{2} \sum_{i=1}^4 \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)}_{\text{potentiel}} \quad (4.6)$$

où l'opérateur \hat{a}_i^\dagger (\hat{a}_i) crée (détruit) un boson sur le site i et l'opérateur $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ compte le nombre de bosons sur le site i . Le paramètre t est l'élément de matrice associé aux déplacements des particules par effet tunnel sur les sites plus proches voisins. Enfin, le paramètre $U > 0$ est l'énergie de répulsion sur site de deux particules. Le diagramme de phase de ce système a été étudié théoriquement en 1989 par Fisher *et al.* [66, 98], ainsi que par Batrouni *et al.* en 1990 [99] par la méthode de Monte Carlo quantique. Nous allons maintenant discuter la représentation en intégrales de chemins des limites $t \ll U$ et $t \gg U$ à température nulle ($\beta \rightarrow \infty$), soit $k_B T \ll t, U$.

Discutons tout d'abord la limite $k_B T \ll t \ll U$ avec $N_b = 4$. Dans ce cas précis, chaque site du système est occupé par une particule, la densité vaut $\rho = N_b/L = 1$ et l'énergie de double occupation sur site est grande. Il n'existe donc quasiment pas de fluctuations quantiques: les particules ne se déplacent pas spatialement au cours du temps imaginaire lorsque $U \rightarrow \infty$, ce qui se traduit par des lignes d'univers rectilignes et le système adopte la phase isolante de Mott $\rho = 1$. Ce cas est représenté sur la Figure 4.2 à gauche.

L'autre cas limite, pour lequel les fluctuations quantiques sont importantes, existe dans le cas de systèmes dilués¹ et/ou de répulsion faible $U \ll t$. Prenons comme exemple particulier un système de quatre sites avec $N_b = 2$ et supposons que l'interaction sur site est faible, mais non nulle, soit $k_B T \ll U < t$. Dans ce cas, les particules corrélées peuvent se déplacer dans l'ensemble du système et contribuer à un mouvement macroscopique cohérent. Un tel cas est représenté sur la Figure 4.2 à droite. Sur cette illustration, les deux particules ont fait le tour du système dans le même sens, elles présentent une cohérence dans leur mouvement: le système adopte la phase superfluide.

La superfluidité est un phénomène quantique tel que la phase de la fonction d'onde $\phi(\mathbf{r})$ est rigide ou cohérente. En effet, l'impulsion moyenne

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \langle \Psi | -i\hbar \nabla | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \hbar \nabla \phi(\mathbf{r}) | \Psi \rangle \\ &= m \mathbf{v}_s \end{aligned} \quad (4.7)$$

est non nulle lorsque la valeur moyenne du gradient de la phase $\nabla \phi(\mathbf{r})$ est non nulle. Dans le cas contraire où la phase fluctue largement, la valeur moyenne du gradient de la phase est nulle et donc la vitesse du superfluide \mathbf{v}_s est nulle. Par ailleurs, les conditions aux bords périodiques imposent l'égalité de la fonction d'onde aux bords du système, ce qui se traduit par

$$\langle \nabla \phi(\mathbf{r}) \rangle = 2\pi n/L, \quad (4.8)$$

où $n \in \mathbb{Z}$ et L est la taille du système. Le nombre entier topologique n compte le nombre de fois pour lequel le système entier a été traversé par la phase totale. Cette relation de quantification de

1. Densité ρ non entière.

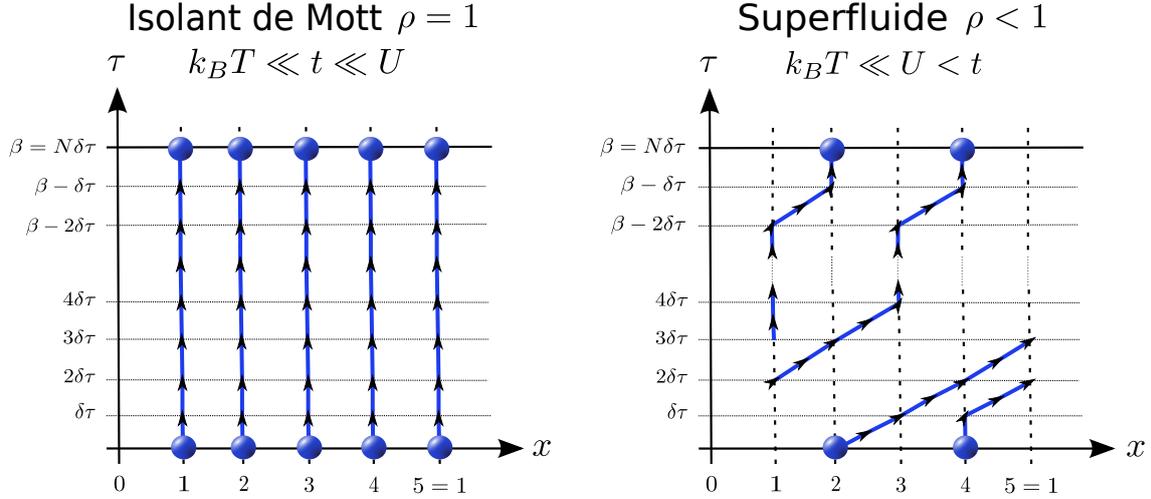


FIGURE 4.2 – Deux configurations possibles de lignes d’univers pour le système 1D de quatre sites. À gauche, la densité est entière $\rho = 1$ et l’énergie de double occupation sur site U , telle que $k_B T \ll t \ll U$, rend improbable la déformation des lignes d’univers. Dans ce cas, le système incompressible adopte la phase isolante de Mott $\rho = 1$. À droite, le système est dilué ($\rho < 1$) et l’interaction sur site est faible, mais non nulle $k_B T \ll U < t$. Les deux particules ont fait le tour du système dans le même sens, elles présentent une cohérence dans leur mouvement: le système adopte la phase superfluide.

la phase a été établie par Onsager en 1949 pour la superfluidité et est vérifiée expérimentalement [100]. Cette relation permet d’exprimer la densité superfluide en fonction de la dérivée seconde de l’énergie libre \mathcal{F} , soit:

$$\rho_s = \frac{1}{mV} \frac{\partial^2 \mathcal{F}(v_s)}{\partial v_s^2} \quad (4.9)$$

où m est la masse d’un boson, V le volume du système et v_s la vitesse du superfluide. Avec la représentation des lignes d’univers, Pollock et Ceperley ont montré en 1984 que cette formule devient [101, 102]:

$$\rho_s = \frac{\langle W^2 \rangle}{2dt\beta L^{d-2}}, \quad (4.10)$$

où d est la dimension du système, L sa taille, $\beta = 1/k_B T$ et t est le paramètre de saut du hamiltonien. La quantité $W \in \mathbb{Z}$ est le *winding number* des bosons. Cette quantité topologique renseigne sur la cohérence du déplacement des particules pendant leur évolution en temps imaginaire et compte le nombre de fois où les lignes d’univers traversent totalement le système dans sa dimension spatiale. Par exemple, $W = 0$ sur la Figure 4.2 de gauche et $W = 2$ sur la Figure 4.2 de droite.

4.2 Mélanges avec conversions: algorithme des Fonctions de Green Stochastiques

L'étude d'un système quantique décrit par un hamiltonien, tel que l'Eq. (4.6), requiert le calcul de la fonction de partition \mathcal{Z} . Nous avons montré que le calcul de cette quantité, nécessaire pour calculer la majorité des observables, implique une somme sur tous les états $|\Psi\rangle$ accessibles au système. De plus, chaque terme de cette somme requiert la somme sur toutes les configurations possibles des lignes d'univers partant de l'état $|\Psi\rangle$ considéré et finissant dans ce même état $|\Psi\rangle$. De façon générale, ce type de calcul est impossible à réaliser analytiquement en raison du trop grand nombre d'états $|\Psi\rangle$ et du trop grand nombre de configurations possibles pour les lignes d'univers. Dans ces circonstances, l'approche numérique est précieuse.

Il existe différentes approches numériques [76], chaque méthode ayant ses avantages particuliers. La méthode de Monte Carlo quantique part du même constat que le Monte Carlo classique: il est impossible de diagonaliser numériquement le hamiltonien du système et de calculer la fonction de partition à cause du trop grand nombre d'états possibles. Cette méthode consiste à déterminer un modèle classique de dimension $d + 1$ exactement équivalent au modèle quantique de dimension d en utilisant généralement une formulation en intégrale de chemin. Comme nous l'avons expliqué précédemment, la dimension supplémentaire est analogue à un temps imaginaire. Une fois le modèle classique trouvé, l'idée est de calculer numériquement la valeur moyenne de grandeurs physiques en visitant l'espace des états par la méthode de Monte Carlo standard.

L'un des premiers algorithmes de Monte Carlo quantique permettant de simuler des particules sur réseaux fût le *World Line algorithm* développé en 1982 par Hirsch *et al.* [76, 87]. Cette formulation met en jeu l'approximation de Trotter-Suzuki [103, 104, 105, 106] avec la décomposition dite « en échiquier »¹ du hamiltonien considéré [107]. La référence [108] apporte des précisions sur cet algorithme et son application à un système de bosons sur réseau. Cependant, cet algorithme souffre de différents problèmes: l'espace des états visité de façon basique et systématique pose des problèmes de convergence aux voisinage des transitions² car l'algorithme n'est pas ergodique et les fonctions de corrélations, telles que les fonctions de Green, sont presque impossibles à calculer [109]. De plus, l'algorithme est local et peut avoir des temps de corrélations longs.

Ainsi, des algorithmes plus performants ont vu le jour. Leur principe est d'améliorer la convergence de l'algorithme en suggérant des mouvements globaux dépendant de la longueur de corrélation ξ . Ces algorithmes sont nommés « algorithmes de *cluster* ». Par exemple, l'algorithme initialement proposé par Swendsen et Wang, en 1987 pour le modèle d'Ising classique, visite l'espace des états en proposant le retournement d'un paquet de spins, nommé « *cluster* », dont la taille typique est de l'ordre de ξ^d . Ce procédé permet de régler le problème de la convergence au voisinage d'une transition, notamment pour les transitions du second ordre pour lesquelles $\xi \rightarrow \infty$. Ce type d'algorithme a été étendu par la suite aux systèmes quantiques avec le *Loop algorithm* [89, 90] et a permis le développement d'algorithmes plus évolués en temps imaginaire continu tel que l'algorithme de *Worm* [91, 92, 93] et le développement en séries stochastiques (SSE) [94].

1. *Checkerboard decomposition*.

2. Ralentissement critique ou *critical slowing down*.

L'algorithme des Fonctions de Green Stochastiques (SGF) utilisé dans cette thèse est une extension de l'algorithme de *Worm* canonique [110, 111]. Bien que cet algorithme permette aussi de travailler dans l'ensemble grand canonique, l'utilisation de l'ensemble canonique présente l'avantage de contrôler à notre guise le nombre de particules présentes dans le système. En effet, ce point n'est pas toujours simple dans l'ensemble grand canonique lorsque différentes espèces sont présentes. D'une façon très générale, cet algorithme est destiné à l'étude de tout système dont le hamiltonien est de la forme $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{V}} - \hat{\mathcal{T}}$ où $\hat{\mathcal{V}}$ est l'énergie potentielle définie par des opérateurs diagonaux et $\hat{\mathcal{T}}$ est la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie de conversion définies par des opérateurs non diagonaux [95, 96].

En ce qui nous concerne, l'avantage de cet algorithme est qu'il peut aisément traiter des mélanges de bosons de différents spins en considérant des conversions du moment cinétique des particules lors de collisions sur site. Afin d'approfondir ce point, considérons un exemple générique tel que deux bosons « bleus » peuvent se convertir en deux bosons « rouges ». Il est important de préciser que le nombre de bosons rouges N_r et bleus N_b n'est pas conservé lorsque les conversions interviennent. Dans ce cas, le nombre de lignes d'univers n'est pas conservé au cours d'une simulation. La contrainte canonique est imposée sur le nombre total de bosons $N = N_r + N_b$. La Figure 4.3 représente trois configurations possibles de lignes d'univers appartenant à l'espace de la fonction de partition $\mathcal{Z}(\beta)$ de trois particules sur un réseau 1D. Pour ces trois cas, l'opérateur de conversion agit deux fois: deux lignes bleues (rouges) sont converties en deux lignes rouges (bleues). Le nombre de lignes bleues et rouges fluctue au cours de cette évolution en temps imaginaire.

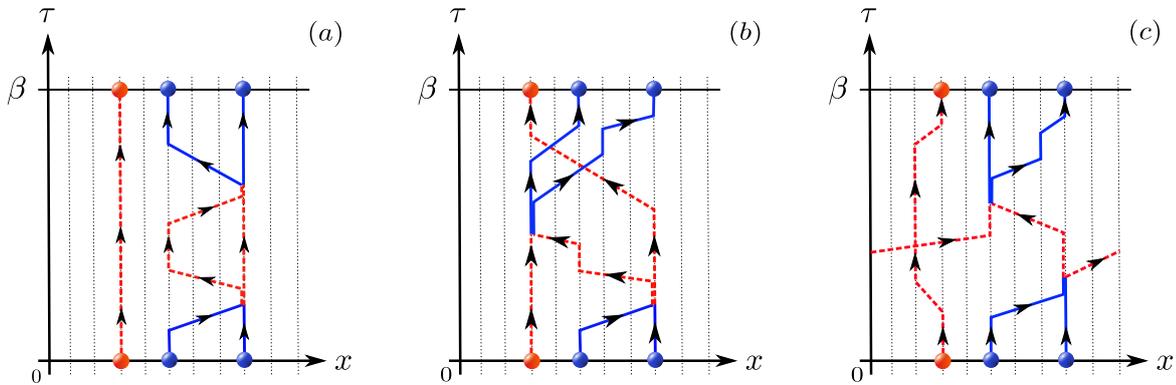


FIGURE 4.3 – Différentes configurations possibles de lignes d'univers de trois particules évoluant sur un réseau 1D. Pour ces trois cas, l'opérateur de conversion agit deux fois. Sur le graphe (a), il y a algébriquement +3 sauts, puis -3 sauts pour les bosons bleus, soit une somme algébrique nulle. La somme algébrique des déplacements est aussi nulle pour les bosons rouges. Sur le graphe (b), le déplacement algébrique total vaut +10 (-10) pour les bosons bleus (rouges): la somme des déplacements des deux espèces est nulle. Ceci n'est plus vrai sur le graphe (c).

De telles configurations sont obtenues grâce à l'opérateur de Green $\hat{\mathcal{G}}$, introduit à un temps aléatoire τ dans la fonction de partition, qui permet des déformations globales des lignes d'univers. Cependant, ces déformations des lignes d'univers doivent respecter le bilan détaillé afin de satisfaire la distribution de Boltzmann. Les graphes de la Figure 4.3 représentent trois cas tels

que l'opérateur $\hat{\mathcal{G}}$ est diagonal. Dans ce cas, la mesure des quantités thermodynamiques peut être effectuée. Cet opérateur est défini par

$$\hat{\mathcal{G}} = \sum_{p=0}^{+\infty} \sum_{q=0}^{+\infty} g_{pq} \sum_{\{i_p|j_q\}} \prod_{k=1}^p \hat{\mathcal{A}}_{i_k}^\dagger \prod_{l=1}^q \hat{\mathcal{A}}_{j_l}, \quad (4.11)$$

où les opérateurs $\hat{\mathcal{A}}^\dagger$ et $\hat{\mathcal{A}}$ satisfont les relations $\hat{\mathcal{A}}^\dagger|n\rangle = |n+1\rangle$ et $\hat{\mathcal{A}}|n\rangle = |n-1\rangle$ avec le cas particulier $\hat{\mathcal{A}}|0\rangle = 0$. L'expression $\{i_p|j_q\}$ correspond aux deux ensembles de sites i_1, i_2, \dots, i_p et j_1, j_2, \dots, j_q du réseau tels qu'aucune égalité entre les indices de ces deux ensembles n'existe, bien que l'égalité des éléments d'un même ensemble soit permise, par exemple $i_1 = i_2$. Les éléments de matrice g_{pq} sont définis par $g_{pq} = \langle \psi_L | \hat{\mathcal{G}} | \psi_R \rangle$ où l'état $|\psi_L\rangle$ est obtenu à partir de l'état $|\psi_R\rangle$ en créant p particules sur les sites $\{i_p\}$ et en détruisant q particules sur les sites $\{j_q\}$. Les éléments diagonaux de cette matrice sont tels que $\langle \psi | \hat{\mathcal{G}} | \psi \rangle = 1$.

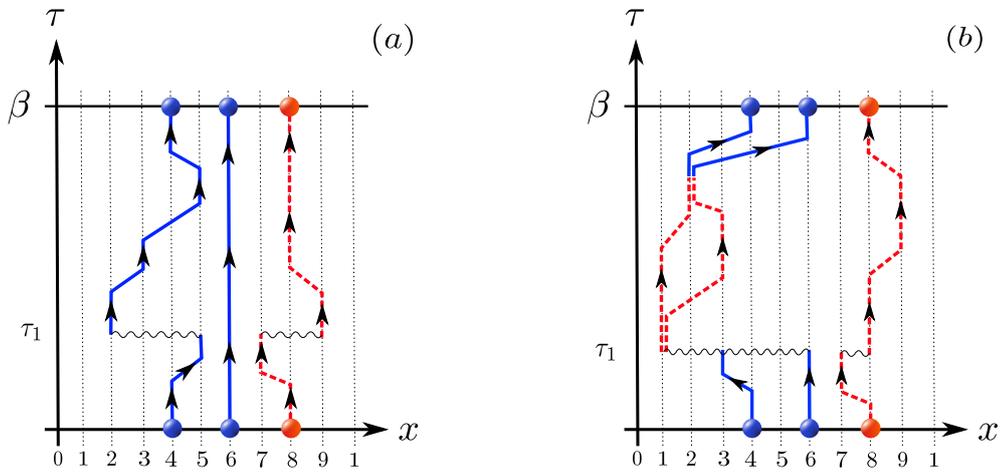


FIGURE 4.4 – Trois particules évoluant sur un réseau 1D. L'opérateur de Green $\hat{\mathcal{G}}$ agit au temps imaginaire τ_1 sur les deux graphes. L'action de $\hat{\mathcal{G}}$ conserve à la fois le nombre de lignes bleues et le nombre de lignes rouges sur le graphe (a), ce qui n'est pas le cas sur le graphe (b) pour lequel seul le nombre total de lignes est conservé (contrainte canonique). Ces déformations permettent de calculer les fonctions de Green.

L'opérateur de Green $\hat{\mathcal{G}}$, qui peut être vu comme une extension de l'opérateur de *Worm*, permet de déplacer simultanément plusieurs particules dans l'ensemble du système (*cf.* Figure 4.4). Ces déplacements aléatoires conduisent à des discontinuités des lignes d'univers, configurations pour lesquelles l'opérateur $\hat{\mathcal{G}}$ est non diagonal, permettant de calculer les fonctions de Green à N -corps et justifiant le nom de l'algorithme. Les fonctions de Green à N -corps calculées sont présentées à la [sous-section 5.2.1](#) et à la [Section 8.1](#).

Troisième partie

Bosons de spin-1/2 sur réseaux optiques

Chapitre 5

Bosons de spin-1/2 sur réseau 1D

En Physique Statistique classique à température non nulle, il n'existe de façon générale aucune transition de phase pour les systèmes 1D dont les interactions sont de courte portée. Plus précisément, les fluctuations thermiques ne permettant pas au système d'adopter une phase ordonnée à longue portée, celui-ci adopte donc toujours une phase désordonnée. Cependant, la physique des systèmes 1D présente l'avantage d'être décrite par des équations plus simples qu'à 2D et 3D. Il est parfois possible de résoudre ces équations de façon analytique et donc d'accéder à un grand nombre d'informations.

Cette généralité sur l'absence de transition n'est plus vraie pour les systèmes quantiques 1D à température nulle, température telle que l'énergie thermique $k_B T$ est négligeable devant toutes les autres énergies du système. Cependant, pour un système macroscopique, ce sont les fluctuations quantiques qui empêchent le système d'adopter une phase ordonnée de symétrie continue à longue portée, comme un condensat de Bose-Einstein par exemple. Toutefois, des phases de quasi-ordre à longue portée peuvent se développer, comme la phase superfluide. Il en est de même des phases ordonnées à symétrie discrète, telles que l'ordre d'Ising. L'existence de différentes phases quantiques à température nulle permet donc de faire passer le système d'une phase ordonnée ou quasi ordonnée à une phase désordonnée en changeant les paramètres d'interactions du hamiltonien. De telles transitions, issues de la compétition directe des différents termes du hamiltonien, sont appelées « transitions de phases quantiques ».

Dans ce chapitre, nous étudions les propriétés à l'équilibre du système 1D de bosons de spin-1/2 à température nulle. Dans la [Section 5.1](#), nous étudions ce système avec une approche en champ moyen. Dans la [Section 5.2](#), nous présentons les propriétés du système avec la méthode Monte Carlo quantique et [l'algorithme des Fonctions de Green Stochastiques](#). Nous montrons aussi que le champ moyen permet d'obtenir des résultats en accord qualitatif avec la méthode Monte Carlo quantique. Il existe dans la bibliographie des études de systèmes semblables avec différentes approches théoriques et numériques [[11](#), [38](#), [74](#), [112](#), [113](#), [114](#), [115](#)]. Les principaux résultats de ce chapitre ont été publiés dans la revue *Physical Review A* [[17](#)].

5.1 Analyse en champ moyen à température nulle

Trois cas distincts seront abordés: le cas de référence sans conversion $U_2/U_0 = 0$, puis les cas avec conversions du spin effectif tels que $U_2/U_0 < 0$ et $U_2/U_0 > 0$. Cette approche permet de mettre en évidence l'influence des conversions entre les deux espèces de bosons en partant de la description du système le plus simple. Pour ces trois cas, nous présentons le diagramme de phase du système, composé de deux types de phases: des phases solides et incompressibles, sans fluctuation du nombre total de particules sur site, appelées « phases isolantes de Mott » [Mott Insulator (MI)] et une phase superfluide, telle que les particules présentent une quasi cohérence de phase due à la délocalisation des particules dans le système. Nous présentons en détail ces phases, ainsi que les transitions de phases. L'impact du terme de conversion sur ces phases et sur les transitions de phases est aussi discuté. Cette étude réalisée en dimension d ¹ donne quantitativement les mêmes résultats quelle que soit la dimension du système à un facteur d près². Les résultats présentés dans toute cette section sont très similaires à ceux obtenus par Pai *et al.* pour le système de spin-1 avec la même méthode du champ moyen [9]. Certains résultats présentés dans cette section pour $U_2/U_0 < 0$ ont été précédemment publiés par Krutitsky *et al.* [7, 8].

5.1.1 Comment obtenir le diagramme de phase ?

Afin d'obtenir des informations physiques sur le système, il convient d'écrire la matrice hamiltonienne associée au hamiltonien $\mathcal{H}_{spin1/2}^r$ [Eq. (3.31)] et de la diagonaliser numériquement. Nous avons montré qu'à température nulle l'énergie libre devient $\mathcal{F}(t, \mu, U_0, U_2; \psi) = \mathcal{E}_g$ où \mathcal{E}_g est l'énergie de l'état fondamental. L'état d'équilibre du système est atteint lorsque $\sum_{\sigma} \partial \mathcal{F} / \partial \psi_{\sigma} = 0$ et $\mathcal{F}(t, \mu, U_0, U_2; \psi_{eq}) = \min(\mathcal{F}) = \mathcal{E}_g$.

Lorsque l'énergie minimum \mathcal{E}_g est obtenue pour $\psi = 0$, la fraction condensée, égale à la densité superfluide $\rho_s = \psi^2 = \psi_0^2 + \psi_{\Lambda}^2$, est nulle et le nombre total de particules sur site ne fluctue pas: le système adopte la phase isolante de Mott. Lorsque l'énergie minimum \mathcal{E}_g est obtenue pour $\psi \neq 0$, la fraction condensée ψ^2 est non nulle et le système adopte la phase superfluide. Une remarque importante s'impose: le champ moyen confond le quasi-ordre à longue portée avec l'ordre à longue portée, ce qui implique que la phase condensée de Bose-Einstein et la phase superfluide sont confondues. Il est important de noter que cette approximation est très grossière en 1D, car aucun ordre à longue portée de symétrie continue ne peut exister³. L'interprétation exacte est donc qu'à 1D à température nulle, seule la phase superfluide se développe lorsque $\psi \neq 0$.

Le diagramme de phase dans le plan $(t/U_0, \mu/U_0)$ est obtenu en déterminant ψ minimisant l'énergie libre, donc l'énergie interne du système, pour chaque couple $(t/U_0, \mu/U_0)$. Les quantités calculables avec cette méthode du champ moyen sont uniquement des quantités sur site. Ces quantités sont:

- les densités superfluides de chaque espèce $\rho_{s0} = \psi_0^2$ et $\rho_{s\Lambda} = \psi_{\Lambda}^2$, ainsi que la densité superfluide totale $\rho_s = \psi^2 = \rho_{s0} + \rho_{s\Lambda}$;

1. $d = 1$ dans tout ce chapitre.

2. La quantité t/U_0 est divisée par le facteur d .

3. cf. théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg [67, 68, 69].

- les densités de chaque espèce $\rho_0 = \langle \varphi_g | \hat{n}_{0i} | \varphi_g \rangle = \langle \varphi_g | \hat{a}_{0i}^\dagger \hat{a}_{0i} | \varphi_g \rangle$ et $\rho_\Lambda = \langle \varphi_g | \hat{n}_{\Lambda i} | \varphi_g \rangle = \langle \varphi_g | \hat{a}_{\Lambda i}^\dagger \hat{a}_{\Lambda i} | \varphi_g \rangle$ avec $|\varphi_g\rangle$ le vecteur d'onde de l'état fondamental, ainsi que la densité totale $\rho = \rho_0 + \rho_\Lambda$ entière, sans fluctuations dans la phase de Mott ;
- les corrélations spatiales densité-densité sur site, renseignant sur la structure spatiale de chaque site du système, définies par

$$\begin{cases} C_{00}(0) &= \langle \varphi_g | \hat{n}_{0i} \hat{n}_{0i} | \varphi_g \rangle = \langle \varphi_g | \hat{a}_{0i}^\dagger \hat{a}_{0i} \hat{a}_{0i}^\dagger \hat{a}_{0i} | \varphi_g \rangle \\ C_{\Lambda\Lambda}(0) &= \langle \varphi_g | \hat{n}_{\Lambda i} \hat{n}_{\Lambda i} | \varphi_g \rangle = \langle \varphi_g | \hat{a}_{\Lambda i}^\dagger \hat{a}_{\Lambda i} \hat{a}_{\Lambda i}^\dagger \hat{a}_{\Lambda i} | \varphi_g \rangle \\ C_{0\Lambda}(0) &= \langle \varphi_g | \hat{n}_{0i} \hat{n}_{\Lambda i} | \varphi_g \rangle = \langle \varphi_g | \hat{a}_{0i}^\dagger \hat{a}_{0i} \hat{a}_{\Lambda i}^\dagger \hat{a}_{\Lambda i} | \varphi_g \rangle \end{cases} \quad (5.1)$$

- les valeurs moyennes des corrélations spin-spin sur site définies par

$$\begin{cases} S_{xx}(0) &= \langle \varphi_g | (\hat{S}_i^x)^2 | \varphi_g \rangle \\ S_{yy}(0) &= \langle \varphi_g | (\hat{S}_i^y)^2 | \varphi_g \rangle \\ S_{zz}(0) &= \langle \varphi_g | (\hat{S}_i^z)^2 | \varphi_g \rangle \end{cases} \quad (5.2)$$

avec \hat{S}_i^x , \hat{S}_i^y et \hat{S}_i^z les composantes de l'opérateur de spin $\hat{\mathbf{S}}$, défini par $\hat{\mathbf{S}} = \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{a}_\sigma^\dagger \mathbf{J}_{\sigma\sigma'} \hat{a}_{\sigma'}$, où $\sigma = \{0, \Lambda\}$ et $\mathbf{J}_{\sigma\sigma'}$ sont les matrices de Pauli. Les expressions de ces composantes sont :

$$\begin{cases} \hat{S}_i^x &= \frac{1}{2} (\hat{a}_{0i}^\dagger \hat{a}_{\Lambda i} + \hat{a}_{\Lambda i}^\dagger \hat{a}_{0i}) \\ \hat{S}_i^y &= -\frac{i}{2} (\hat{a}_{0i}^\dagger \hat{a}_{\Lambda i} - \hat{a}_{\Lambda i}^\dagger \hat{a}_{0i}) \\ \hat{S}_i^z &= \frac{1}{2} (\hat{n}_{0i} - \hat{n}_{\Lambda i}) \end{cases} \quad (5.3)$$

En utilisant la relation de commutation des bosons : $[\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger] = \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i = \mathbb{1}$, ces opérateurs se réécrivent simplement

$$\begin{cases} (\hat{S}_i^x)^2 &= \frac{1}{4} (2\hat{n}_{0i} \hat{n}_{\Lambda i} + \hat{n}_{0i} + \hat{n}_{\Lambda i} + \hat{a}_{0i}^\dagger \hat{a}_{0i}^\dagger \hat{a}_{\Lambda i} \hat{a}_{\Lambda i} + \hat{a}_{\Lambda i}^\dagger \hat{a}_{\Lambda i}^\dagger \hat{a}_{0i} \hat{a}_{0i}) \\ (\hat{S}_i^y)^2 &= \frac{1}{4} (2\hat{n}_{0i} \hat{n}_{\Lambda i} + \hat{n}_{0i} + \hat{n}_{\Lambda i} - \hat{a}_{0i}^\dagger \hat{a}_{0i}^\dagger \hat{a}_{\Lambda i} \hat{a}_{\Lambda i} - \hat{a}_{\Lambda i}^\dagger \hat{a}_{\Lambda i}^\dagger \hat{a}_{0i} \hat{a}_{0i}) \\ (\hat{S}_i^z)^2 &= \frac{1}{4} (\hat{n}_{0i}^2 + \hat{n}_{\Lambda i}^2 - 2\hat{n}_{0i} \hat{n}_{\Lambda i}) \end{cases} \quad (5.4)$$

avec la propriété $(\hat{S}_i)^2 = (\hat{S}_i^x)^2 + (\hat{S}_i^y)^2 + (\hat{S}_i^z)^2 = (\hat{n}_i/2)[(\hat{n}_i/2) + 1]$, où $\hat{n}_i = \hat{n}_{0i} + \hat{n}_{\Lambda i}$. Ces opérateurs interviennent dans la formulation hamiltonienne (3.26) dont l'énergie associée met en jeu la différence

$$\Delta S(0) \equiv S_{xx}(0) - [S_{yy}(0) + S_{zz}(0)]. \quad (5.5)$$

5.1.2 Mélange sans conversion du spin: $U_2/U_0 = 0$

Ce cas simple représente un mélange de deux populations de bosons dont les interactions répulsives sur site sont identiques quel que soit le spin des atomes. Le diagramme de phase de ce système représenté par la Figure 5.1 en haut est composé de deux types de phases: des phases isolantes de Mott (MI) de différentes densités et une phase superfluide.

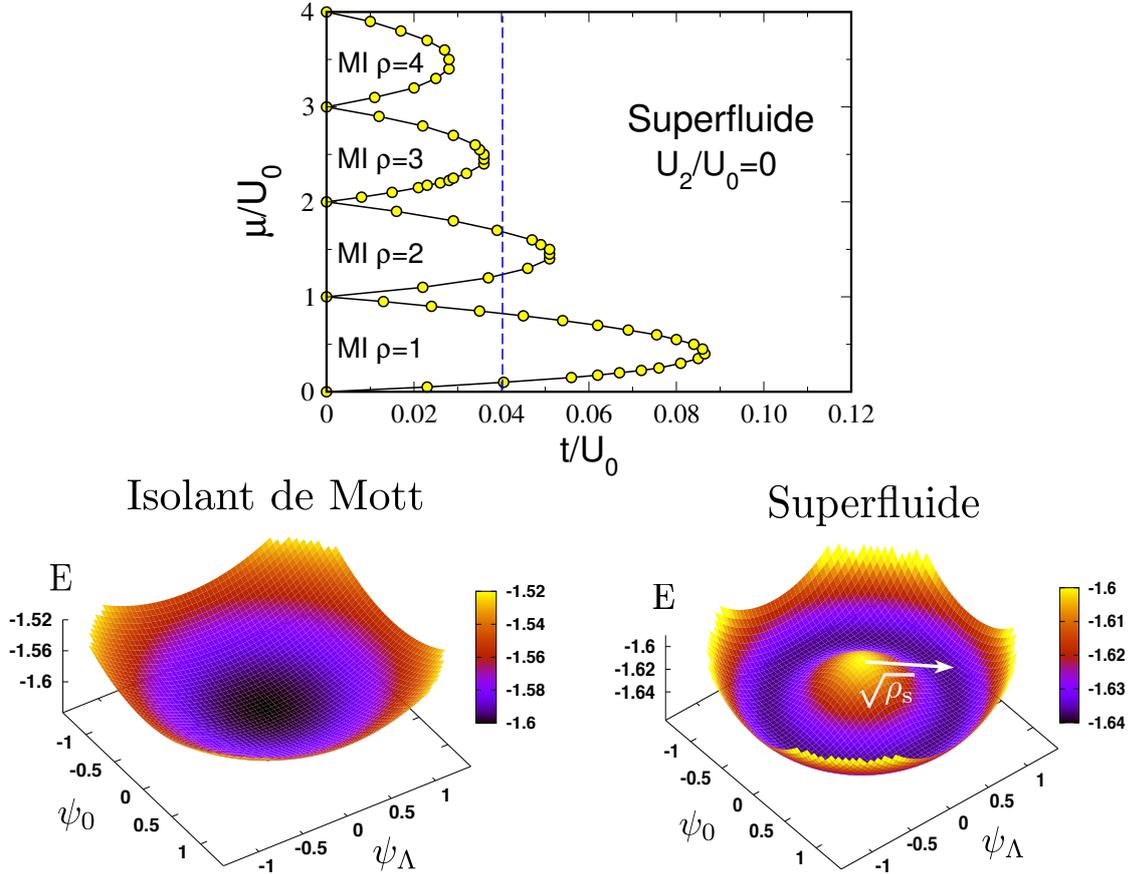


FIGURE 5.1 – Diagramme de phase en champ moyen sans conversion du spin $U_2/U_0 = 0$ (en haut) et minimum de l'énergie en fonction des composantes ψ_0 et ψ_Λ du paramètre d'ordre ψ (en bas). La ligne bleue en trait discontinu correspond à la coupe de la Figure 5.3. En bas à gauche: l'énergie est *minimale* pour $\psi = 0$, signature de la phase isolante de Mott. Cette figure correspond à un point du diagramme de phase dans le lobe MI $\rho = 2$, dont les coordonnées sont $(t/U_0, \mu/U_0) = (0.02, 1.30)$. En bas à droite: l'énergie, en forme de chapeau mexicain, est *minimale* pour $\psi = \sqrt{\rho_s} \neq 0$, signature de la phase superfluide avec ρ_s la densité superfluide associée. Cette figure correspond à un point du diagramme de phase dans la phase superfluide avec une densité $\rho = 2$, dont les coordonnées sont $(t/U_0, \mu/U_0) = (0.08, 1.42)$.

Phases de Mott

Les phases MI sont toutes déterminées par le fait que l'énergie est *minimale* en $\psi_0 = \psi_\Lambda = 0$ (cf. Figure 5.1 en bas à gauche). Remarquons que, dans la limite d'interactions fortes (*i.e.* $t/U_0 \rightarrow 0$), le système adopte une phase MI avec ρ bosons par site lorsque le potentiel chi-

mique μ satisfait la condition $\rho - 1 < \mu/U_0 < \rho$. Ainsi, dans notre cas précis, la base des lobes de MI vaut $\Delta\mu/U_0 = 1$ pour toutes valeurs de ρ .

	Mott $\rho = 1$	Mott $\rho = 2$	Mott $\rho = 3$	Mott $\rho = 4$
Dégénérescence	2	3	4	5
Énergie \mathcal{E}_g	0	U_0	$3U_0$	$6U_0$
États	$ 0\rangle$	$ 00\rangle$	$ 000\rangle$	$ 0000\rangle$
	$ \Lambda\rangle$	$ 0\Lambda\rangle$	$ 00\Lambda\rangle$	$ 000\Lambda\rangle$
		$ \Lambda\Lambda\rangle$	$ 0\Lambda\Lambda\rangle$	$ 00\Lambda\Lambda\rangle$
			$ \Lambda\Lambda\Lambda\rangle$	$ 0\Lambda\Lambda\Lambda\rangle$
				$ \Lambda\Lambda\Lambda\Lambda\rangle$

TABLE 5.1 – Dégénérescence, énergie et états des phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = 0$.

La dégénérescence et l'énergie des phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = 0$ sont présentées dans le Tableau 5.1. Pour chacune de ces phases, nous explicitons les états de même énergie qui les composent. Le champ moyen prédit qu'il n'existe aucune corrélation des densités ρ_0 et ρ_Λ dans ces phases (*i.e.* $C_{00}(0) = \rho_0^2$, $C_{\Lambda\Lambda}(0) = \rho_\Lambda^2$ et $C_{0\Lambda}(0) = \rho_0\rho_\Lambda$).

Phase superfluide

La région superfluide est caractérisée par le fait que l'énergie est *minimale* en $\psi \neq 0$ (*cf.* Figure 5.1 en bas à droite). Le profil de cette surface, en forme de chapeau mexicain, se généralise dans toute la phase superfluide. L'énergie *minimale* \mathcal{E}_g est située sur le cercle d'équation $\psi^2 = \psi_0^2 + \psi_\Lambda^2$ et de rayon $\psi = \sqrt{\rho_s}$. Ainsi, tous les points situés sur ce cercle correspondent à des états de même énergie \mathcal{E}_g , de même densité totale ρ et de même densité superfluide ρ_s , donnée par le carré du rayon de ce cercle. Dans l'ensemble grand canonique, les fluctuations du nombre de particules de chaque espèce, issues de l'interaction entre le réservoir de particules condensées et le système sur site, vont faire évoluer librement l'état fondamental du système sur ce cercle suivant un mode de Goldstone. *A contrario*, la valeur des densités ρ_0 et ρ_Λ et des densités superfluides ρ_{s0} et $\rho_{s\Lambda}$ varie en fonction des coordonnées du point considéré sur ce cercle. Il en est de même des valeurs des corrélations spin-spin sur site $S_{xx}(0)$ et $S_{zz}(0)$ et de la différence $\Delta S(0)$ [*cf.* Eqs. (5.2) et (5.5)].

Nous verrons par la suite que l'énergie libre sera minimisée lorsque la différence $\Delta S(0)$ sera *maximale* pour $U_2 < 0$ et *minimale* pour $U_2 > 0$. Afin d'illustrer clairement l'influence des coordonnées du point considéré, nous traçons sur la Figure 5.2 (en haut) la projection du graphe 3D de la phase superfluide de la Figure 5.1. Sur cette figure, nous référençons un état fondamental par ses coordonnées polaires (ψ, θ) . Sur la Figure 5.2 en bas à gauche, nous montrons le comportement sinusoïdal des densités ρ_0 et ρ_Λ et des densités superfluides ρ_{s0} et $\rho_{s\Lambda}$ en fonction de θ/π . La Figure 5.2 en bas à droite montre le comportement sinusoïdal de $S_{xx}(0)$ et $S_{zz}(0)$ et de $\Delta S(0)$ lorsque l'angle θ varie. La valeur constante de $S_{yy}(0)$ est la conséquence directe de notre choix de travailler avec des composantes réelles du paramètre d'ordre ψ . Notons que $\Delta S(0)$ est *maximale* lorsque $\theta = \frac{\pi}{2}k + \frac{\pi}{4}$ et est *minimale* lorsque $\theta = \frac{\pi}{2}k$ où $k \in \mathbb{Z}$.

Nous allons maintenant présenter l'évolution des différentes densités lorsque le système passe de la phase superfluide à la phase isolante de Mott, et réciproquement.

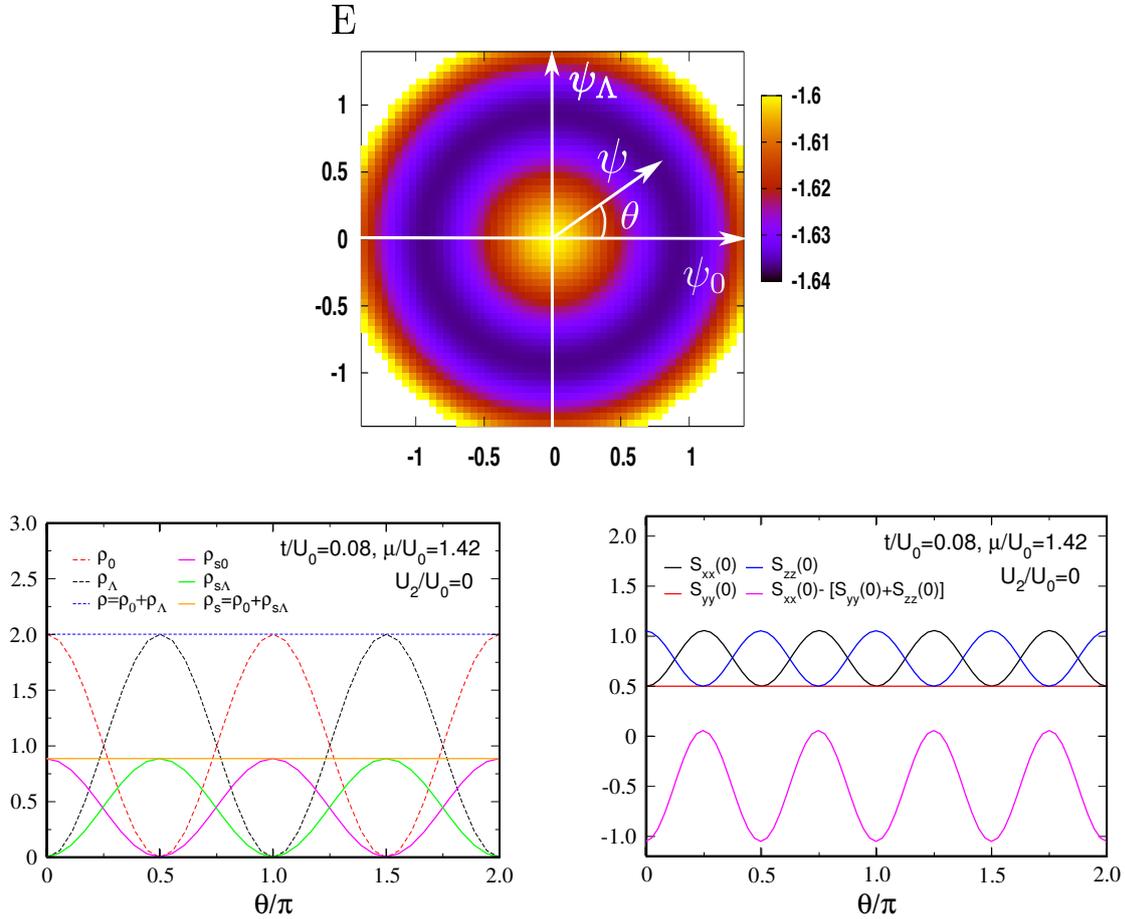


FIGURE 5.2 – En haut: projection de l'énergie en fonction des composantes ψ_0 et ψ_Λ du paramètre d'ordre ψ dans la phase superfluide avec les paramètres $(t/U_0, \mu/U_0) = (0.08, 1.42)$ et $U_2/U_0 = 0$. Cette projection correspond au graphe de la Figure 5.1 en bas à droite pour lequel $\rho = 2$ et $\rho_s = 0.88$. En bas à gauche: comportements des densités ρ_0 et ρ_Λ et des densités superfluides ρ_{s0} et $\rho_{s\Lambda}$ associées au graphe du haut en fonction de θ/π . En bas à droite: évolution des corrélations spin-spin sur site $S_{xx}(0)$, $S_{yy}(0)$ et $S_{zz}(0)$ et de $\Delta S(0)$ [cf. Eqs. (5.2) et (5.5)], associées au graphe du haut en fonction de θ/π .

Transitions de phases

Il est possible de se déplacer dans le diagramme de phase et donc d'amener le système à changer de phase soit en changeant le taux de déplacement des particules t/U_0 , soit en changeant le potentiel chimique μ/U_0 . La Figure 5.3 représente l'évolution des différentes densités lorsque le potentiel chimique μ/U_0 augmente en fixant le taux de déplacement des particules t/U_0 tel que $t/U_0 = 0.04$.

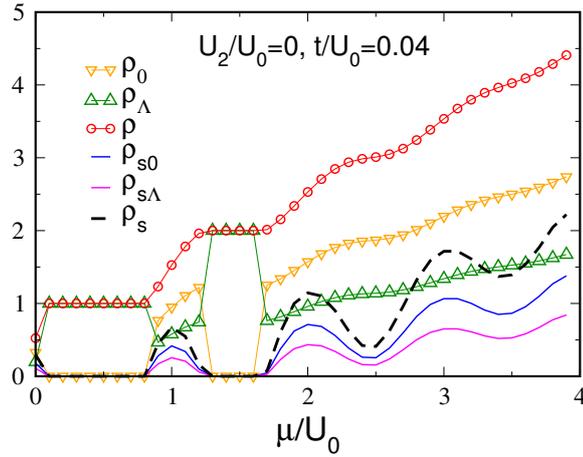


FIGURE 5.3 – Coupe verticale du diagramme de phase de la Figure 5.1 avec $t/U_0 = 0.04$ et $U_2/U_0 = 0$. Cette coupe part de la phase superfluide, passe par la phase MI $\rho = 1$, passe de nouveau par la phase superfluide, puis passe dans le lobe MI $\rho = 2$ et finit dans la phase superfluide. Les valeurs des densités ρ_0 , ρ_Λ , ρ_{s0} et $\rho_{s\Lambda}$ ne sont pas déterminées de manière unique du fait de la dégénérescence des phases, seule la densité totale ρ et la densité superfluide totale ρ_s l'étant.

Cette coupe verticale est représentée sur le diagramme de phase de la Figure 5.1 par la ligne bleue en trait discontinu. Cette coupe part de la phase superfluide, passe par la phase MI $\rho = 1$, passe de nouveau par la phase superfluide, puis passe dans le lobe MI $\rho = 2$ et finit dans la phase superfluide. Ces deux phases de Mott sont représentées par les plateaux de densités $\rho = 1$ et $\rho = 2$ avec une densité superfluide nulle $\rho_s = 0$. Dans cet exemple, la phase de Mott $\rho = 1$ ($\rho = 2$) n'est composée que de bosons de spin Λ , ce qui représente un des deux (trois) états dégénérés possibles de cette phase. Les valeurs des densités ρ_0 et ρ_Λ dans ces phases de Mott ne sont pas déterminées de manière unique, seule la densité totale ρ l'étant. La phase superfluide est caractérisée par une densité superfluide non nulle $\rho_s \neq 0$ et une compressibilité non nulle $\kappa = \partial\rho/\partial\mu \neq 0$. La phase superfluide étant infiniment dégénérée, les valeurs des densités superfluides ρ_{s0} et $\rho_{s\Lambda}$ ne sont pas non plus déterminées de manière unique, seule ρ_s l'étant. Nous avons choisi l'angle $\theta = 38^\circ$ pour la Figure 5.3 afin de montrer un cas quelconque. Il est intéressant de remarquer que la densité superfluide décroît à l'approche des phases MI $\rho = \{3, 4\}$, mais ne s'annule pas: les lobes MI correspondant ne sont pas traversés.

Dans la théorie de Landau des transitions de phase, un paramètre d'ordre est une quantité qui caractérise l'état d'un système physique au cours d'une transition de phase. Dans l'approximation du champ moyen, pour la transition MI-superfluide, le paramètre d'ordre de la phase superfluide est la racine carrée de la densité superfluide ρ_s . Lors d'une transition de phase, nous pouvons distinguer deux cas: soit le paramètre d'ordre évolue continûment, ce qui est la signature d'une transition du second ordre¹, soit le paramètre d'ordre évolue de façon discontinue, ce qui est la signature d'une transition du premier ordre². Le fait que la densité superfluide varie continûment lors de cette coupe implique qu'il en est de même pour le module du paramètre d'ordre $\psi = \sqrt{\rho_s}$ et donc que les transitions de phases sont du deuxième ordre.

1. cf. modèle d'Ising 2D, par exemple.

2. Par exemple, les transitions solide-liquide et liquide-gaz.

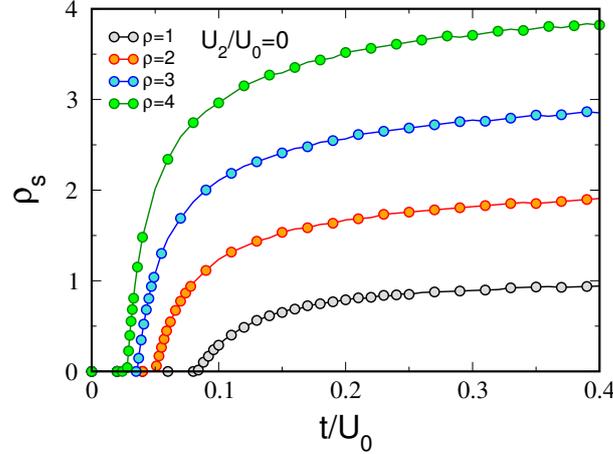


FIGURE 5.4 – Évolution de la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = 0$. Ces courbes correspondent à des coupes horizontales des lobes MI en passant par leur extrémité en fixant le potentiel chimique, puis à adapter celui-ci pour maintenir la densité constante. L'évolution continue de ρ_s est la signature de transitions du second ordre.

Il est aussi intéressant de montrer l'évolution de la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour une densité constante. La Figure 5.4 montre l'évolution de ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$. Ces courbes correspondent à des coupes horizontales des lobes MI, passant par l'extrémité des lobes, obtenues en adaptant le potentiel chimique. Sur la Figure 5.4, l'évolution continue de ρ_s est la signature de transitions du second ordre et nous pouvons voir que le système tend à être entièrement superfluide dans la limite $t/U_0 \rightarrow \infty$ car $\rho_s \rightarrow \rho$.

Le cas sans conversions du spin que nous venons de présenter va servir de référence pour comprendre l'influence des conversions du spin dans ce système. Nous allons maintenant présenter le cas $U_2/U_0 < 0$ et le comparer avec le cas $U_2/U_0 = 0$.

5.1.3 Mélange avec conversions du spin : $U_2/U_0 < 0$

Le diagramme de phase de ce système avec $U_2/U_0 = -0.1$, représenté sur la Figure 5.5, est obtenu en utilisant la même méthode que celui du cas $U_2/U_0 = 0$. Le choix de la valeur $U_2/U_0 = -0.1$ vient du fait que la physique pour $U_2/U_0 = 0.1$ est particulièrement intéressante. Garder la même valeur absolue nous permettra de comparer aisément ces deux cas. Ce diagramme de phase est aussi composé de phases isolantes de Mott et d'une phase superfluide.

Phases de Mott

Ces phases sont déterminées par le fait que l'énergie est *minimale* en $\psi_0 = \psi_\Lambda = 0$ (cf. Figures 5.6 (a) et (b)). Lorsque $t/U_0 = 0$, le système adopte une phase MI avec ρ bosons par site lorsque le potentiel chimique μ satisfait la condition $(\rho-1)(1-|U_2|/U_0) < \mu/U_0 < \rho(1-|U_2|/U_0)$. Avec $U_2/U_0 = -0.1$, la base des lobes MI vaut donc $\Delta\mu/U_0 = 1 - |U_2|/U_0 = 0.9$ pour toute valeur de ρ .

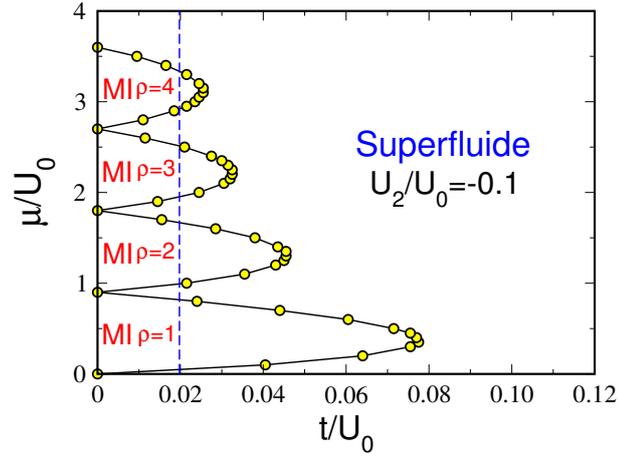


FIGURE 5.5 – Diagramme de phase en champ moyen avec conversions du spin $U_2/U_0 = -0.1$. Dans toutes les phases de ce diagramme, excepté dans la phase MI $\rho = 1$, les populations de spins 0 et Λ sont équilibrées $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$, avec $\rho_{s0} = \rho_{s\Lambda} = \rho_s/2$ dans la phase superfluide. Toutes les transitions de phases sont du second ordre. La ligne bleue en trait discontinu correspond à la coupe de la Figure 5.9.

La Figure 5.7 représente l'évolution de la frontière entre les phases MI et la phase superfluide en fonction de $|U_2|/U_0$. Il est montré sur cette figure que la largeur des lobes MI en $t/U_0 = 0$ décroît linéairement avec $|U_2|/U_0$ et que toutes les phases MI disparaissent lorsque $|U_2|/U_0 = 1$.

	Mott $\rho = 1$	Mott $\rho = 2$	Mott $\rho = 3$	Mott $\rho = 4$
Dégénérescence	2	2	2	2
Énergie \mathcal{E}_g	0	$U_0 + U_2$	$3(U_0 + U_2)$	$6(U_0 + U_2)$
État $ \varphi_1\rangle$	$ 0\rangle$	$ 0\Lambda\rangle$	$\frac{1}{2}(\sqrt{3} 00\Lambda\rangle + \Lambda\Lambda\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(000\Lambda\rangle + \Lambda\Lambda\Lambda\rangle)$
Densités (ρ_0, ρ_Λ)	(1, 0)	(1, 1)	(1.5, 1.5)	(2, 2)
.....
État $ \varphi_2\rangle$	$ \Lambda\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(00\rangle + \Lambda\Lambda\rangle)$	$\frac{1}{2}(\sqrt{3} \Lambda\Lambda0\rangle + 000\rangle)$	$\frac{1}{\sqrt{8}}(\sqrt{6} \Lambda\Lambda00\rangle + 0000\rangle + \Lambda\Lambda\Lambda\Lambda\rangle)$
Densités (ρ_0, ρ_Λ)	(0, 1)	(1, 1)	(1.5, 1.5)	(2, 2)

TABLE 5.2 – Dégénérescence, énergie, états et densités des phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = -0.1$. La phase de Mott $\rho = 1$ est identique à celle du cas $U_2/U_0 = 0$: le terme de conversion ne joue aucun rôle. *A contrario*, le terme de conversion équilibre les populations des phases de Mott $\rho = \{2, 3, 4\}$, soit $\rho_0 = \rho_\Lambda$ (valeurs en couleurs).

Intéressons-nous maintenant au détail des phases isolantes de Mott. Le Tableau 5.2 indique la dégénérescence et l'énergie des phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = -0.1$. Pour chacune de ces phases, nous explicitons les états dégénérés qui les composent, ainsi que le couple

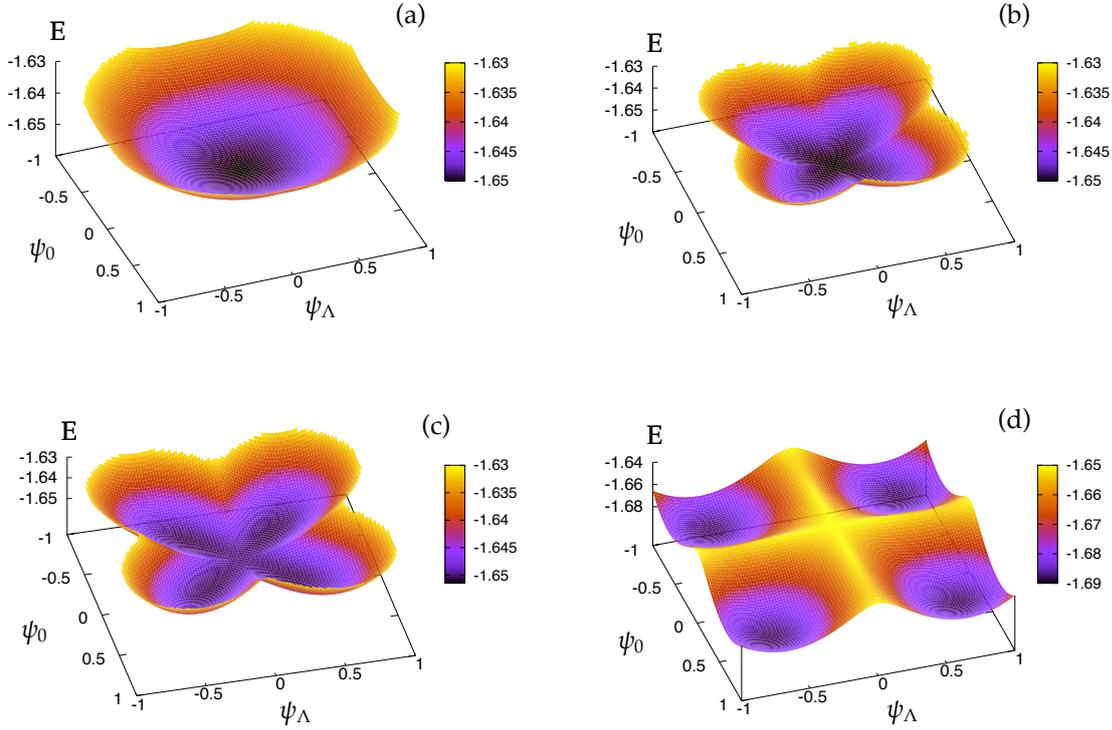


FIGURE 5.6 – Minimum de l'énergie en fonction des composantes ψ_0 et ψ_Λ du paramètre d'ordre pour le rapport $U_2/U_0 = -0.1$. De (a) vers (d): évolution de l'énergie lors de la transition de la phase MI [(a) et (b)] vers la phase superfluide [(c) et (d)] pour la densité $\rho = 2$ ($\mu/U_0 = 1.30$). En (a), $t/U_0 = 0.01$: l'énergie est *minimale* pour $\psi = 0$, signature de la phase isolante de Mott. En (b), $t/U_0 = 0.04$: le système est encore dans la phase de Mott et approche la transition vers la phase superfluide. En (c), $t/U_0 = 0.05$: le système vient juste de passer dans la phase superfluide. Le minimum situé précédemment en $\psi = 0$ s'est transformé continûment en quatre *minima* dégénérés symétriques situés sur les diagonales $|\psi_0| = |\psi_\Lambda| \neq 0$. Cette évolution continue du paramètre d'ordre indique que la transition est du second ordre. En (d), $t/U_0 = 0.08$: le système est superfluide. Aucun minimum local n'existe, la transition est du second ordre.

des densités (ρ_0, ρ_Λ) qui leur correspondent. Toutes les phases de Mott sont deux fois dégénérées et la phase de Mott $\rho = 1$ est identique à celle du cas $U_2/U_0 = 0$ car le terme de conversion ne joue aucun rôle dans cette phase. *A contrario*, les conversions entre les espèces équilibrent les populations des phases de Mott $\rho = \{2, 3, 4\}$, soit $\rho_0 = \rho_\Lambda$.

Il convient d'apporter quelques précisions sur ces phases de Mott. Le Tableau 5.3 renseigne sur les valeurs des corrélations densité-densité et spin-spin sur site pour les états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ définis dans le Tableau 5.2. Pour $\rho = 1$, la phase de Mott, identique à celle du cas $U_2/U_0 = 0$, est équivalente à un système de spin-1/2 sur réseau: $S^2(0) = S_{xx}(0) + S_{yy}(0) + S_{zz}(0) = (\rho/2)(\rho/2 + 1) = 3/4$. Pour $\rho > 1$, le terme de conversion favorise des corrélations densité-densité positives entre particules de même espèce et défavorise les corrélations densité-densité entre particules d'espèces différentes. Dans toutes les phases de Mott, le carré de l'aimantation sur site $S^2(0)$ prend sa

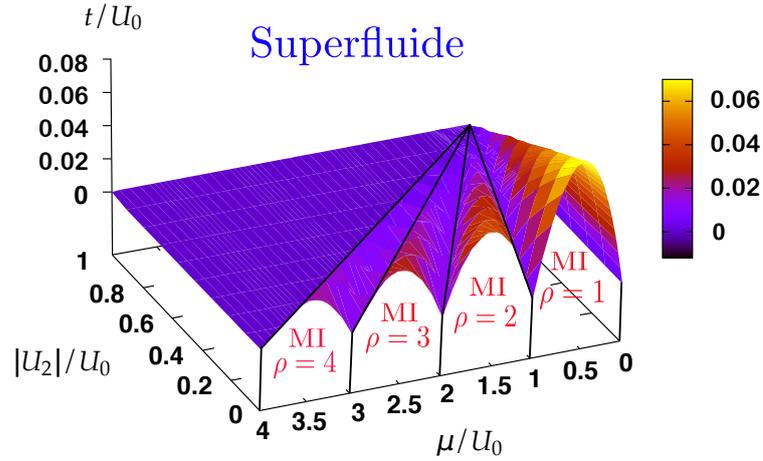


FIGURE 5.7 – Évolution de la frontière MI-superfluide du diagramme de phase en champ moyen avec conversions de spin $U_2/U_0 < 0$ en fonction de $|U_2|/U_0$. La base des lobes MI en $t/U_0 = 0$ décroît linéairement avec $|U_2|/U_0$ et toutes les phases MI disparaissent lorsque $|U_2|/U_0 = 1$. Toutes les transitions sont du second ordre.

	État	$C_{00}(0)$	$C_{0\Lambda}(0)$	$C_{\Lambda\Lambda}(0)$	$S_{xx}(0)$	$S_{yy}(0)$	$S_{zz}(0)$	$S^2(0)$	$\Delta S(0)$
Mott $\rho = 1$	$ \varphi_1\rangle$	$1 = \rho_0^2$	0	0	0.25	0.25	0.25	0.75	-0.25
	$ \varphi_2\rangle$	0	0	$1 = \rho_\Lambda^2$	0.25	0.25	0.25	0.75	-0.25
Mott $\rho = 2$	$ \varphi_1\rangle$	$1 = \rho_0^2$	$1 = \rho_0 \rho_\Lambda$	$1 = \rho_\Lambda^2$	1	1	0	2	0
	$ \varphi_2\rangle$	$2 > \rho_0^2$	$0 < \rho_0 \rho_\Lambda$	$2 > \rho_\Lambda^2$	1	0	1	2	0
Mott $\rho = 3$	$ \varphi_1\rangle$	$3 > \rho_0^2$	$1.5 < \rho_0 \rho_\Lambda$	$3 > \rho_\Lambda^2$	2.25	0.75	0.75	3.75	0.75
	$ \varphi_2\rangle$	$3 > \rho_0^2$	$1.5 < \rho_0 \rho_\Lambda$	$3 > \rho_\Lambda^2$	2.25	0.75	0.75	3.75	0.75
Mott $\rho = 4$	$ \varphi_1\rangle$	$5 > \rho_0^2$	$3 < \rho_0 \rho_\Lambda$	$5 > \rho_\Lambda^2$	4	1	1	6	2
	$ \varphi_2\rangle$	$5 > \rho_0^2$	$3 < \rho_0 \rho_\Lambda$	$5 > \rho_\Lambda^2$	4	1	1	6	2

TABLE 5.3 – Valeurs des corrélations densité-densité [Eqs. (5.1)] et spin-spin [Eqs. (5.2)] sur site pour les états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ définis dans le Tableau 5.2. La quantité $S^2(0)$ est telle que $S^2(0) = S_{xx}(0) + S_{yy}(0) + S_{zz}(0)$ et $\Delta S(0) \equiv S_{xx}(0) - [S_{yy}(0) + S_{zz}(0)]$. Les valeurs en rouge (bleu) montrent les corrélations densité-densité positives (négatives). En magenta: les corrélations spin-spin sur site montrent qu'une "aimantation" sur site suivant l'axe x est systématiquement favorisée pour $\rho > 1$.

valeur *maximale* telle que $S^2(0) = (\rho/2)(\rho/2 + 1)$. Le détail de cette aimantation sur site montre qu'une orientation privilégiée est imposée: un ordre de spin sur site suivant l'axe x est systématiquement favorisé. Ceci est une conséquence importante du signe négatif de U_2 . Afin de comprendre cette anisotropie, il convient de regarder la formulation hamiltonienne (3.26) faisant intervenir les corrélations spin-spin sur site $S_{xx}(0)$, $S_{yy}(0)$ et $S_{zz}(0)$, ou plus précisément la différence $\Delta S(0) \equiv S_{xx}(0) - [S_{yy}(0) + S_{zz}(0)]$. Le signe négatif de U_2 , en facteur devant $\Delta S(0)$,

contraint le système à adopter une phase qui maximise $\Delta S(0)$, *i.e.* qui minimise $S_{yy}(0) + S_{zz}(0)$ et maximise $S_{xx}(0)$ afin de minimiser l'énergie libre. Cette contrainte se traduit par un ordre de spin sur site suivant l'axe x . La dernière colonne du Tableau 5.3 donne la valeur de $\Delta S(0)$. Ces quatre phases de Mott sont représentées schématiquement sur la Figure 5.8.

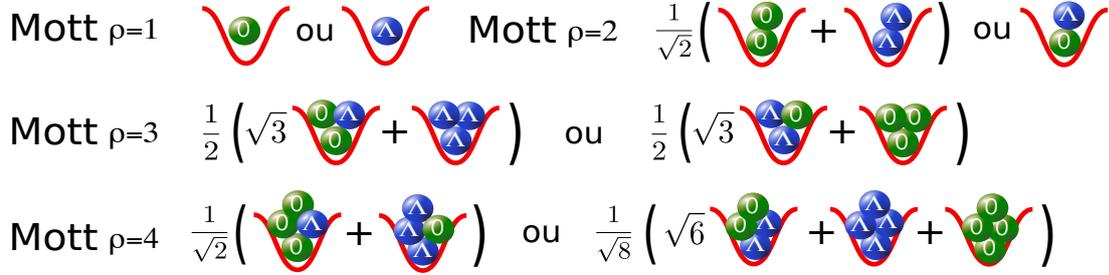


FIGURE 5.8 – Représentation des phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ en champ moyen pour $U_2/U_0 < 0$ sur un réseau optique 1D sinusoïdal représenté en rouge. Les états séparés par un « ou » ont le même poids statistique.

Phase superfluide

À titre d'exemple, la surface de l'énergie \mathcal{E}_g de l'état fondamental dans la phase superfluide est représentée sur les Figures 5.6 (c) et (d). Ces graphes présentent quatre *minima* dégénérés situés sur les diagonales $|\psi_0| = |\psi_\Lambda| \neq 0$, soit en $\theta = \frac{\pi}{2}k + \frac{\pi}{4}$ où $k \in \mathbb{Z}$. Ces quatre états de densité ρ et de densité superfluide ρ_s présentent un équilibre des densités $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$ et des densités superfluides $\rho_{s0} = \rho_{s\Lambda} = \rho_s/2$ (*cf.* Figure 5.2 en bas à gauche). Cette phase présente aussi de fortes corrélations entre particules de même espèce $C_{00}(0) = C_{\Lambda\Lambda}(0) > \rho_0^2$ et une anticorrélation pour les particules d'espèces différentes $C_{0\Lambda}(0) < \rho_0\rho_\Lambda$. La différence $\Delta S(0)$ prend sa valeur *maximale* en favorisant un ordre de spin sur site suivant l'axe x tel que $S_{xx}(0) \geq S_{yy}(0) = S_{zz}(0)$ (*cf.* Figure 5.2 en bas à droite). À la différence du cas sans conversion $U_2/U_0 = 0$, les valeurs des densités et des corrélations spin-spin sont déterminées de façon unique quel que soit l'état initial.

Transitions de phases

La Figure 5.9 représente l'évolution des densités en fonction du potentiel chimique μ/U_0 avec $t/U_0 = 0.02$. Cette coupe verticale est représentée sur le diagramme de phase de la Figure 5.5 par la ligne bleue en trait discontinu. Cette coupe traverse les quatre lobes MI du diagramme de phase, ainsi que la région superfluide qui les sépare. Ces quatre phases de Mott sont représentées par les plateaux de densité $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec une densité superfluide nulle $\rho_s = 0$. Tout le long de cette coupe, excepté pour $\rho = 1$, les densités prennent une valeur unique telle que $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$. Ceci est dû aux effets de conversions du spin qui favorisent des états sur site composés d'autant de particules 0 que de particules Λ . Sur cette figure, le lobe $\rho = 1$ n'est composé que de bosons de spin 0, ce qui représente un des deux états dégénérés possibles de cette phase. Dans ce lobe, il n'est pas possible d'avoir deux particules sur un site et donc d'avoir une conversion entre les deux espèces. Ceci explique pourquoi cette phase de Mott n'est composée, selon le champ moyen, que d'une seule des deux espèces. Le module du paramètre d'ordre $\psi = \sqrt{\rho_s}$ varie continûment lors de cette coupe, ce qui indique que les transitions de phases sont du second ordre.

La Figure 5.10 montre l'évolution de ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités fixées $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$. Les graphes de la Figure 5.6 correspondent au profil de l'énergie de la courbe orange avec $\rho = 2$ pour les quatre valeurs $t/U_0 = \{0.01, 0.04, 0.05, 0.08\}$. Le comportement qualitatif de ces courbes est le même qu'avec $U_2/U_0 = 0$ et toutes les transitions sont du second ordre. Seule la valeur de t/U_0 à la transition a changé en diminuant systématiquement pour $\rho > 1$.

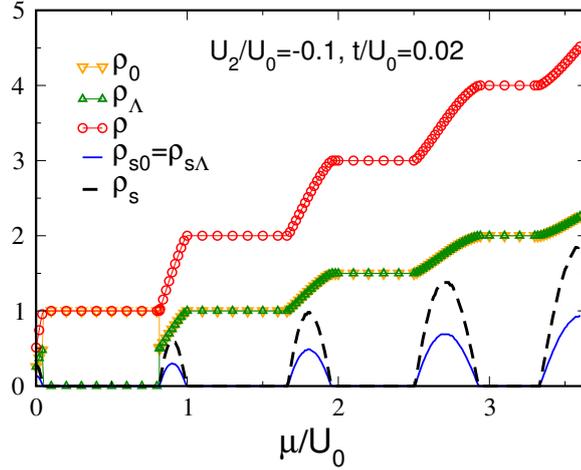


FIGURE 5.9 – Coupe verticale du diagramme de phase de la Figure 5.5 avec $t/U_0 = 0.02$ et $U_2/U_0 = -0.1$. Cette coupe traverse les quatre lobes MI du diagramme de phase, indiqués par les plateaux de la densité, ainsi que la région superfluide qui les sépare. Les valeurs des densités ρ_0 , ρ_Λ , ρ_{s0} et $\rho_{s\Lambda}$ sont déterminées de manière unique, excepté dans le lobe $\rho = 1$ pour ρ_0 et ρ_Λ .

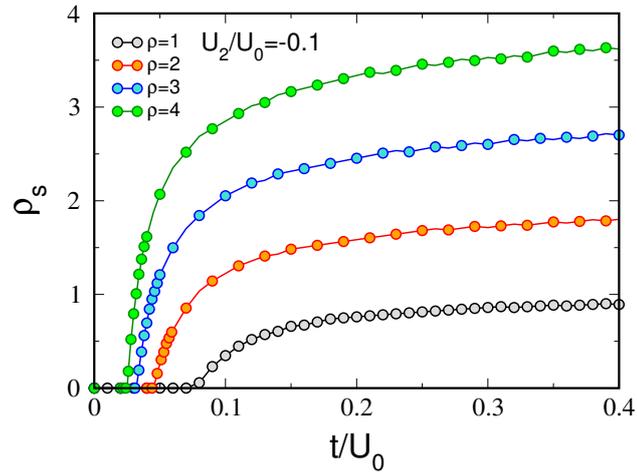


FIGURE 5.10 – Évolution de la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = -0.1$. Ces courbes correspondent à des coupes horizontales des lobes MI en passant par leur extrémité en fixant le potentiel chimique, puis à adapter celui-ci pour maintenir la densité constante. L'évolution continue de ρ_s est la signature de transitions du second ordre.

5.1.4 Mélange avec conversions du spin : $U_2/U_0 > 0$

Le diagramme de phase du système avec $U_2/U_0 = 0.1$, représenté sur la Figure 5.11, est obtenu de la même façon que ceux des cas précédents $U_2/U_0 = 0$ et $U_2/U_0 = -0.1$. Nous montrerons ici que le choix de la valeur $U_2/U_0 = 0.1$ ¹ est particulièrement intéressant.

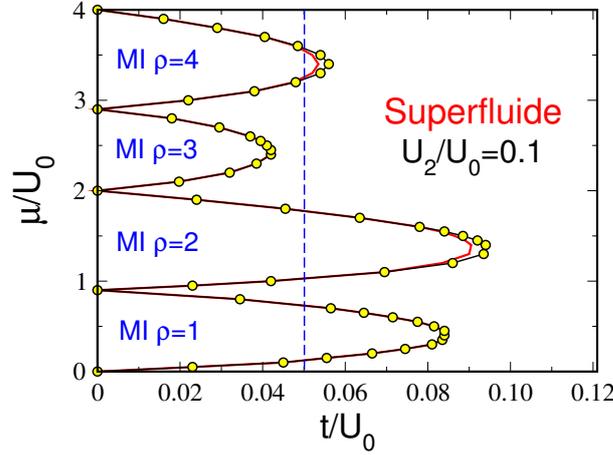


FIGURE 5.11 – Diagramme de phase en champ moyen avec conversions du spin $U_2/U_0 = 0.1$. La phase superfluide présente un déséquilibre des populations de spin 0 et Λ , soit $\rho_{s0} = 0$ et $\rho_{s\Lambda} = \rho_s$ avec $\rho_0 < \rho_\Lambda$, soit l’opposé $\rho_{s0} = \rho_s$ et $\rho_{s\Lambda} = 0$ avec $\rho_0 > \rho_\Lambda$. La phase superfluide est donc polarisée. Les transitions de phases sont toutes du second ordre, excepté aux extrémités des lobes MI de densités paires, zones métastables situées entre la ligne rouge et la ligne noire pour lesquelles les transitions sont du premier ordre. La ligne bleue en trait discontinu correspond à la coupe de la Figure 5.16.

Phases de Mott

Les Figures 5.12 (a) et (b) montrent la surface de l’énergie de l’état fondamental dans la phase de Mott $\rho = 2$ avec le rapport $U_2/U_0 = 0.05$. En (a), l’énergie est *minimale* pour $\psi = 0$, signature standard de la phase isolante de Mott. En (b), l’énergie présente quatre *minima* locaux symétriques dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_Λ et un minimum global en $\psi = 0$. Ceci indique que la phase de Mott est stable et que la phase superfluide est métastable. Le système est donc encore dans la phase de Mott, mais approche la transition vers la phase superfluide. Cette métastabilité est aussi observée pour $U_2/U_0 = 0.1$, mais est exacerbée pour des rapports U_2/U_0 plus petits, ce qui permet de mieux représenter cet effet graphiquement.

L’étude des phases MI dans la limite $t/U_0 = 0$ montre que le système adopte une phase de Mott avec ρ bosons par site lorsque le potentiel chimique μ satisfait la condition $\rho - 1 < \mu/U_0 < \rho - U_2/U_0$ pour des densités impaires et $\rho - 1 - U_2/U_0 < \mu/U_0 < \rho$ pour des densités paires. Ainsi, la base des lobes MI vaut $\Delta\mu/U_0 = 1 - U_2/U_0$ pour les densités impaires et vaut $\Delta\mu/U_0 = 1 + U_2/U_0$ pour les densités paires. À la différence du cas précédent $U_2/U_0 < 0$ pour lequel toutes les phases de Mott disparaissent lorsque $U_2/U_0 = 1$, les lobes pairs persistent pour ce rapport.

1. Plus généralement, $U_2/U_0 \lesssim 0.2$.

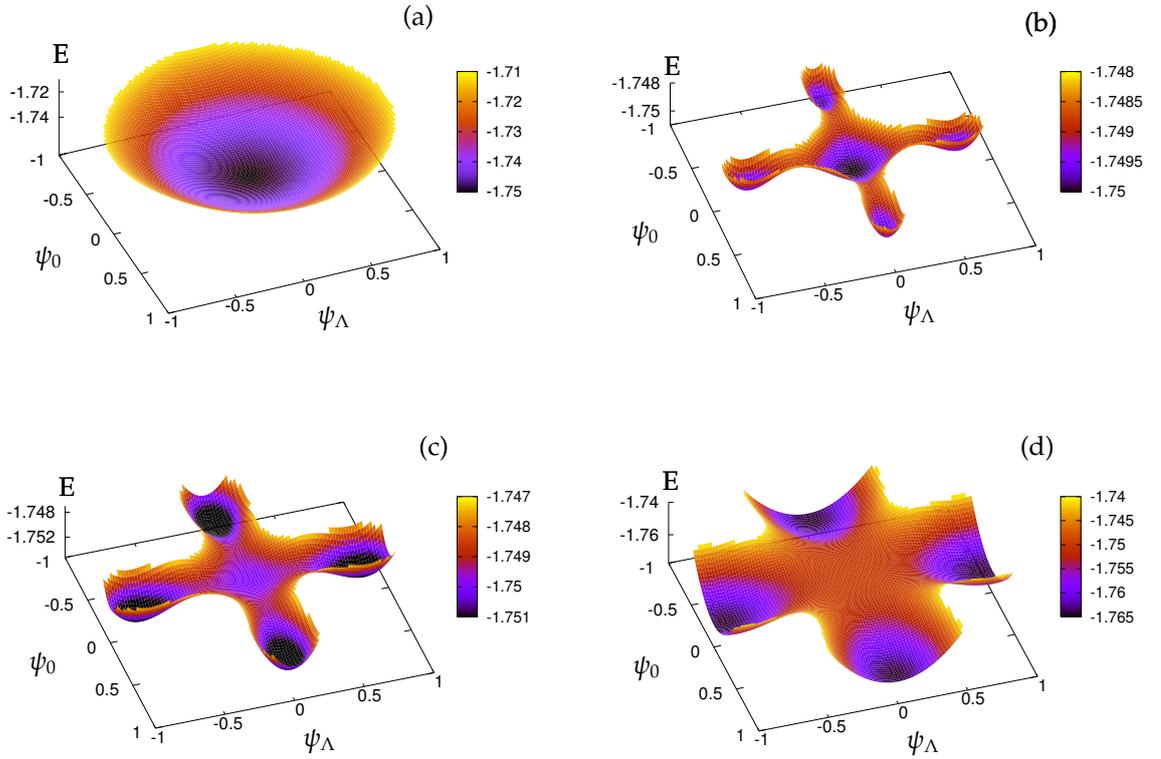


FIGURE 5.12 – Minimum de l'énergie en fonction des composantes ψ_0 et ψ_Λ du paramètre d'ordre pour le rapport $U_2/U_0 = 0.05$. De (a) vers (d): évolution de l'énergie lors de la transition de la phase de MI [(a) et (b)] vers la phase superfluide [(c) et (d)] pour la densité $\rho = 2$ ($\mu/U_0 = 1.35$). En (a) $t/U_0 = 0.030$: l'énergie est *minimale* pour $\psi = 0$, signature standard de la phase isolante de Mott. En (b) $t/U_0 = 0.080$: l'énergie présente quatre *minima* locaux symétriques dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_Λ et un minimum global en $\psi = 0$. Ceci indique que la phase MI est stable et que la phase superfluide est métastable, le système est donc encore dans la phase de Mott, mais approche la transition vers la phase superfluide. En (c) $t/U_0 = 0.082$: l'énergie présente quatre *minima* globaux symétriques dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_Λ et un minimum local en $\psi = 0$. La phase MI est maintenant métastable et la phase superfluide est stable, le système vient juste de passer dans la phase superfluide. En (d) $t/U_0 = 0.090$: l'énergie présente quatre *minima* globaux symétriques dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_Λ , le système est superfluide. L'évolution discontinue du minimum global est l'indicateur d'une transition du premier ordre.

La Figure 5.13 représente l'évolution de la frontière entre la phase MI et la phase superfluide en fonction de U_2/U_0 . On peut voir sur cette figure que, lorsque $U_2/U_0 = 1.0$, toutes les phases MI de densités impaires ont disparu et seules les phases MI de densités paires existent. De plus, les zones grises délimitent les régions pour lesquelles les transitions sont du premier ordre. La Figure 5.14 permet une comparaison directe du diagramme de phase pour les deux rapports $U_2/U_0 = 0.1$ et $U_2/U_0 = 1.0$.

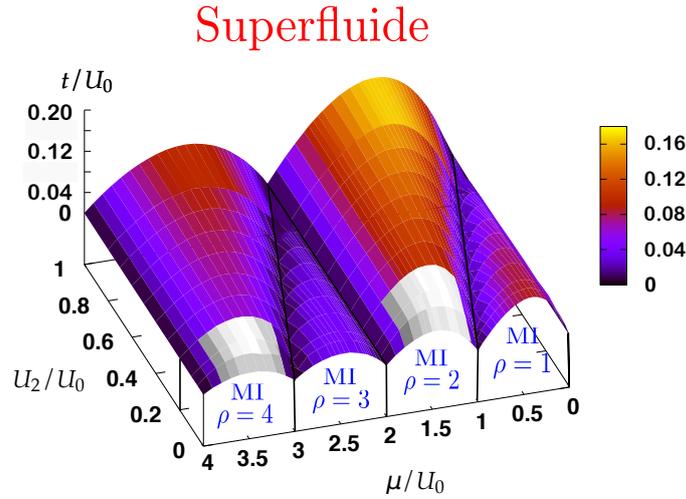


FIGURE 5.13 – Frontière MI-superfluide du diagramme de phase en champ moyen avec conversions de spin $U_2/U_0 > 0$ en fonction de U_2/U_0 . La base des lobes MI impairs en $t/U_0 = 0$ décroît linéairement avec U_2/U_0 à l’opposé de la base des lobes MI pairs qui croît linéairement avec U_2/U_0 . Lorsque $U_2/U_0 = 1$, toutes les phases MI de densités impaires disparaissent, seules les phases MI de densités paires existent. Les zones grises délimitent les régions pour lesquelles les transitions sont du premier ordre. Partout ailleurs, ainsi qu’en $U_2/U_0 = 0$, les transitions sont du second ordre.

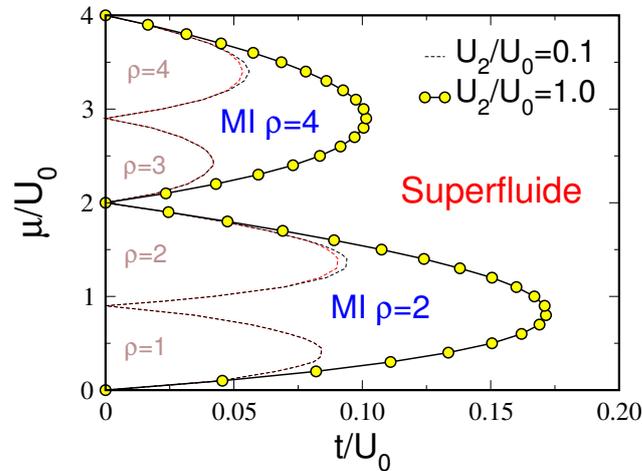


FIGURE 5.14 – Superposition des diagrammes de phase en champ moyen avec les rapports $U_2/U_0 = 0.1$ et $U_2/U_0 = 1.0$. Le diagramme de phase avec $U_2/U_0 = 1.0$ n’est composé que de lobes de densités paires largement étendus et toutes les transitions de phase de ce diagramme sont du second ordre.

La dégénérescence et l’énergie des phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = 0.1$ sont indiquées dans le Tableau 5.4. Nous explicitons les états qui composent ces phases et le couple des densités (ρ_0, ρ_Λ) qui leur correspond. Pour $\rho = 1$, la phase de Mott est identique à celle des cas $U_2/U_0 = -0.1$ et $U_2/U_0 = 0$. Pour $\rho > 1$, ce tableau montre clairement une différence

entre les phases de Mott de densités paires et impaires: les densités des états de la phase de Mott $\rho = 3$ sont déséquilibrées¹, alors qu'elles sont équilibrées pour l'état des phases de Mott de densité paire. Remarquons que la dégénérescence des phases de Mott de densité paire, observée lorsque $U_2/U_0 = 0$ dans le Tableau 5.1, est totalement levée lorsque $U_2/U_0 > 0$, alors que celle-ci est partiellement levée pour les phases de Mott de densité impaire. Une analyse plus fine de ces phases montre que le signe positif de U_2 a aussi un impact sur "l'aimantation" et sur les corrélations sur site.

	Mott $\rho = 1$	Mott $\rho = 2$	Mott $\rho = 3$	Mott $\rho = 4$
Dégénérescence	2	0	2	0
Énergie \mathcal{E}_g	0	$U_0 - U_2$	$3U_0 - U_2$	$6U_0 - 2U_2$
État $ \varphi_1\rangle$	$ 0\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(00\rangle - \Lambda\Lambda\rangle)$	$\frac{1}{2}(\sqrt{3} \Lambda\Lambda\Lambda\rangle - 00\Lambda\rangle)$	$\frac{1}{2}(\sqrt{3/2} 0000\rangle + \sqrt{3/2} \Lambda\Lambda\Lambda\Lambda\rangle - 00\Lambda\Lambda\rangle)$
Densités (ρ_0, ρ_Λ)	(1, 0)	(1, 1)	(0.5, 2.5)	(2, 2)
.....
État $ \varphi_2\rangle$	$ \Lambda\rangle$		$\frac{1}{2}(\Lambda\Lambda 0\rangle - \sqrt{3} 000\rangle)$	
Densités (ρ_0, ρ_Λ)	(0, 1)		(2.5, 0.5)	

TABLE 5.4 – Dégénérescence, énergie, états et densités des phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. La phase de Mott $\rho = 1$ est identique à celle des cas $U_2/U_0 = -0.1$ et $U_2/U_0 = 0$. Pour $\rho > 1$, le terme de conversion déséquilibre les densités des états des phases de Mott de densité impaire $\rho_0 \neq \rho_\Lambda$ (valeurs en bleu) et lève totalement la dégénérescence des phases de Mott de densité paire observée avec $U_2/U_0 = 0$. De plus, les populations des phases de Mott de densité paire sont équilibrées (valeurs en magenta). La comparaison de ce tableau avec les Tableaux 5.1 et 5.2 permet de voir l'influence du signe positif de U_2 .

Les valeurs des corrélations densité-densité et spin-spin sur site sont données dans le Tableau 5.5. Les états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont définis dans le Tableau 5.4. L'avant-dernière colonne est identique au cas $U_2 < 0$: le carré de l'aimantation sur site $S^2(0)$ prend sa valeur *maximale* telle que $S^2(0) = (\rho/2)(\rho/2 + 1)$ dans toutes les phases de Mott. Pour $\rho = 1$, la phase de Mott est équivalente à un système de spin-1/2 sur réseau: $S^2(0) = (\rho/2)(\rho/2 + 1) = 3/4$. Pour $\rho > 1$, le terme de conversion favorise là aussi des corrélations densité-densité positives entre particules de même espèce et défavorise les corrélations densité-densité entre particules d'espèces différentes. Une conséquence importante du signe positif de U_2 est de privilégier un ordre de spin sur site dans le plan yz . En effet, le signe positif de U_2 contraint le système à adopter une phase qui minimise $\Delta S(0) = S_{xx}(0) - [S_{yy}(0) + S_{zz}(0)]$, *i.e.* qui maximise $S_{yy}(0) + S_{zz}(0)$ et minimise $S_{xx}(0)$ afin de minimiser l'énergie libre. Notons que les valeurs de $\Delta S(0)$ données par la dernière colonne du Tableau 5.5 sont bien plus petites que celles du cas $U_2 < 0$ (*cf.* Tableau 5.3). Ces quatre phases de Mott sont représentées sur la Figure 5.15.

1. Ceci concerne les densités impaires de façon générale.

	État	$C_{00}(0)$	$C_{0\Lambda}(0)$	$C_{\Lambda\Lambda}(0)$	$S_{xx}(0)$	$S_{yy}(0)$	$S_{zz}(0)$	$S^2(0)$	$\Delta S(0)$
Mott $\rho = 1$	$ \varphi_1\rangle$	$1 = \rho_0^2$	0	0	0.25	0.25	0.25	0.75	-0.25
	$ \varphi_2\rangle$	0	0	$1 = \rho_\Lambda^2$	0.25	0.25	0.25	0.75	-0.25
Mott $\rho = 2$	$ \varphi_1\rangle$	$2 > \rho_0^2$	$0 < \rho_0\rho_\Lambda$	$2 > \rho_\Lambda^2$	0	1	1	2	-2
Mott $\rho = 3$	$ \varphi_1\rangle$	$1 > \rho_0^2$	$0.5 < \rho_0\rho_\Lambda$	$7 > \rho_\Lambda^2$	0.25	1.75	1.75	3.75	-3.25
	$ \varphi_2\rangle$	$7 > \rho_0^2$	$0.5 < \rho_0\rho_\Lambda$	$1 > \rho_\Lambda^2$	0.25	1.75	1.75	3.75	-3.25
Mott $\rho = 4$	$ \varphi_1\rangle$	$7 > \rho_0^2$	$1 < \rho_0\rho_\Lambda$	$7 > \rho_\Lambda^2$	0	3	3	6	-6

TABLE 5.5 – Valeurs des corrélations densité-densité [Eqs. (5.1)] et spin-spin [Eqs. (5.2)] sur site pour les états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ définis dans le Tableau 5.4. La quantité $S^2(0)$ est telle que $S^2(0) = S_{xx}(0) + S_{yy}(0) + S_{zz}(0)$ et $\Delta S(0) = S_{xx}(0) - [S_{yy}(0) + S_{zz}(0)]$. Les valeurs en rouge (bleu) montrent les corrélations densité-densités positives (négatives). En magenta: une "aimantation" sur site dans le plan yz est systématiquement favorisée pour $\rho > 1$. Ce tableau est à comparer avec le Tableau 5.3.

$$\begin{aligned}
 \text{Mott } \rho=1 & \quad \text{ou} \\
 \text{Mott } \rho=2 & \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\text{ou} - \right) \\
 \text{Mott } \rho=3 & \quad \frac{1}{2} \left(\sqrt{3} \text{ ou} \right) \quad \text{ou} \quad \frac{1}{2} \left(\text{ou} - \sqrt{3} \text{ ou} \right) \\
 \text{Mott } \rho=4 & \quad \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{3}{2}} \text{ ou} + \sqrt{\frac{3}{2}} \text{ ou} - \text{ou} \right)
 \end{aligned}$$

FIGURE 5.15 – Représentation des phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ en champ moyen pour $U_2/U_0 > 0$ sur un réseau optique 1D sinusoïdal représenté en rouge. Les états séparés par un « ou » ont le même poids statistique. À la différence du cas $U_2/U_0 < 0$, les états mixtes composés de particules 0 et Λ sur le même site sont évités au maximum à cause du coût d'interaction supérieur à celui du coût d'interaction des particules de même espèce.

Phase superfluide

Les Figures 5.12 (c) et (d) montrent la surface de l'énergie de l'état fondamental dans la phase superfluide $\rho = 2$ avec le rapport $U_2/U_0 = 0.05$. En (c), l'énergie présente quatre *minima* globaux symétriques dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_Λ , soit en $\theta = \frac{\pi}{2}k$ où $k \in \mathbb{Z}$, et un minimum local en $\psi = 0$. La phase MI est donc métastable et la phase superfluide est stable, le système vient juste de passer dans la phase superfluide. Cette métastabilité est aussi observée pour $U_2/U_0 = 0.1$. En (d), l'énergie présente quatre *minima* globaux symétriques dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_Λ , le système est superfluide. À la différence du cas $U_2/U_0 = -0.1$,

ces quatre états présentent un déséquilibre des populations, soit $(\rho_{s0} = \rho_s, \rho_{s\Lambda} = 0)$ avec $\rho_\Lambda = 0$ lorsque k est pair, soit l'opposé $(\rho_{s0} = 0, \rho_{s\Lambda} = \rho_s)$ avec $\rho_0 = 0$ lorsque k est impair (cf. Figure 5.2 en bas à gauche). La phase superfluide est donc polarisée. De plus, la différence $\Delta S(0)$ [Eq. (5.5)] prend sa valeur *minimale* en favorisant un ordre de spin sur site suivant l'axe z tel que $S_{zz}(0) \geq S_{yy}(0) = S_{xx}(0)$ (cf. Figure 5.2 en bas à droite).

Nous appelons « état polarisé » un état tel que la distribution des densités qui lui est associée présente deux *maxima* symétriques situés proche de 0 et de N , N étant le nombre total de bosons du système. Dans la limite thermodynamique à température nulle, la brisure spontanée de symétrie contraindra le système superfluide à rester bloqué dans l'un de ces *minima*. La conséquence pour le système sera donc d'être composé majoritairement d'une espèce, l'autre ayant presque totalement disparue.

L'étude de ce système avec la méthode de Monte Carlo quantique présentée dans la section suivante confirmera que la phase superfluide est bien polarisée. Ceci nous permet de penser, *a posteriori*, que le choix du hamiltonien $\mathcal{H}_{spin1/2}$ [Eq. (3.26)] est meilleur que celui fait par Krutitsky *et al.* avec $\mathcal{H}_{spin1/2}^K$ [Eq. (3.11)] [7, 8]. En effet, avec le choix de Krutitsky *et al.*, la surface de l'énergie en fonction de ψ_0 et ψ_Λ dans la phase superfluide est invariante par rotation autour de 0 avec une énergie *minimale* \mathcal{E}_g infiniment dégénérée située sur le cercle d'équation $\psi^2 = \psi_0^2 + \psi_\Lambda^2$ et de rayon $\psi = \sqrt{\rho_s}$.

Cette surface, similaire à celle de la phase superfluide avec $U_2 = 0$ (Figure 5.1 en bas à droite), ne représente pas de polarisation et n'est pas en accord avec nos résultats obtenus avec la méthode de Monte Carlo quantique. En effet, dans leur cas, passer d'un minimum situé sur ce cercle à un autre ne nécessite aucune énergie: la moindre fluctuation quantique va donc faire évoluer librement l'état fondamental du système sur ce cercle suivant un mode de Goldstone. Il en résulte un équilibre des deux populations. Nous insistons sur le fait que l'étude des hamiltoniens $\mathcal{H}_{spin1/2}$ et $\mathcal{H}_{spin1/2}^K$ donne les mêmes résultats avec la méthode de Monte Carlo quantique, ce qui n'est plus vrai en champ moyen car cette méthode rompt la symétrie $U(1)$ des hamiltoniens.

Transitions de phases

La Figure 5.16 représente l'évolution des différentes densités lorsque le potentiel chimique μ/U_0 augmente tout en conservant constant le taux de déplacement des particules tel que $t/U_0 = 0.05$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. Les trois phases de Mott traversées sont représentées par les plateaux de densité $\rho = \{1, 2, 4\}$ avec une densité superfluide nulle $\rho_s = 0$. Le plateau de densité $\rho = 3$ ne se développe pas car cette coupe passe proche de la phase de Mott $\rho = 3$ sans la traverser. Ceci explique la décroissance de ρ_s lorsque la densité augmente vers $\rho = 3$. Hormis les deux lobes MI $\rho = \{2, 4\}$, les valeurs des densités ρ_0 et ρ_Λ ne sont pas déterminées de manière unique. Toutes les transitions sont du second ordre, excepté les transitions du lobe MI $\rho = 4$ pour lesquelles on voit très clairement une discontinuité dans l'évolution de ρ_s (et de ρ), signature d'une transition du premier ordre.

La Figure 5.17 montre l'évolution de ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. Les graphes de la Figure 5.12 correspondent à la surface de l'énergie d'une telle coupe avec $\rho = 2$ et $U_2/U_0 = 0.05$ pour les quatre valeurs $t/U_0 =$

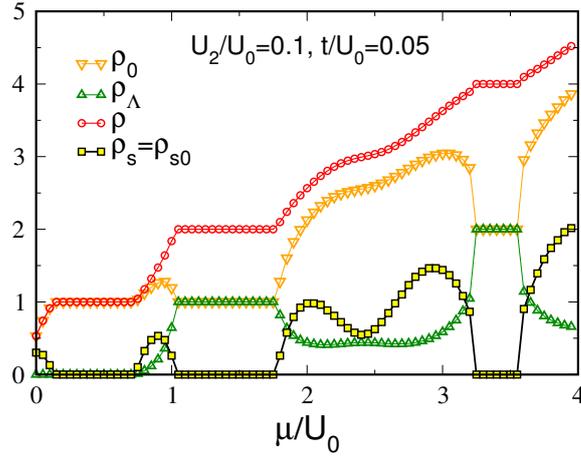


FIGURE 5.16 – Coupe verticale du diagramme de phase de la Figure 5.11 avec $t/U_0 = 0.05$ et $U_2/U_0 = 0.1$. Cette coupe traverse les lobes MI $\rho = \{1, 2, 4\}$ du diagramme de phase, ainsi que la région superfluide qui les sépare. Hormis les deux lobes MI $\rho = 2$ et $\rho = 4$, les valeurs des densités ρ_0 et ρ_Λ ne sont pas déterminées de manière unique. Toutes les transitions sont du second ordre, excepté les transitions du lobe MI $\rho = 4$ pour lesquelles on voit très clairement une discontinuité dans l'évolution de ρ_s , signature d'une transition du premier ordre.

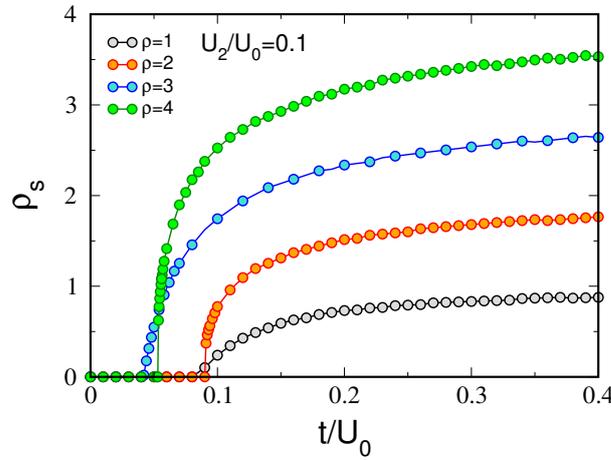


FIGURE 5.17 – Densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. Ces courbes correspondent à des coupes horizontales des lobes MI en passant par leur extrémité en adaptant le potentiel chimique pour maintenir la densité constante. L'évolution continue de ρ_s pour les densités $\rho = 1$ et $\rho = 3$ est la signature de transitions du second ordre. *A contrario*, la discontinuité dans l'évolution de ρ_s pour les densités $\rho = 2$ et $\rho = 4$ est la signature de transitions du premier ordre.

$\{0.01, 0.04, 0.05, 0.08\}$. L'évolution continue de ρ_s pour les densités impaires est la signature de transitions du second ordre, alors que la discontinuité de ρ_s à la transition pour les densités paires est la signature de transitions du premier ordre. De telles transitions n'ont pas été observées pour les cas $U_2/U_0 = 0$ et $U_2/U_0 < 0$.

Nous venons de montrer que la transition MI-superfluide est du premier ordre pour les densités paires avec $U_2/U_0 = 0.1$. Nous avons effectué une étude approfondie du saut de ρ_s à la transition en fonction de U_2/U_0 pour les densités $\rho = \{2, 4\}$. Nous nous sommes aperçus que le saut, nul en $U_2/U_0 = 0$ augmente vers sa valeur *maximale* en $U_2/U_0 \simeq 0.05$, puis décroît jusqu'à zéro en $U_2/U_0 \sim 0.2$. Ce comportement est visible sur la Figure 5.18. Les régions pour lesquelles la transition MI-superfluide a été observée du premier ordre, soit $U_2/U_0 \in]0, 0.2]$, sont représentées par les zones grises sur la Figure 5.13.

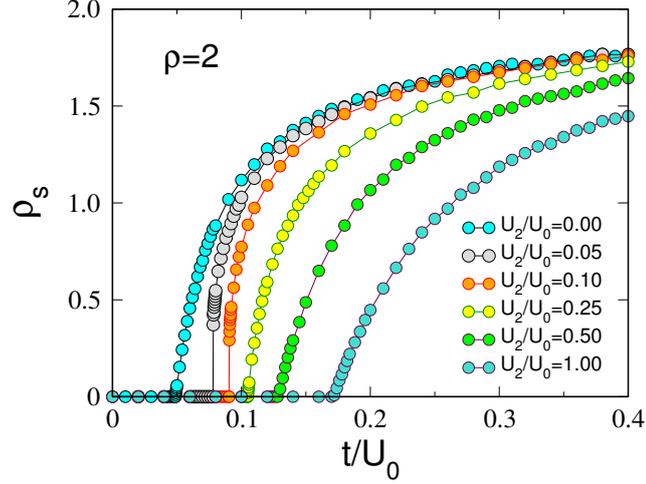


FIGURE 5.18 – Densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour $\rho = 2$ et $U_2/U_0 = \{0.00, 0.05, 0.10, 0.25, 0.50, 1.00\}$. L'évolution continue de ρ_s pour $U_2/U_0 = \{0.00, 0.25, 0.50, 1.00\}$ indique que ces transitions sont du second ordre. Sur cette figure, seuls les rapports $U_2/U_0 = \{0.05, 0.10\}$ présentent une discontinuité dans l'évolution de ρ_s , signature d'une transition du premier ordre.

5.2 Analyse exacte: Monte Carlo quantique à température nulle

Dans cette section, nous étudions le système de bosons de spin-1/2 décrit par le hamiltonien $\mathcal{H}_{spin1/2}$ [Eq. (3.26)] avec la méthode de Monte Carlo quantique et l'algorithme des Fonctions de Green Stochastiques [95, 96]. Cet algorithme permet de travailler au choix soit dans l'ensemble canonique, soit dans l'ensemble grand canonique [116]. Numériquement, la limite asymptotique de la température nulle est atteinte quand les quantités étudiées saturent lorsque l'on augmente la valeur de β . Nous verrons que, avec notre algorithme, ceci est généralement valable lorsque $\beta = 2L/t$, où L est le nombre de sites du réseau 1D et t le paramètre de saut du hamiltonien. Nous présentons les résultats obtenus avec le même plan que l'étude en champ moyen de la section précédente.

Pour les trois cas étudiés, *i.e.* $U_2/U_0 = 0$, $U_2/U_0 < 0$ et $U_2/U_0 > 0$, nous présentons le diagramme de phase du système et discutons les transitions de phases, ainsi que les différences avec les résultats obtenus en champ moyen. La comparaison de la méthode du champ moyen et de la méthode de Monte Carlo quantique montrera que les diagrammes de phases présentent un accord très approximatif dû, entre autres, à l'absence des fluctuations dans la méthode du

champ moyen. D'autre part, les transitions du premier ordre prédites par la méthode du champ moyen ne sont pas observées en 1D. Les diagrammes de phases présentés dans cette section pour $U_2/U_0 < 0$ et $U_2/U_0 > 0$ sont très similaires à ceux obtenus par G. G. Batrouni *et al.* pour le système de spin-1 avec le même algorithme [22].

5.2.1 Comment obtenir le diagramme de phase ?

Nous détaillons ici les quantités mesurées avec la méthode de Monte Carlo quantique pour un nombre d de dimension(s) afin d'avoir une référence pour toute l'étude des bosons de spin-1/2. Certaines quantités présentées ne seront pas discutées en 1D, mais seront utiles pour l'étude 2D à température finie. Le diagramme de phase est caractérisé à la fois par la mobilité des particules (isolant de Mott ou superfluide), ainsi que par la distribution des densités des deux espèces (polarisée ou centrée). Les informations principales pour déterminer le diagramme de phase sont données par les quantités suivantes:

- les densités de chaque espèce: $\rho_\sigma = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{n}_{\sigma\mathbf{r}} \rangle / L^d$ où $\langle \hat{n}_{\sigma\mathbf{r}} \rangle = \langle \hat{a}_{\sigma\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\sigma\mathbf{r}} \rangle$ est le nombre moyen de bosons de spin $\sigma = \{0, \Lambda\}$ sur le site $\mathbf{r} = (x, y)$ et L^d le nombre de sites du réseau¹ de dimension d . La densité totale est $\rho = \rho_0 + \rho_\Lambda$;
- les histogrammes $P(\rho_0)$ et $P(\rho_\Lambda)$ des densités ρ_0 et ρ_Λ ;
- l'énergie interne moyenne $E = \langle \mathcal{H}_{spin1/2} \rangle$ et la capacité thermique $C_v = \partial E / \partial T = \beta^2 (\langle \mathcal{H}_{spin1/2}^2 \rangle - \langle \mathcal{H}_{spin1/2} \rangle^2)$. La quantité β est l'inverse de la température ;
- la compressibilité locale $\tilde{\kappa} = \beta \sum_{\mathbf{r}} (\langle \hat{n}_{\mathbf{r}}^2 \rangle - \langle \hat{n}_{\mathbf{r}} \rangle^2)$. La compressibilité locale est *minimale* dans la phase de Mott ;
- les valeurs moyennes des corrélations spin-spin sur site:

$$\begin{cases} S_{xx}(0) &= \sum_{\mathbf{r}} \langle (\hat{S}_{\mathbf{r}}^x)^2 \rangle / L^d \\ S_{yy}(0) &= \sum_{\mathbf{r}} \langle (\hat{S}_{\mathbf{r}}^y)^2 \rangle / L^d \\ S_{zz}(0) &= \sum_{\mathbf{r}} \langle (\hat{S}_{\mathbf{r}}^z)^2 \rangle / L^d \end{cases} \quad (5.6)$$

avec $(\hat{S}_{\mathbf{r}}^x)^2$, $(\hat{S}_{\mathbf{r}}^y)^2$ et $(\hat{S}_{\mathbf{r}}^z)^2$ précédemment définis par l'Eq. (5.4) ;

- la densité superfluide ρ_s , détaillée ci-dessous.

Nous avons principalement utilisé l'ensemble canonique pour lequel le nombre total $N = N_0 + N_\Lambda$ de particules est fixé et est relié au potentiel chimique par $\mu(N) = E(N+1) - E(N)$ à $T = 0$. Dans ce cas, l'énergie interne moyenne E est égale à l'énergie libre de l'état fondamental. Dans l'ensemble canonique, bien que N soit fixé, le nombre de particules de chaque espèce fluctue lorsque les conversions sont non nulles ($U_2/U_0 \neq 0$). Dans le cas d'une seule espèce de bosons sur un réseau à d dimension(s), la densité superfluide est donnée par

1. Réseau carré en 2D.

$$\rho_s = \frac{\langle W^2 \rangle}{2dt\beta L^{d-2}}, \quad (5.7)$$

où W est le *winding number* des bosons [101, 102]. Cette quantité topologique renseigne sur la cohérence du déplacement des particules durant leur évolution en temps imaginaire. Nous entendons par « quantité topologique » une quantité calculée par la moyenne de termes étant des multiples de la taille L du système. Dans notre cas, deux espèces de bosons interviennent et peuvent se convertir l'une en l'autre créant ainsi des fluctuations dans le nombre de lignes d'univers de chaque espèce. Ces conversions impliquent que seule la valeur moyenne du *winding number* total $\langle W_0 + W_\Lambda \rangle$ représente une quantité topologique relevante pour la superfluidité et il n'est pas possible de calculer la densité superfluide de chacune des deux espèces indépendamment [117]. La densité superfluide est donc

$$\rho_s = \frac{\langle (W_0 + W_\Lambda)^2 \rangle}{2dt\beta L^{d-2}}. \quad (5.8)$$

Les fonctions de corrélations, définies à partir d'opérateurs agissant simultanément sur au moins deux sites différents du système, nous apporteront des précisions importantes sur le détail des phases. Ces quantités sont:

- les corrélations spatiales densité-densité, renseignant sur l'ordre spatial du système (onde de densité, phase homogène), définies par

$$\begin{cases} C_{00}(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{n}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{n}_{0\mathbf{r}} \rangle / L^d = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{0\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}} \rangle / L^d \\ C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} \rangle / L^d = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}} \rangle / L^d \\ C_{0\Lambda}(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{n}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} \rangle / L^d = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}} \rangle / L^d \end{cases} \quad (5.9)$$

- les fonctions de Green individuelles renseignant sur la cohérence de phase de la fonction d'onde du système et sur le type de mouvement des particules. Les fonctions de Green à un corps sont définies par

$$\begin{cases} G_0(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}} + \hat{a}_{0\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \rangle / 2L^d \\ G_\Lambda(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}} + \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}} \rangle / 2L^d \end{cases} \quad (5.10)$$

avec la propriété d'être égales aux densités lorsque $\mathbf{R} = \mathbf{0}$: $G_0(\mathbf{R} = \mathbf{0}) = \rho_0$ et $G_\Lambda(\mathbf{R} = \mathbf{0}) = \rho_\Lambda$. La fonction de Green $G_0(\mathbf{R})$ [$G_\Lambda(\mathbf{R})$] est la valeur moyenne de l'opérateur qui détruit une particule de spin 0 [Λ] pour la recréer \mathbf{R} sites plus loin. Un tel déplacement se faisant pour une grande valeur de \mathbf{R} signifie que les particules sont délocalisées dans l'ensemble du système et est la signature d'une cohérence de phase, signature typique de la phase superfluide;

- la transformée de Fourier des fonctions de Green individuelles d'impulsion nulle donne la fraction condensée de chaque espèce:

$$\rho_\sigma(\mathbf{k} = \mathbf{0}) = \sum_{\mathbf{R}} G_\sigma(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} / L^d, \quad (5.11)$$

où $\sigma = \{0, \Lambda\}$. La fraction condensée totale $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0}) = \rho_0(\mathbf{k} = \mathbf{0}) + \rho_\Lambda(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ est toujours nulle en 1D dans la limite thermodynamique, quelle que soit la température (*cf.* théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg);

– les fonctions de Green à deux corps telles que

$$\left\{ \begin{array}{l} G_{00}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{0\mathbf{r}} \hat{a}_{0\mathbf{r}} + h.c. \rangle / 2L^d \\ G_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}} \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}} + h.c. \rangle / 2L^d \\ G_{Corr}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}} \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{0\mathbf{r}} + h.c. \rangle / 2L^d \\ G_{Anticorr}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}} \hat{a}_{0\mathbf{r}} \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} + h.c. \rangle / 2L^d \end{array} \right. \quad (5.12)$$

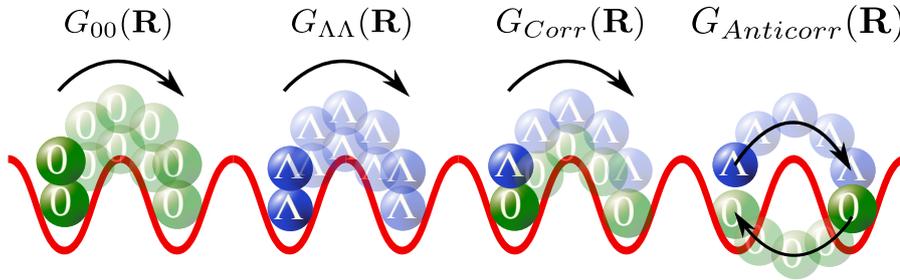


FIGURE 5.19 – Actions des fonctions de Green à deux corps.

La fonction de Green $G_{00}(\mathbf{R})$ [$G_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R})$] est la valeur moyenne de l'opérateur qui détruit deux particules de spin 0 [Λ] situées sur le même site pour les récréer ensemble \mathbf{R} sites plus loin. La fonction de Green corrélée $G_{Corr}(\mathbf{R})$ est la valeur moyenne de l'opérateur qui détruit une particule 0 et une particule Λ situées sur le même site pour les récréer ensemble \mathbf{R} sites plus loin. Enfin, la fonction de Green anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ est la valeur moyenne de l'opérateur qui déplace simultanément une particule 0 du site A vers le site B et une particule Λ du site B vers le site A, les sites A et B étant deux sites distants de \mathbf{R} sites. Ceci représente un mouvement anticorrélé de ces deux particules, d'où le nom de $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ (*cf.* Figure 5.19). Dans la phase superfluide, lorsque les particules présentent individuellement une cohérence de phase et qu'aucune corrélation n'existe entre elles, la valeur asymptotique en $\mathbf{R} = \mathbf{L}/2$ des fonctions de Green à deux corps vaut le produit des fonctions de Green individuelles. Par ailleurs, la limite supérieure de $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$, telle que $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) = \rho_0\rho_\Lambda$, est atteinte lorsqu'une cohérence parfaite existe;

– les corrélations spin-spin telles que

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{xx}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^x \hat{S}_{\mathbf{r}}^x \rangle / L^d \\ S_{yy}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^y \hat{S}_{\mathbf{r}}^y \rangle / L^d \\ S_{zz}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^z \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \rangle / L^d \end{array} \right. \quad (5.13)$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^x \hat{S}_{\mathbf{r}}^x = \left(\hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}} + \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{0\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}} + \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{0\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}} + \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}} \right) / 4 \\ \hat{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^y \hat{S}_{\mathbf{r}}^y = \left(\hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}} + \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{0\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}} - \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{0\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}} - \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\Lambda\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}} \right) / 4 \\ \hat{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^z \hat{S}_{\mathbf{r}}^z = \left(\hat{n}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{n}_{0\mathbf{r}} + \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} - \hat{n}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}} - \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{n}_{0\mathbf{r}} \right) / 4 \end{array} \right. \quad (5.14)$$

Nous pouvons remarquer que les corrélations spin-spin dans le plan xy données par $S_{xx}(\mathbf{R}) + S_{yy}(\mathbf{R})$ et que les corrélations spin-spin suivant l'axe z données par $S_{zz}(\mathbf{R})$ valent

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{xx}(\mathbf{R}) + S_{yy}(\mathbf{R}) = G_{Anticorr}(\mathbf{R}) \\ S_{zz}(\mathbf{R}) = (C_{00}(\mathbf{R}) + C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R}) - 2C_{0\Lambda}(\mathbf{R})) / 4 \end{array} \right. \quad (5.15)$$

L'égalité des corrélations densité-densité $\forall \mathbf{R} \neq \mathbf{0}$ implique donc que $S_{zz}(\mathbf{R}) = 0$, soit l'absence de corrélation spin-spin suivant l'axe z .

Il est possible de discriminer la phase superfluide d'une phase désordonnée incompressible (Mott) ou peu compressible (liquide) en traçant simplement ρ et ρ_s en fonction de μ/U_0 pour différentes valeurs de t/U_0 . Ceci représente une coupe verticale du diagramme de phase pour une valeur de t/U_0 fixée (cf. Figure 5.21, par exemple). Dans l'ensemble canonique, une telle coupe est obtenue en augmentant le nombre total de particules d'une unité simulation par simulation, le potentiel chimique étant directement donné par $\mu(N) = E(N+1) - E(N)$ à température nulle.

5.2.2 Mélange sans conversion du spin et limite de température nulle

Nous nous intéressons tout d'abord au cas le plus simple sans conversion du spin. Dans ce cas il n'y a aucune façon de convertir les espèces entre elles et l'état initial détermine la composition du système dans l'ensemble canonique. L'énergie de répulsion sur site entre les particules vaut U_0 quelle que soit la nature des particules. Nous avons montré à la sous-section 5.1.2 que, selon la méthode du champ moyen, le diagramme de phase est insensible aux valeurs des densités des deux espèces, mais dépend seulement de la densité totale.

Nous commençons l'analyse avec la méthode de Monte Carlo quantique en présentant le diagramme de phase de deux cas: l'un composé uniquement de particules 0 et l'autre composé d'autant de particules 0 que de particules Λ , tel que $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$. Ces deux diagrammes, présentés sur la Figure 5.20, sont composés de phases isolantes de Mott (MI) de différentes densités et d'une phase superfluide. Ces diagrammes de phase ont été obtenus en effectuant des coupes verticales dans l'ensemble canonique, *i.e.* en augmentant le nombre total de particules d'une unité simulation par simulation pour une valeur de t/U_0 fixée. Lors d'une telle coupe, le potentiel chimique $\mu = E(N+1) - E(N)$ subit un saut (*gap*) lorsque le lobe d'une phase isolante de Mott est traversé. Ce saut permet de construire la démarcation entre les phases MI et la phase superfluide. Nous pouvons voir sur la Figure 5.20 que la démarcation entre les phases MI et la phase superfluide est strictement identique dans les deux cas, ce qui est en accord avec le champ moyen, et que les effets de taille finie interviennent peu. Effectuer une telle coupe en variant μ

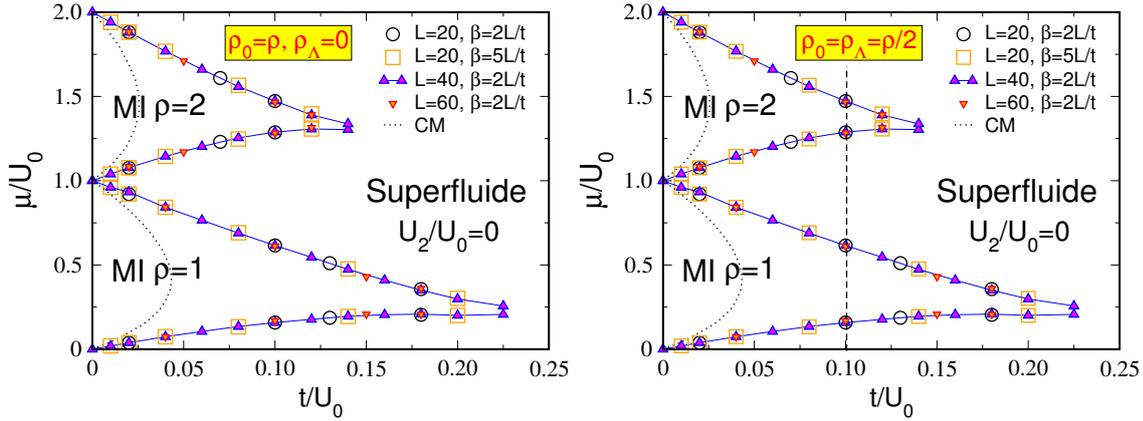


FIGURE 5.20 – Diagrammes de phase en Monte Carlo quantique (MCQ) sans conversion du spin $U_2/U_0 = 0$ et diagramme de phase en champ moyen (CM) en pointillés (*cf.* Figure 5.1). Le diagramme de gauche correspond à un système composé de particules de spin 0 uniquement et celui de droite correspond à un système composé d’autant de particules de spin 0 que de particules de spin Λ . Ces deux diagrammes sont identiques, seul le détail des phases change. Lorsque $t/U_0 \neq 0$, le CM et le MCQ donnent des diagrammes en désaccord qualitatif et quantitatif. Le diagramme de phase du CM présente des lobes MI arrondis, alors qu’en MCQ ceux-ci sont pointus. Selon le CM, toutes les transitions sont du second ordre. Les transitions de phases en MCQ sont du second ordre, excepté à l’extrémité des lobes MI où la transition est de la classe d’universalité de Kosterlitz-Thouless [66]. La ligne verticale en trait discontinu correspond à la coupe de la Figure 5.21.

dans l’ensemble grand canonique donne les mêmes résultats. La Figure 5.21 représente la coupe verticale du diagramme de phase de la Figure 5.20 à droite représentée par la ligne verticale en trait discontinu.

Afin de comparer la méthode de Monte Carlo quantique avec celle du champ moyen, nous traçons en pointillés sur la Figure 5.20 le diagramme de phase obtenu en champ moyen (*cf.* Figure 5.1). Lorsque $t/U_0 \neq 0$, les deux méthodes donnent des diagrammes en désaccord qualitatif et quantitatif¹. Le diagramme de phase en champ moyen présente des lobes arrondis, alors qu’en Monte Carlo quantique ceux-ci sont pointus. Cette forme pointue est consistante avec l’existence d’un point critique, situé au bout des lobes, de la classe d’universalité de Kosterlitz-Thouless du modèle XY bidimensionnel prédit par des arguments d’échelle (*scaling*) généraux [66] et observé pour la première fois en Monte Carlo quantique en 1990 [99].

Limite de température nulle

Cette limite est obtenue lorsque les quantités qui définissent les phases, ainsi que leurs propriétés, saturent: elles ne sont plus fonction de la température. Comme nous le montrons ci-dessous, ceci est généralement vrai pour la plupart des quantités (ρ, ρ_s, E , etc.) lorsque l’inverse de la température β vaut deux fois la taille du système, soit $\beta = 2L/t$, le terme de saut t étant fixé à l’unité dans toute cette thèse. Il est évident qu’augmenter β est coûteux en temps de calcul.

1. Différence d’un facteur 5 environ.

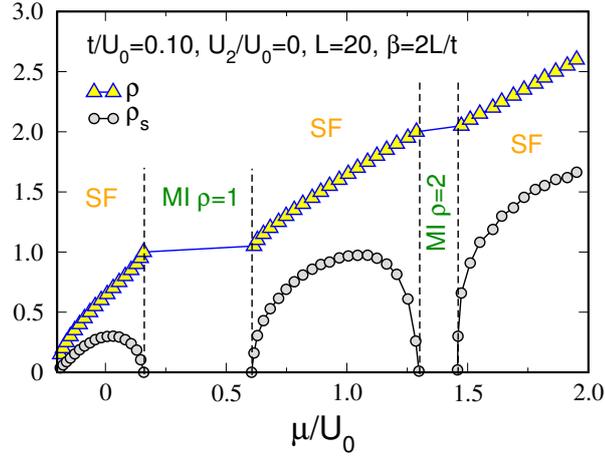


FIGURE 5.21 – Densité totale ρ et de la densité superfluide ρ_s en fonction du potentiel chimique $\mu = E(N + 1) - E(N)$ pour $U_2/U_0 = 0$ avec $L = 20$ et $\beta = 40/t$. Ces courbes correspondent à la coupe verticale du diagramme de phase Figure 5.20 représentée en trait discontinu situé en $t/U_0 = 0.10$ avec $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$. Les phases isolantes de Mott (MI) sont clairement identifiées par les deux plateaux de densité $\rho = \{1, 2\}$ avec une densité superfluide nulle $\rho_s = 0$. La phase superfluide (SF) est compressible $\partial\rho/\partial\mu \neq 0$ avec une densité superfluide non nulle $\rho_s \neq 0$. Aucune discontinuité n'est visible dans l'évolution de ces deux quantités: toutes les transitions sont du second ordre, en accord avec l'analyse en champ moyen.

Par conséquent, il convient de trouver un compromis entre le temps de calcul et une valeur de β suffisante pour atteindre la limite de température nulle. Afin de montrer que généralement $\beta = 2L/t$ suffit pour que les effets thermiques soient négligeables, nous présentons tout d'abord l'évolution de l'énergie interne par site E/L en fonction de β pour les phases de Mott $\rho = \{1, 2\}$ (cf. Figure 5.22). Nous rappelons que, à température nulle dans l'ensemble canonique, l'énergie interne permet d'obtenir le potentiel chimique $\mu = E(N + 1) - E(N)$ et intervient donc directement dans la détermination du diagramme de phase. D'où l'importance de cette quantité. Pour cela, nous choisissons de travailler dans l'ensemble canonique avec $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$ et trois tailles $L = \{20, 40, 60\}$. Nous pouvons voir sur la Figure 5.22 que les effets de taille finie, et de températures, peuvent être négligés pour $\beta t/L = 2$, sauf pour $\rho = 1$ avec $t/U_0 = 0.02$ où de faibles effets thermiques sont visibles. Bien que des effets thermiques soient visibles sur cette figure, à l'échelle des diagrammes de phase de la Figure 5.20 nous n'apercevons aucune différence entre les points obtenus pour $L = 20$ avec $\beta = 2L/t$ et $\beta = 5L/t$.

A priori, il est tout à fait surprenant que l'effet de la température intervienne dans cette limite de très forte interaction entre particules $U_0 \gg t$. Dans leur article de 2003, A. B. Kuklov et B. V. Svistunov [118] montrent que, pour un mélange 2D de bosons à deux états de spin sans conversion et pour la densité $\rho = 1$, le hamiltonien de Bose-Hubbard se réduit à un hamiltonien effectif de Heisenberg dans la limite de forte interaction $t/U_0 \rightarrow 0$. Dans notre cas, le terme de saut, le potentiel chimique et les interactions sont identiques pour les deux espèces. Le hamiltonien effectif à 1D prend donc la forme du hamiltonien de Heisenberg isotrope suivant

$$\mathcal{H} = J \sum_i \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1}, \quad (5.16)$$

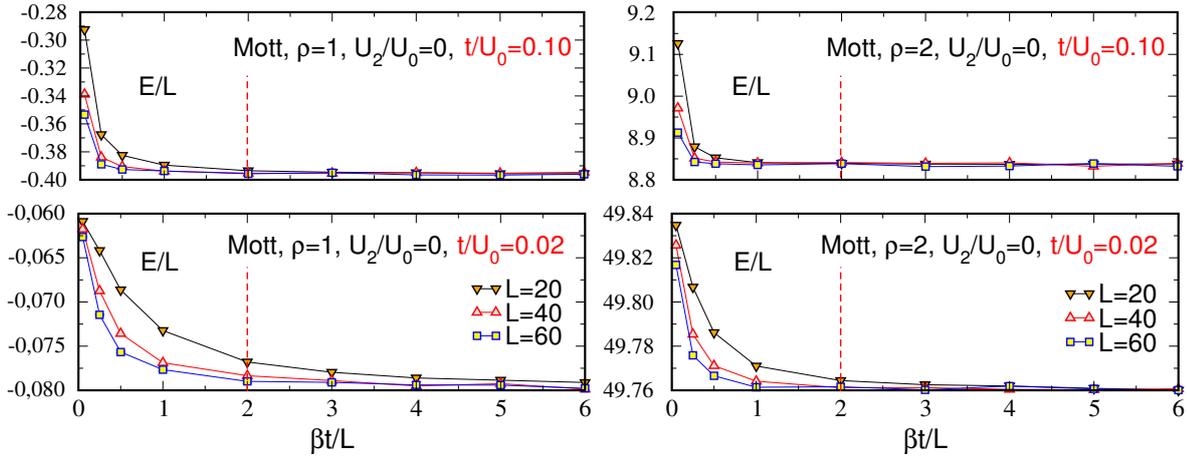


FIGURE 5.22 – Énergie par site E/L en fonction de l'inverse de la température β dans les phases de Mott $\rho = 1$ (à gauche) et $\rho = 2$ (à droite) pour trois différentes tailles avec $U_2/U_0 = 0$ et $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$. Les barres d'erreurs sont de la taille des symboles. Très profond dans les lobes, *i.e.* pour $t/U_0 = 0.02$ (graphes du bas), on observe de faibles effets de taille finie, ainsi que de faibles effets thermiques pour $\beta t/L = 2$ avec $\rho = 1$. Plus loin dans les lobes, *i.e.* pour $t/U_0 = 0.10$ (graphes du haut), les effets de taille finie, ainsi que des effets thermiques sont négligeables pour $\beta t/L = 2$ pour les deux densités.

où \hat{S}_i est l'opérateur de spin au site i défini à partir des matrices de Pauli et le couplage des spins vaut [119]

$$J = -\frac{4t^2}{U_0}. \quad (5.17)$$

Nous pouvons maintenant comprendre l'influence de la température dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$: lorsque t/U_0 diminue, la norme du couplage $|J|$ diminue aussi, introduisant une échelle d'énergie de plus en plus petite. À température fixée, les spins se découplent lorsque $k_B T \sim |J|$, permettant aux effets thermiques si faibles soient-ils devant t et U_0 d'avoir une influence sur la statistique. En conclusion, bien que $k_B T \ll t \ll U$, le système sera dans son état fondamental dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$ uniquement lorsque la relation $k_B T \ll t^2/U_0$ sera satisfaite.

Intéressons-nous maintenant à l'autre limite de t/U_0 du diagramme de phase, *i.e.* à la phase superfluide. Nous traçons sur la Figure 5.23 l'énergie par site E/L et la densité superfluide ρ_s en fonction de l'inverse de la température β dans la phase superfluide $\rho = 1$ (à gauche) et $\rho = 2$ (à droite) pour trois différentes tailles avec $U_2/U_0 = 0$ et $t/U_0 = 0.40$. Il est clair que la limite de température nulle est atteinte avec $\beta = 2L/t$ pour l'énergie par site et que les effets de taille finie sont négligeables. En ce qui concerne la densité superfluide ρ_s , la valeur $\beta = 2L/t$ est acceptable comme limite de température nulle.

Nous détaillons ci-dessous les propriétés des phases de Mott $\rho = 1$ et 2 et de la phase superfluide à température nulle pour ce cas simple sans conversion du spin avec comme état initial $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$.

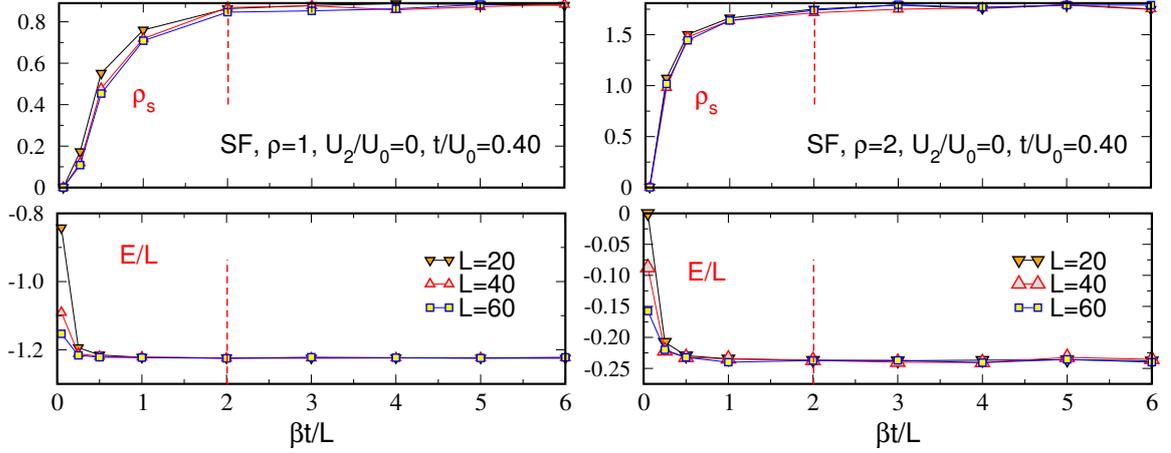


FIGURE 5.23 – Énergie par site E/L et densité superfluide ρ_s en fonction de l'inverse de la température β dans la phase superfluide $\rho = 1$ (à gauche) et $\rho = 2$ (à droite) pour trois différentes tailles avec $U_2/U_0 = 0$ et $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$. Les barres d'erreurs sont de la taille des symboles. Les effets de taille finie et les effets thermiques sont négligeables pour $\beta t/L = 2$ pour les deux densités.

Phase de Mott $\rho = 1$

Les simulations dans l'ensemble canonique conservent les densités initiales, soit $\rho_0 = \rho_\Lambda = 1/2$. Les corrélations densité-densité sur site valent $C_{00}(0) = C_{\Lambda\Lambda}(0) \gtrsim 0.5$ et $C_{0\Lambda}(0) \gtrsim 0$ dans tout le lobe, ce qui signifie qu'en moyenne il y a environ sur un site donné soit une particule 0, soit une particule Λ avec la même probabilité et presque jamais simultanément une particule 0 et une particule Λ sur le même site. Les corrélations spin-spin sur site valent $S_{xx}(0) = S_{yy}(0) = S_{zz}(0) \simeq 0.25$, soit $S^2(0) = S_{xx}(0) + S_{yy}(0) + S_{zz}(0) = (\rho/2)((\rho/2) + 1) \simeq 0.75$ et $\Delta S(0) \equiv S_{xx}(0) - [S_{yy}(0) + S_{zz}(0)] \simeq -0.25$. Ces résultats sur site sont en accord avec ceux du champ moyen et le système est équivalent à des spins-1/2 sur réseau. Il nous est possible d'effectuer une analyse plus approfondie de cette phase grâce aux fonctions de corrélations.

- Aucun ordre spatial n'existe: la valeur asymptotique des corrélations densité-densité est égale au produit des densités, soit $C_{00}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{0\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = (0.25 \pm 0.01) = \rho_0\rho_\Lambda$ (cf. Figure 5.24 à gauche). D'après les Eqs. (5.15), cela implique que $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq 0$: les corrélations spin-spin à longue portée suivant l'axe z sont donc nulles. D'après l'équation

$$\begin{aligned} S_{zz}(\mathbf{R}) &= \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^z \hat{S}_{\mathbf{r}}^z \rangle \\ &= \frac{1}{4L^d} \sum_{\mathbf{r}} \langle (\hat{n}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} - \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}}) (\hat{n}_{0\mathbf{r}} - \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}}) \rangle, \end{aligned} \quad (5.18)$$

l'absence de corrélations spin-spin à longue portée suivant l'axe z implique que les deux populations sont équilibrées, et réciproquement. Dans ce cas précis, sans conversion du spin, cet équilibre, dans les simulations canoniques, provient trivialement de l'état initial choisi, soit $\rho_0 = \rho_\Lambda = 1/2$.

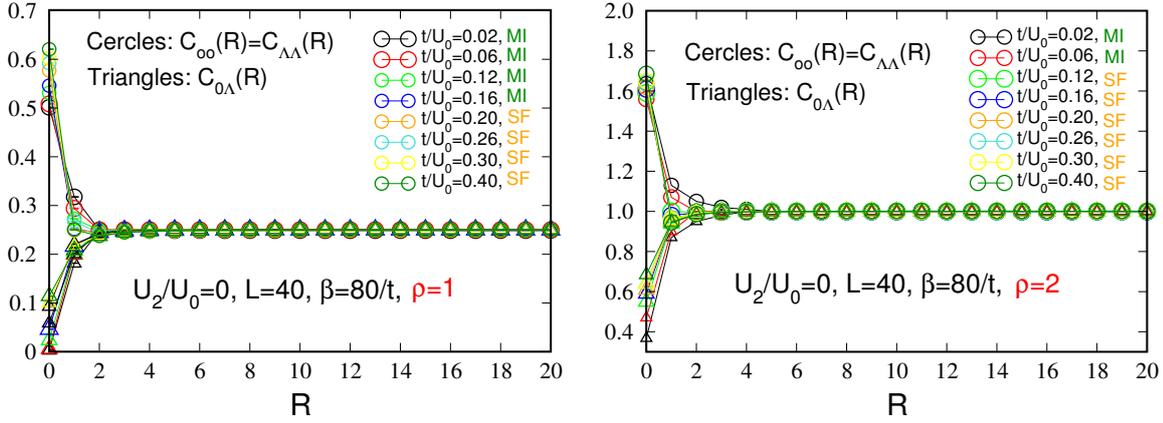


FIGURE 5.24 – Corrélations densité-densité pour des valeurs de t/U_0 faisant passer le système de la phase MI vers la phase superfluide avec $\rho = 1$ (à gauche) et $\rho = 2$ (à droite) pour $U_2/U_0 = 0$. Aucun ordre de densité à longue portée n'existe dans les deux phases: $C_{00}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{0\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0\rho_\Lambda$.

- Les fonctions de Green $G_0(\mathbf{R}) = G_\Lambda(\mathbf{R})$, $G_{00}(\mathbf{R}) = G_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R})$ et $G_{Corr}(\mathbf{R})$ décroissent exponentiellement (*cf.* Figure 5.25 en haut à gauche). Il n'existe pas de déplacements cohérents de particule seule, de paire de particules de la même espèce, ni de déplacements corrélés d'une paire de particules 0 et Λ . *A contrario*, il existe des mouvements anticorrélés d'une paire de particules 0 et Λ dûs au terme cinétique non nul ($t/U_0 \neq 0$) qui permet d'effectuer la permutation cohérente d'une particule 0 et d'une particule Λ situées sur deux sites voisins. La signature de ces déplacements est indiquée par la décroissance lente, probablement en loi de puissance, de la fonction de Green anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$. La taille des systèmes étudiables avec notre algorithme ne nous permet pas d'analyser numériquement cette décroissance.

Pour les systèmes de taille finie, cette décroissance lente, ainsi que la relation $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) = S_{xx}(\mathbf{R}) + S_{yy}(\mathbf{R})$ [Eq. (5.15)], indique qu'un quasi-ordre de spin à longue portée existe dans le plan xy . Le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg interdit à ce quasi-ordre de symétrie continue d'exister dans la limite thermodynamique. De plus, avec $U_2/U_0 = 0$, nous pouvons supposer que la valeur moyenne des opérateurs de conversions de spin $a_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger a_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}} a_{0\mathbf{r}}^\dagger a_{\Lambda\mathbf{r}}$ et $a_{\Lambda\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger a_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} a_{\Lambda\mathbf{r}}^\dagger a_{0\mathbf{r}}$ est nulle et que, par conséquent $S_{xx}(\mathbf{R}) = S_{yy}(\mathbf{R})$, $\forall \mathbf{R}$, d'après l'Eq. (5.14). Nous ne pouvons malheureusement pas calculer indépendamment $S_{xx}(\mathbf{R})$ et $S_{yy}(\mathbf{R})$ *via* les fonctions de Green disponibles dans le programme.

Cette phase de Mott, pour laquelle la densité superfluide est nulle, présente une autre propriété importante: une superfluidité anticorrélée existe. Dans la limite $t/U_0 = 0$, il existe deux états fondamentaux sur site: $|0\rangle$ et $|\Lambda\rangle$. Cette phase est donc très largement dégénérée. Lorsque $t/U_0 \neq 0$, tous les états dégénérés sont couplés par des contributions provenant du terme cinétique qui lève la dégénérescence en établissant une quasi cohérence de phase *via* des mouvements anticorrélés. Plus précisément, qu'un site soit occupé par une particule 0 ou Λ , l'énergie sur site est la même. Ainsi, quelle que soit la configuration du système global, permuter une particule 0 et une particule Λ situées sur deux sites voisins changera l'état du système sans changer l'énergie totale. Ce type de mouvements anticorrélés permet de minimiser l'énergie cinétique du hamiltonien.

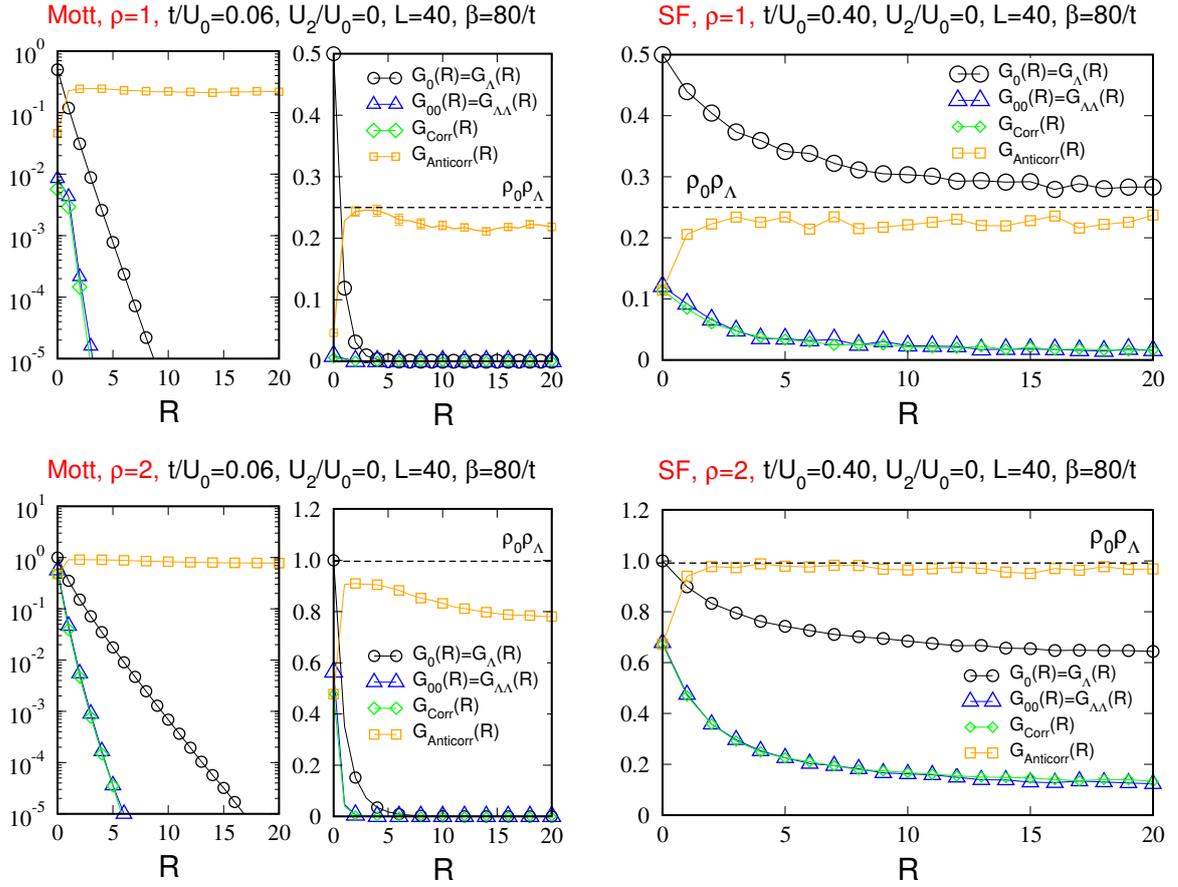


FIGURE 5.25 – Fonctions de Green $G_0(\mathbf{R})$, $G_\Lambda(\mathbf{R})$, $G_{00}(\mathbf{R})$, $G_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R})$, $G_{Corr}(\mathbf{R})$ et $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ en échelle semi-log et linéaire dans la phase de Mott avec $t/U_0 = 0.06$ (à gauche) et dans la phase superfluide avec $t/U_0 = 0.40$ (à droite) pour $\rho = 1$ (en haut) et $\rho = 2$ (en bas) avec $U_2/U_0 = 0$. Dans les deux phases de Mott (MI), les fonctions de Green décroissent exponentiellement, sauf $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ qui décroît lentement. Dans la phase superfluide, toutes les fonctions de Green décroissent en loi de puissance et $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \sim \rho_0 \rho_\Lambda$.

De tels mouvements dans la phase de Mott sont associés à une superfluidité, nommée « *Super-Counter-Fluidity* », initialement prédite pour un modèle similaire sans conversion du spin par A. B. Kuklov et B. V. Svistunov en 2003 [118]. Cette superfluidité a été observée plus récemment en 2010 avec la méthode de Monte Carlo quantique par B. Capogrosso-Sansone, S. G. Söyler, N. V. Prokof'ev et B. V. Svistunov [120]. La *Super-Counter-Fluidity*, ou « densité superfluide anticorrélée », correspondante est définie par

$$\rho_{scf} = \frac{\langle (W_0 - W_\Lambda)^2 \rangle}{2dt\beta L^{d-2}}. \quad (5.19)$$

Lorsqu'il existe des conversions du spin, il n'est pas possible de calculer ρ_{scf} car la quantité $\langle W_0 - W_\Lambda \rangle$ n'est pas une quantité topologique [117]. Cependant, lorsqu'il n'y a pas de conversion (*i.e.* $U_2 = 0$), cette quantité est bien une quantité topologique. Nous traçons l'évolution de ρ_{scf} en fonction de t/U_0 sur la Figure 5.26 en bas à gauche. Il est clair que ρ_{scf} est non nulle dans la

phase de Mott $\rho = 1$, alors même que $\rho_s = 0$ (cf. Figure 5.26 en haut à gauche). De plus, ρ_{scf} est sensible aux effets de taille finie et on observe clairement une différence dans le comportement des courbes pour $L = 20$ avec $\beta = 2L/t$ et $\beta = 5L/t$. Cette différence montre que la limite de la température nulle n'est pas atteinte pour cette quantité avec $\beta = 2L/t$, alors que cette différence n'est pas observée pour la densité superfluide ρ_s . Il est intéressant de noter le comportement linéaire de ρ_{scf} en fonction de t/U_0 dans le lobe MI $\rho = 1$ avec $\beta = 5L/t$.

Phase de Mott $\rho = 2$

Les densités initiales sont $\rho_0 = \rho_\Lambda = 1$. Les valeurs approximatives des corrélations densité-densité et spin-spin sur site mesurées dans toute la phase de Mott $\rho = 2$ sont indiquées par la dernière ligne du Tableau 5.6. Un quart des sites du système est composé de deux particules 0, un autre quart est composé de deux particules Λ et le reste des sites du système est composé d'une paire de particules 0 et Λ . L'analyse en champ moyen prédit qu'il existe trois états fondamentaux équiprobables ($|00\rangle, |0\Lambda\rangle, |\Lambda\Lambda\rangle$) et permet de prédire une valeur de $S^2(0)$ cohérente avec celle mesurée en MCQ, soit $S^2(0) = (\rho/2)((\rho/2) + 1) \simeq 2.0$.

Cependant, le détail des corrélations sur site n'est pas simplement la moyenne des quantités mesurées en champ moyen. L'état initial choisi pour la simulation en MCQ a sans doute changé le poids statistique des états $|00\rangle, |0\Lambda\rangle$ et $|\Lambda\Lambda\rangle$, afin que l'état $|0\Lambda\rangle$ soit deux fois plus probable que les deux autres. En effet, cette redistribution des poids statistiques permet de retrouver tous les résultats mesurés en MCQ. Par exemple, pour la première colonne, la quantité $C_{00}(0)_{\text{MCQ}}$ mesurée en Monte Carlo quantique est telle que $C_{00}(0)_{\text{MCQ}} \simeq (C_{00}(0)_{|00\rangle} + 2C_{00}(0)_{|0\Lambda\rangle} + C_{00}(0)_{|\Lambda\Lambda\rangle})/4 = (4 + 2 + 0)/4 = 1.5$.

	$C_{00}(0)$	$C_{0\Lambda}(0)$	$C_{\Lambda\Lambda}(0)$	$S_{xx}(0)$	$S_{yy}(0)$	$S_{zz}(0)$	$S^2(0)$	$\Delta S(0)$
CM $ 00\rangle$	4	0	0	0.5	0.5	1	2	-1
CM $ 0\Lambda\rangle$	1	1	1	1	1	0	2	0
CM $ \Lambda\Lambda\rangle$	0	0	4	0.5	0.5	1	2	-1
MCQ	$\gtrsim 1.5 > \rho_0^2$	$\sim 0.5 < \rho_0\rho_\Lambda$	$\gtrsim 1.5 > \rho_\Lambda^2$	~ 0.75	~ 0.75	~ 0.5	~ 2	~ -0.5

TABLE 5.6 – Valeurs des corrélations densité-densité et spin-spin sur site pour les trois états $|00\rangle, |0\Lambda\rangle$ et $|\Lambda\Lambda\rangle$ obtenus en champ moyen (CM) pour la phase de Mott $\rho = 2$ avec $U_2/U_0 = 0$. La quantité $S^2(0)$ est telle que $S^2(0) = S_{xx}(0) + S_{yy}(0) + S_{zz}(0)$ et $\Delta S(0) \equiv S_{xx}(0) - [S_{yy}(0) + S_{zz}(0)]$. La dernière ligne du tableau indique les résultats approximatifs mesurés avec la méthode de Monte Carlo quantique (MCQ) dans toute la phase de Mott $\rho = 2$. Lorsque $t/U_0 \rightarrow 0$, ces résultats sont égaux à la moyenne de ceux du champ moyen avec un poids double pour l'état $|0\Lambda\rangle$.

Concernant les fonctions de corrélations:

- de même qu'avec $\rho = 1$: aucun ordre spatial n'existe car $C_{00}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{0\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = (1.0 \pm 0.1) = \rho_0\rho_\Lambda$ (cf. Figure 5.24 à droite). Là encore, d'après l'Eq. (5.18), $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq 0$: les corrélations spin-spin à longue portée suivant l'axe z sont nulles;

- toutes les fonctions de Green décroissent exponentiellement à l'exception de $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ qui décroît lentement (*cf.* Figure 5.25 en bas à gauche). Comme dans la phase de Mott $\rho = 1$, lorsque $t/U_0 \neq 0$, tous les états dégénérés sont couplés par des contributions du second ordre provenant du terme de saut qui lève la dégénérescence en établissant une quasi cohérence de phase *via* des mouvements anticorrélés. Plus précisément, qu'un site soit occupé par deux particules 0 ou Λ ou un couple de particules 0 et Λ , l'énergie sur site est la même. Ainsi, quelle que soit la configuration du système, permuter une particule 0 et une particule Λ situées sur deux sites voisins changera l'état du système sans changer l'énergie totale. Cet effet est illustré sur la Figure 5.32 pour le cas $U_2/U_0 < 0$. D'après les arguments évoqués pour la phase de Mott $\rho = 1$, cet effet équivaut à l'existence d'un quasi-ordre de spin à longue portée dans le plan xy . Avec $U_2/U_0 = 0$, les termes de conversion ne jouant aucun rôle, l'Eq. (5.14) donne $S_{xx}(\mathbf{R}) = S_{yy}(\mathbf{R}), \forall \mathbf{R}$.

Les mouvements cohérents anticorrélés sont, dans cette phase aussi, à l'origine d'une superfluidité anticorrélée. La superfluidité anticorrélée ρ_{scf} est tracée, pour $\rho = 2$, en fonction de t/U_0 sur la Figure 5.26 en bas à droite. Pour une taille donnée, nous voyons nettement que ρ_{scf} est non nulle dans la phase de Mott $\rho = 2$, alors que simultanément $\rho_s = 0$ dans cette phase (*cf.* Figure 5.26 en haut à droite). À la différence du cas $\rho = 1$, la quantité ρ_{scf} est insensible aux effets de taille finie et une faible différence existe pour $L = 20$ avec $\beta = 2L/t$ et $\beta = 5L/t$ seulement dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$. La limite de la température nulle est donc raisonnablement atteinte avec $\beta = 2L/t$. Ceci est aussi vrai pour ρ_s , bien que ρ_s soit sensible aux effets de taille finie. Notons, là encore, que ρ_{scf} évolue linéairement avec t/U_0 dans toute la phase de Mott $\rho = 2$.

Phase superfluide

La densité superfluide ρ_s et la compressibilité locale $\tilde{\kappa}$ sont non nulles. De façon générale, les corrélations densité-densité sur site sont telles que $C_{00}(0) = C_{\Lambda\Lambda}(0) > \rho_0^2$ et $C_{0\Lambda}(0) < \rho_0\rho_\Lambda$ quelle que soit la densité totale. Concernant les fonctions de corrélations:

- il n'existe aucun ordre de densité à longue portée, soit aucune corrélation spin-spin suivant l'axe z (*cf.* Figure 5.24 à gauche et à droite);
- les fonctions de Green individuelles décroissent en loi de puissance (*cf.* Figure 5.25 à droite en haut et en bas) et sont égales $G_0(\mathbf{R}) = G_\Lambda(\mathbf{R}), \forall \mathbf{R}$, lorsque les populations initiales sont équilibrées $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$. De plus, les fonctions de Green de paires $G_{00}(\mathbf{R}) = G_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R}) \simeq G_{Corr}(\mathbf{R})$ décroissent aussi en loi de puissance et $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ semble rapidement saturer vers une valeur approximativement égale à $\rho_0\rho_\Lambda$. Tous les mouvements sont cohérents. De plus, les mouvements anticorrélés, présents dans les phases de Mott, restent les mouvements dominants et présentent une parfaite cohérence pour les tailles étudiées car $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \sim \rho_0\rho_\Lambda$. Le plateau de $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) = S_{xx}(\mathbf{R}) + S_{yy}(\mathbf{R})$ indique qu'un quasi-ordre de spin à longue portée existe dans le plan xy . Là encore, le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg interdit à ce quasi-ordre de symétrie continue d'exister dans la limite thermodynamique. Cet argument théorique nous permet de penser que $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ va décroître en loi de puissance dans cette limite. Là encore, avec $U_2/U_0 = 0$, l'Eq. (5.14) donne $S_{xx}(\mathbf{R}) = S_{yy}(\mathbf{R}), \forall \mathbf{R}$.

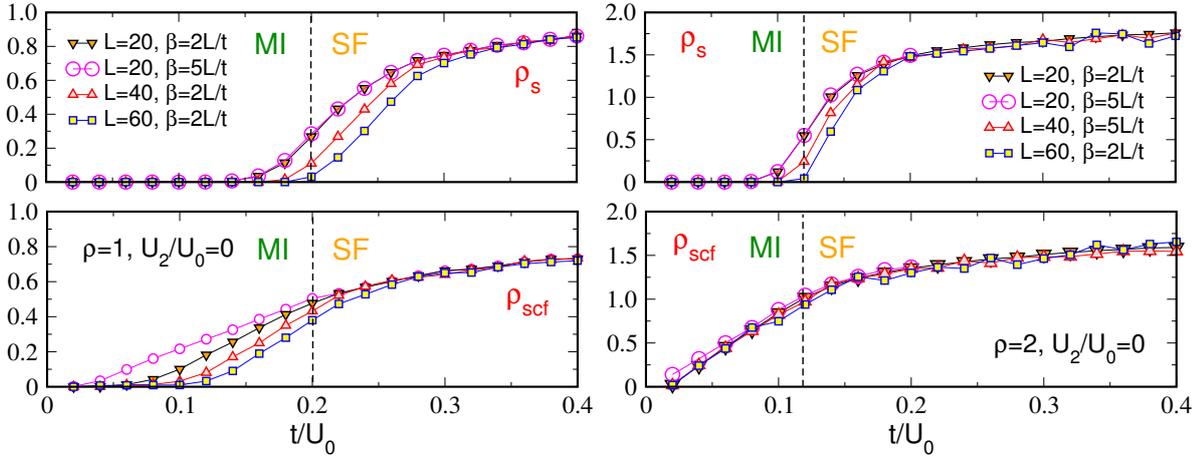


FIGURE 5.26 – Densité superfluide ρ_s (en haut) et densité superfluide anticorrélée ρ_{scf} (en bas) en fonction de t/U_0 lors de la transition MI-superfluide pour les densités constantes $\rho = 1$ (à gauche) et $\rho = 2$ (à droite) avec $U_2/U_0 = 0$ pour trois différentes tailles. Notons que $\rho_{scf} \neq 0$, alors que simultanément $\rho_s = 0$ dans les deux phases de Mott. Pour $\rho = 1$, les effets de taille finie sont notables pour ces deux quantités et des effets thermiques sont visibles pour ρ_{scf} avec $\beta = 2L/t$. Pour $\rho = 2$, les effets de taille finie sont plus faibles pour ρ_s et négligeables pour ρ_{scf} . De très faibles effets thermiques sont visibles pour ρ_{scf} avec $\beta = 2L/t$ dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$. Ces transitions sont de la classe d’universalité de Kosterlitz-Thouless.

Transitions de phases

La Figure 5.21 représente l’évolution de la densité totale ρ et de la densité superfluide ρ_s lorsque le potentiel chimique μ/U_0 augmente. Cette coupe verticale est représentée sur le diagramme de phase de la Figure 5.20 à droite par la ligne verticale en trait discontinu. Cette coupe traverse les lobes MI $\rho = \{1, 2\}$ du diagramme de phase, ainsi que la région superfluide qui les sépare. La densité totale ρ et la densité superfluide ρ_s évoluent continûment: toutes les transitions sont du second ordre. Ce résultat est cohérent avec l’analyse en champ moyen.

La Figure 5.26 montre l’évolution de ρ_s et de ρ_{scf} en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = \{1, 2\}$ dans l’ensemble canonique. Selon la théorie [66], ces transitions sont de la classe d’universalité de Kosterlitz-Thouless, à l’inverse du champ moyen qui prédit uniquement des transitions du second ordre, et nous pouvons voir que le système est entièrement superfluide lorsque $t/U_0 \rightarrow \infty$ car $\rho_s \rightarrow \rho$.

Ce premier cas sans conversion donne une idée de base de la physique du système de bosons de spin-1/2 et nous a permis d’introduire les quantités importantes mesurées avec la méthode de Monte Carlo quantique. Une particularité intéressante de ce cas simple est que toutes les phases présentent des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules 0 et Λ . À ces mouvements est associée une densité superfluide anticorrélée ρ_{scf} non nulle, même dans les phases de Mott pour lesquelles $\rho_s = 0$. De tels mouvements correspondent à un quasi-ordre de spin à longue portée dans le plan xy .

5.2.3 Mélange avec conversions du spin : $U_2/U_0 < 0$

Le diagramme de phase est obtenu de la même façon qu'avec $U_2/U_0 = 0$. Afin de considérer les effets de taille finie et de température, nous effectuons des coupes dans le diagramme de phase pour les tailles $L = \{20, 40, 60\}$ avec $\beta = 2L/t$ et $\beta = 5L/t$ pour $L = 20$.

Le diagramme de phase avec $U_2/U_0 = -0.1$ est présenté sur la Figure 5.27. Nous traçons en pointillés le diagramme de phase obtenu en champ moyen (*cf.* Figure 5.5) afin de comparer directement les résultats des deux méthodes. La délimitation des phases de Mott (MI) et de la phase superfluide est peu affectée par les effets de taille finie. De plus, aucune différence n'est visible entre les courbes pour $L = 20$ avec $\beta = 2L/t$ et $\beta = 5L/t$.

- Lorsque $t/U_0 = 0$, le système adopte une phase MI avec ρ bosons par site lorsque le potentiel chimique μ satisfait la condition $(\rho - 1)(1 - |U_2|/U_0) < \mu/U_0 < \rho(1 - |U_2|/U_0)$. La largeur des lobes de la phase MI vaut $\Delta\mu/U_0 = 1 - |U_2|/U_0$, soit $\Delta\mu/U_0 = 0.9$ dans le cas $U_2/U_0 = -0.1$.
- Lorsque $t/U_0 \neq 0$, les deux diagrammes sont très différents: pour la même densité, les extrémités des lobes diffèrent d'un facteur 2.7 et leurs formes sont différentes. De plus, selon le champ moyen, toutes les transitions sont du second ordre. Les transitions de phases en MCQ sont toutes du second ordre, excepté à l'extrémité des lobes MI où la décroissance exponentielle des lobes et les arguments théorique de *scaling* [66] indiquent que les transitions sont de la classe d'universalité de Kosterlitz-Thouless.

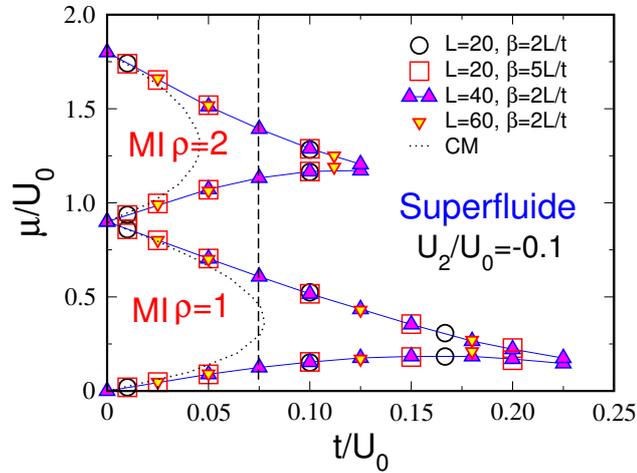


FIGURE 5.27 – Diagramme de phase en Monte Carlo quantique (MCQ) avec $U_2/U_0 = -0.1$ et diagramme de phase en champ moyen (CM) en pointillés (*cf.* Figure 5.5). Lorsque $t/U_0 = 0$, la largeur des lobes vaut $\Delta\mu/U_0 = 1 - |U_2|/U_0 = 0.9$. Le diagramme de phase en CM présente des lobes arrondis alors qu'en MCQ ceux-ci sont pointus. Ce comportement met clairement en évidence la décroissance exponentielle du saut de l'énergie caractéristique de la classe d'universalité de Kosterlitz-Thouless. Dans toutes les phases de ce diagramme les populations de spins 0 et Λ sont équilibrées: $P(\rho_0) = P(\rho_\Lambda)$ et $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$. La ligne verticale en trait discontinu correspond à la coupe de la Figure 5.33.

Phase de Mott $\rho = 1$

Les populations de spins 0 et Λ sont équilibrées: les distributions de densités $P(\rho_0) = P(\rho_\Lambda)$ sont centrées en $\rho_0 = \rho_\Lambda = 1/2$ et les densités moyennes sont égales $\rho_0 = \rho_\Lambda \simeq 1/2$ (cf. Figure 5.28). Les corrélations densité-densité et spin-spin sur site obtenues en champ moyen et en Monte Carlo quantique sont résumées dans le Tableau 5.7. Lorsque $t/U_0 \rightarrow 0$, les quantités sur site sont égales à la moyenne de celles données par le champ moyen et sont donc en accord avec cette méthode.

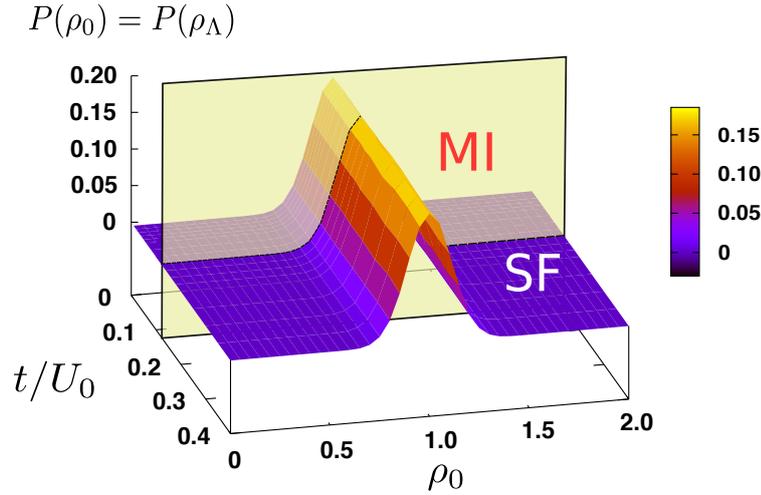


FIGURE 5.28 – Histogramme des densités des particules 0 en fonction de t/U_0 pour la transition MI-superfluide avec la densité totale $\rho = 2$ et le rapport $U_2/U_0 = -0.1$ pour $L = 40$ et $\beta = 80/t$. Pour $t/U_0 \in [0, 0.125]$, le système est dans la phase de Mott et lorsque $t/U_0 > 0.125$ le système est superfluide. L'allure de cet histogramme est la même dans les deux phases et n'est pas affectée par la transition. Les histogrammes des deux espèces 0 et Λ sont identiques et centrés en $\rho_0 = \rho/2 = 1$. Le même comportement est observé avec $\rho = 1$: les histogrammes des deux espèces 0 et Λ sont identiques et centrés en $\rho_0 = \rho/2 = 0.5$.

Concernant les fonctions de corrélations:

- aucune corrélation densité-densité n'existe et les fonctions de corrélation densité-densité sont égales entre elles en $\mathbf{R} = \mathbf{L}/2$ (cf. Figure 5.29 à gauche). De façon équivalente, les corrélations spin-spin à longue portée suivant l'axe z sont nulles ;
- les fonctions de Green décroissent exponentiellement, sauf $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ qui atteint rapidement un plateau tel que $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) \simeq \rho_0 \rho_\Lambda \simeq 0.25$ dans tout le lobe $\rho = 1$ (Figure 5.30). Des permutations cohérentes d'une particule 0 et d'une particule Λ sont aussi présentes dans cette phase: le terme cinétique couple tous les états dégénérés de cette phase existant dans la limite $t/U_0 = 0$ et lève sa dégénérescence en établissant une quasi-cohérence de phase *via* des mouvements anticorrélés. De plus, la relation $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) = S_{xx}(\mathbf{R}) + S_{yy}(\mathbf{R})$ nous permet de supposer qu'un ordre, ou quasi-ordre, magnétique s'établit dans le plan xy . Le hamiltonien effectif suivant va nous permettre de mieux comprendre ce phénomène.

	$C_{00}(0)$	$C_{0\Lambda}(0)$	$C_{\Lambda\Lambda}(0)$	$S_{xx}(0)$	$S_{yy}(0)$	$S_{zz}(0)$	$S^2(0)$	$\Delta S(0)$
CM $ 0\rangle$	1	0	0	0.25	0.25	0.25	0.75	-0.25
CM $ \Lambda\rangle$	0	0	1	0.25	0.25	0.25	0.75	-0.25
MCQ	$\gtrsim 0.5 > \rho_0^2$	$\gtrsim 0 < \rho_0\rho_\Lambda$	$\gtrsim 0.5 > \rho_\Lambda^2$	~ 0.25	~ 0.25	~ 0.25	~ 0.75	~ -0.25

TABLE 5.7 – Corrélations densité-densité et spin-spin sur site pour les états $|0\rangle$ et $|\Lambda\rangle$ obtenus en champ moyen (CM) pour la phase de Mott $\rho = 1$ avec $U_2/U_0 = -0.1$. La dernière ligne du tableau indique les résultats approximatifs mesurés avec la méthode de Monte Carlo quantique (MCQ) dans toute la phase de Mott $\rho = 1$. Lorsque $t/U_0 \rightarrow 0$, ces résultats sont égaux à la moyenne de ceux du champ moyen.

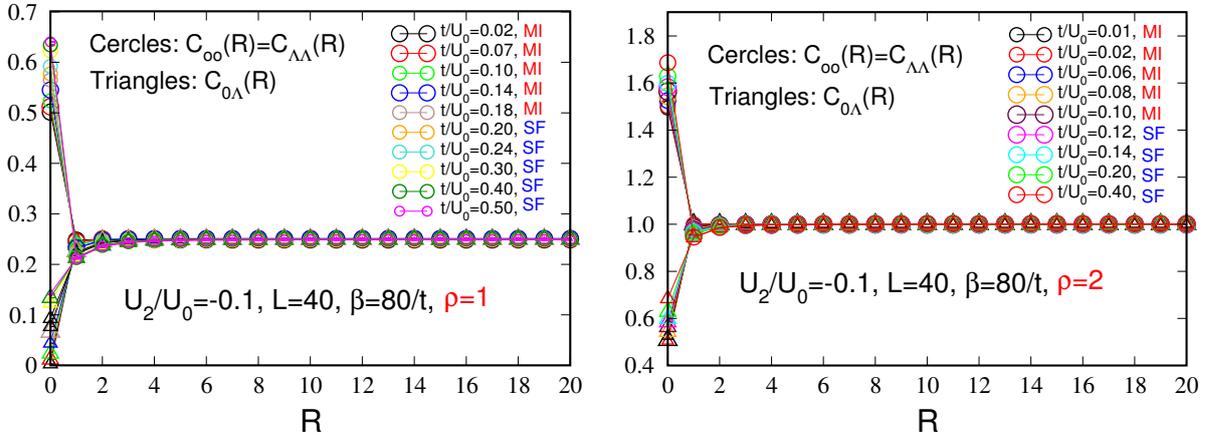


FIGURE 5.29 – Corrélations densité-densité pour des valeurs de t/U_0 faisant passer le système de la phase MI vers la phase superfluide avec $\rho = 1$ (à gauche) et $\rho = 2$ (à droite) pour $U_2/U_0 = -0.1$. Aucun ordre de densité à longue portée n'existe dans les deux phases: $C_{00}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{0\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0\rho_\Lambda$.

◦ *Hamiltonien effectif*: dans la phase de Mott $\rho = 1$ dans la limite de fortes interactions $U_0 \gg t$, le hamiltonien $\mathcal{H}_{spin1/2}$ se réduit à un hamiltonien effectif de Heisenberg anisotrope. Cet hamiltonien effectif est de la forme:

$$\mathcal{H}_{eff} = J_x \sum_i \hat{\mathbf{S}}_i^x \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1}^x + J_y \sum_i \hat{\mathbf{S}}_i^y \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1}^y + J_z \sum_i \hat{\mathbf{S}}_i^z \cdot \hat{\mathbf{S}}_{i+1}^z, \quad (5.20)$$

où $\hat{\mathbf{S}}_i^\alpha$ est l'opérateur de spin suivant l'axe $\alpha = \{x, y, z\}$ sur le site i défini à partir des matrices de Pauli. Les couplages des spins valent

$$\begin{aligned} J_x &= -\frac{4t^2}{U_0} \left(\frac{1 - 3U_2/U_0}{1 - U_2^2/U_0^2} \right) \\ J_y = J_z &= -\frac{4t^2}{U_0} \left(\frac{1 + U_2/U_0}{1 - U_2^2/U_0^2} \right) \end{aligned} \quad (5.21)$$

Lorsque $U_2/U_0 \in]-1, 0[$, ces couplages sont toujours négatifs et sont tels que $|J_y| = |J_z| < |J_x|$. Le système, équivalent à des spins-1/2 sur réseau, va adopter un ordre ferromagnétique de sy-

métrie discrète, de type Ising, le long de l'axe x . Les corrélations spin-spin suivant l'axe x vont donc dominer et un ordre de spin à longue portée (LRO) de symétrie discrète va s'établir dans la limite thermodynamique. De plus, selon l'Eq. (5.18), l'absence de corrélation spin-spin suivant l'axe z implique que les histogrammes sont égaux et centrés en $\rho_0 = \rho_\Lambda = 0.5$. Ceci est bien conforme à nos mesures discutées et présentées sur la Figure 5.28.

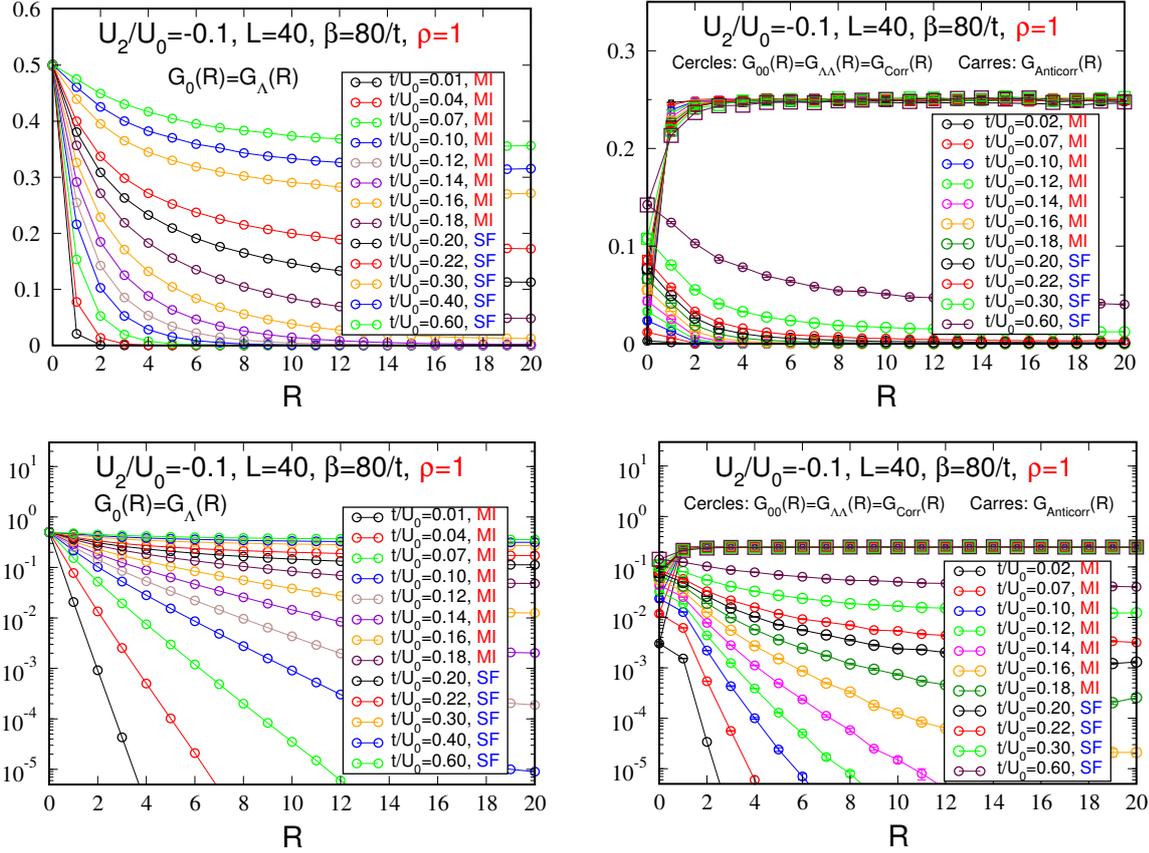


FIGURE 5.30 – Fonctions de Green individuelles (à gauche) et de paires (à droite) en échelle linéaire (en haut) et semi-log (en bas) pour des valeurs de t/U_0 faisant passer le système de la phase MI vers la phase superfluide avec $\rho = 1$ et $U_2/U_0 = -0.1$. Les fonctions de Green $G_0(\mathbf{R}) = G_\Lambda(\mathbf{R})$ et $G_{00}(\mathbf{R}) = G_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R}) \simeq G_{Corr}(\mathbf{R})$ passent progressivement d'une décroissance exponentielle, dans la phase MI, à une décroissance en loi de puissance dans la phase superfluide. *A contrario*, $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ sature rapidement vers la valeur $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0\rho_\Lambda \simeq 0.25$ dans les deux phases, signe que des mouvements parfaitement cohérents anticorrélés existent.

Phase de Mott $\rho = 2$

Cette phase est qualitativement similaire à la précédente:

- les deux populations sont équilibrées: les histogrammes $P(\rho_0) = P(\rho_\Lambda)$ sont centrés en $\rho_0 = \rho_\Lambda = 1$ et les densités moyennes valent $\rho_0 = \rho_\Lambda = 1$ (cf. Figure 5.28);

- lorsque $t/U_0 \rightarrow 0$, les corrélations densité-densité et spin-spin sur site, résumées dans le Tableau 5.8, sont égales à la moyenne de celles données par le champ moyen ;
- aucun ordre de densité à longue portée n'existe (*cf.* Figure 5.29 à droite). De façon équivalente, il n'existe aucune corrélation spin-spin suivant l'axe z .
- les fonctions de Green décroissent exponentiellement, à l'exception de $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ qui sature rapidement vers la valeur $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0\rho_\Lambda = 1$ (Figure 5.31). Des permutations cohérentes d'une particule 0 et d'une particule Λ sont aussi présentes dans cette phase: le terme cinétique couple tous les états dégénérés de cette phase et lève sa dégénérescence en établissant une cohérence de phase *via* des mouvements anticorrélés.

	$C_{00}(0)$	$C_{0\Lambda}(0)$	$C_{\Lambda\Lambda}(0)$	$S_{xx}(0)$	$S_{yy}(0)$	$S_{zz}(0)$	$S^2(0)$	$\Delta S(0)$
CM $ \varphi_1\rangle$	1	1	1	1	1	0	2	0
CM $ \varphi_2\rangle$	2	0	2	1	0	1	2	0
MCQ	$\gtrsim 1.5 > \rho_0^2$	$\gtrsim 0.5 < \rho_0\rho_\Lambda$	$\gtrsim 1.5 > \rho_\Lambda^2$	~ 1.0	~ 0.5	~ 0.5	~ 2	~ 0

TABLE 5.8 – Corrélations densité-densité et spin-spin sur site pour les états $|\varphi_1\rangle = |0\Lambda\rangle$ et $|\varphi_2\rangle = (|00\rangle + |\Lambda\Lambda\rangle)/\sqrt{2}$ obtenus en champ moyen pour la phase de Mott $\rho = 2$ avec $U_2/U_0 = -0.1$. La dernière ligne du tableau indique les résultats approximatifs mesurés avec la méthode de Monte Carlo quantique dans toute la phase de Mott $\rho = 2$. Lorsque $t/U_0 \rightarrow 0$, ces résultats sont égaux à la moyenne de ceux du champ moyen.

Pour cette phase, M. Foss-Feig et A. M. Rey démontrent ¹ que $S_{yy}(\mathbf{R}) = 0, \forall \mathbf{R} \neq \mathbf{0}$. Par conséquent, seules les corrélations spin-spin suivant l'axe x existent et $S_{xx}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0\rho_\Lambda \simeq 1$. Un ordre magnétique à longue portée suivant l'axe x , de symétrie discrète de type Ising, va donc s'établir dans la limite thermodynamique.

En résumé, les phases isolantes de Mott présentent un équilibre des deux populations de bosons. Les résultats sur site sont cohérents avec ceux obtenus en champ moyen. De plus, aucun ordre spatial de densité à longue portée n'est observé dans le système, mais des mouvements anticorrélés de paires de particules 0 et Λ sont présents dans ces deux phases. Ces résultats se généralisent pour $U_2/U_0 \in]-1, 0[$ et nous représentons schématiquement ces deux phases sur la Figure 5.32. À la différence du cas $U_2/U_0 = 0$, un ordre magnétique à longue portée suivant l'axe x , de symétrie discrète de type Ising, apparaît.

Phase superfluide

Les deux populations sont équilibrées et les densités moyennes sont telles que $\rho_0 \simeq \rho_\Lambda \simeq \rho/2$ (*cf.* Figure 5.28 pour $\rho = 2$). La différence $\Delta S(0) = S_{xx}(0) - [S_{yy}(0) + S_{zz}(0)]$ prend sa valeur *maximale* en favorisant un ordre de spin sur site suivant l'axe x tel que $S_{xx}(0) \geq S_{yy}(0) = S_{zz}(0)$. Ces résultats sont cohérents avec ceux du champ moyen. L'équilibre des populations est équivalent à l'absence de corrélation densité-densité et donc de corrélation spin-spin à longue portée

1. Communication privée.

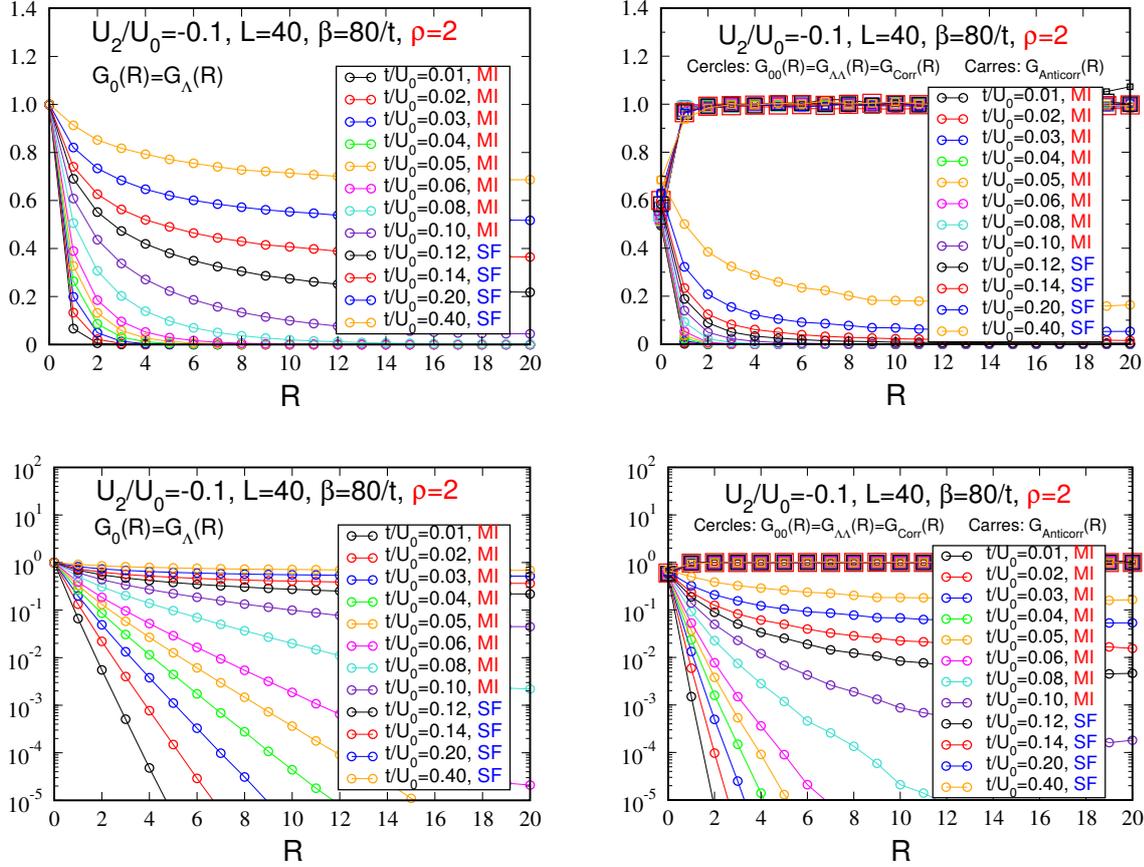


FIGURE 5.31 – Fonctions de Green individuelles (à gauche) et de paires (à droite) en échelle linéaire (en haut) et semi-log (en bas) pour des valeurs de t/U_0 faisant passer le système de la phase MI vers la phase superfluide avec $\rho = 2$ et $U_2/U_0 = -0.1$. Les fonctions de Green $G_0(\mathbf{R}) = G_\Lambda(\mathbf{R})$ et $G_{00}(\mathbf{R}) = G_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R}) \simeq G_{Corr}(\mathbf{R})$ passent progressivement d’une décroissance exponentielle, dans la phase MI, à une décroissance en loi de puissance dans la phase superfluide. *A contrario*, $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ sature rapidement vers la valeur $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0 \rho_\Lambda \simeq 1$ dans les deux phases, signe que des mouvements parfaitement cohérents anticorrélés existent. Mêmes résultats qualitatifs que ceux du cas $\rho = 1$ (Figure 5.30).

suivant l’axe z (cf. Figure 5.29). Toutes les fonctions de Green décroissent en loi de puissance, excepté $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ qui sature rapidement vers la valeur $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) \simeq \rho_0 \rho_\Lambda \simeq 1$: tous les mouvements sont quasi cohérents et les mouvements anticorrélés restent dominants. Bien qu’il nous soit impossible de discuter indépendamment les corrélations spin-spin $S_{xx}(\mathbf{R})$ et $S_{yy}(\mathbf{R})$, l’invariance par transposition des opérateurs $(\hat{S}_\mathbf{r}^y)^2$ et $(\hat{S}_\mathbf{r}^z)^2$ du hamiltonien $\mathcal{H}_{spin^{1/2}}$ [Eq. (3.26)] laisse supposer que $S_{yy}(\mathbf{R}) = S_{zz}(\mathbf{R}) = 0$, $\forall \mathbf{R} \neq \mathbf{0}$. Dans ce cas, le plateau de $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ correspond, comme dans les phases de Mott, à un ordre ferromagnétique à longue portée de symétrie discrète suivant l’axe x .

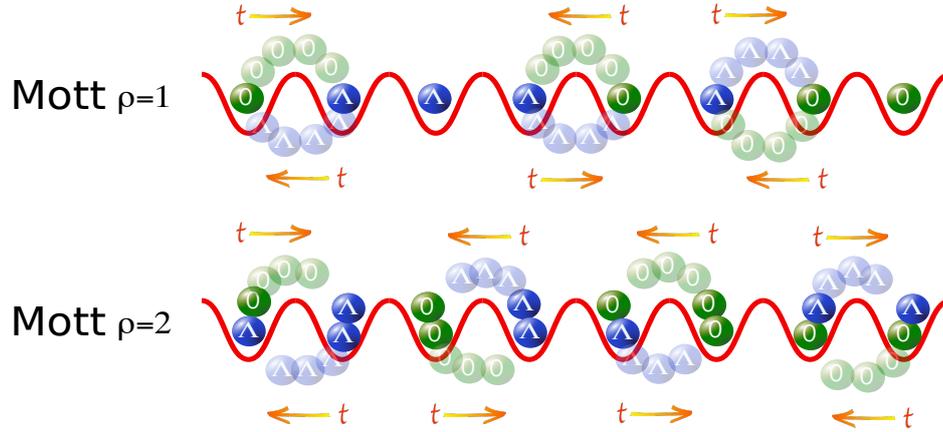


FIGURE 5.32 – Représentation des phases de Mott $\rho = 1$ et $\rho = 2$ pour $U_2/U_0 \in]-1, 0[$ sur un réseau optique 1D sinusoïdal représenté en rouge. Il existe dans ces deux phases des mouvements anticorrélés parfaitement cohérents d’une particule 0 et d’une particule Λ , déplacements minimisant l’énergie cinétique du système. La signature de ces mouvements est le plateau de la fonction de Green anticorrélée tel que $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0\rho_\Lambda$. Les états avant et après les sauts ont la même énergie.

Transitions de phases

La Figure 5.33 montre l’évolution des densités ρ_0 et ρ_Λ , de la densité totale ρ et de la densité superfluide ρ_s en fonction de μ/U_0 . Cette coupe verticale, représentée par la ligne verticale en trait discontinu sur la Figure 5.27, coupe les lobes MI $\rho = 1$ et $\rho = 2$ du diagramme de phase (plateaux de densité entière), ainsi que la région superfluide qui les sépare. Tout le long de cette coupe, les deux populations sont équilibrées. Aucune discontinuité n’est visible dans l’évolution de ρ et de ρ_s : toutes les transitions sont du second ordre, en accord avec l’analyse en champ moyen.

À l’instar du cas précédent sans conversion du spin, il est intéressant d’effectuer des coupes horizontales du diagramme de phase pour des valeurs entières de la densité. La Figure 5.34 présente ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = 1$ et $\rho = 2$. L’évolution de ρ_s est continue et le système est entièrement superfluide lorsque $t/U_0 \rightarrow \infty$ car $\rho_s \rightarrow \rho$. La décroissance exponentielle des lobes MI du diagramme de phase de la Figure 5.27 ainsi que des arguments théoriques de *scaling* [66] indiquent que les transitions au bout des lobes sont de la classe d’universalité de Kosterlitz-Thouless. Ce comportement est donc le même que celui observé avec $U_2/U_0 = 0$.

Nous pouvons conclure que les renseignements apportés par le champ moyen sur les quantités locales des phases sont en accord qualitatif avec la méthode de Monte Carlo quantique. Cependant, le champ moyen, indépendant de la dimension du système, décrit mal les transitions de phases à densité fixée. D’autre part, les fonctions de corrélations, accessibles avec la méthode de Monte Carlo quantique, apportent des renseignements supplémentaires importants: des mouvements parfaitement cohérents anticorrélés de paires de particules 0 et Λ existent dans toutes les phases. Ces mouvements sont associés à un ordre magnétique à longue portée suivant l’axe x dans les phases de Mott. Par ailleurs, l’absence d’ordre de densité, équivalente à l’absence

d'ordre de spin suivant l'axe z , impose un équilibre des populations dans toutes les phases, soit $P(\rho_0) = P(\rho_\Lambda)$ et $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$. Nous abordons maintenant le cas $U_2/U_0 > 0$ en suivant la même procédure.

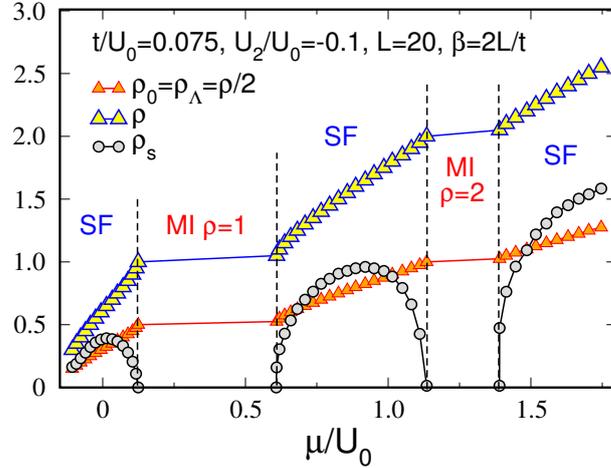


FIGURE 5.33 – Évolution des densités ρ_0 , ρ_Λ , ρ et de la densité superfluide ρ_s en fonction du potentiel chimique μ/U_0 pour $U_2/U_0 = -0.1$. Ces courbes correspondent à la coupe verticale du diagramme de phase Figure 5.27 en trait discontinu. Les deux populations sont équilibrées dans toutes les phases et aucune discontinuité n'est observée, les transitions sont du second ordre.

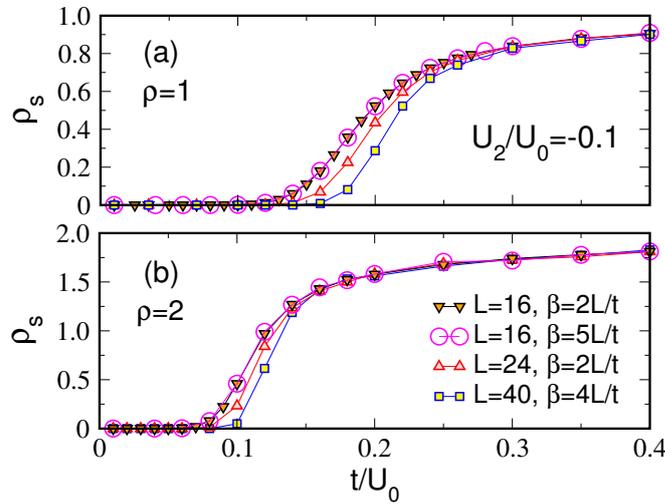


FIGURE 5.34 – Densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 lors de la transition Mott-superfluide pour les densités constantes $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec $U_2/U_0 = -0.1$ pour trois tailles différentes. Les courbes pour $L = 16$ avec $\beta = 2L/t$ et $\beta = 5L/t$ se superposent: la limite de température nulle est donc bien satisfaite pour ρ_s avec $\beta = 2L/t$. Cependant, la densité superfluide ρ_s est sensible aux effets de taille finie. Ces transitions sont de la classe d'universalité de Kosterlitz-Thouless.

5.2.4 Mélange avec conversions du spin : $U_2/U_0 > 0$

Nous présentons le diagramme de phase avec $U_2/U_0 = 0.1$ et $U_2/U_0 = 1.0$ sur la Figure 5.35. Le diagramme de phase en champ moyen est tracé en pointillés afin de comparer directement les résultats des deux méthodes.

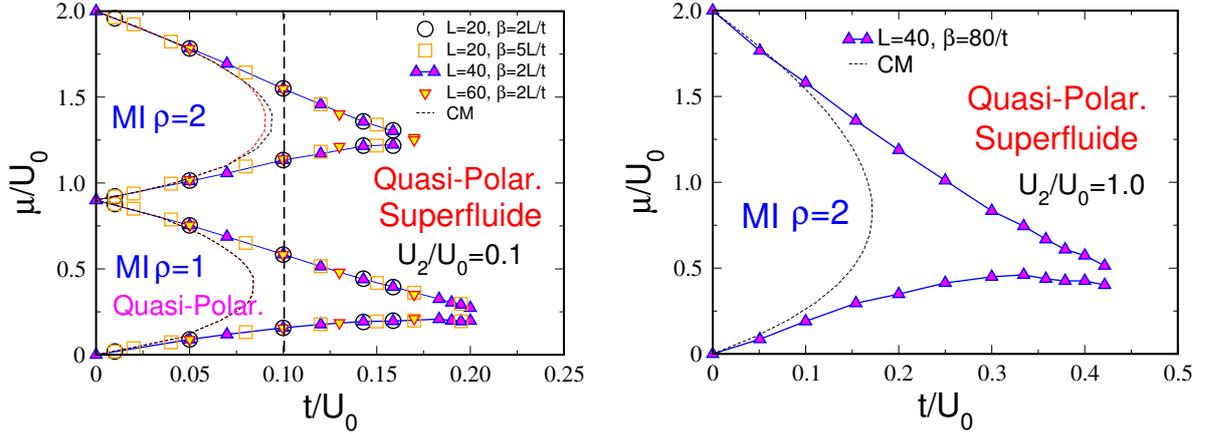


FIGURE 5.35 – Diagrammes de phases avec conversions du spin en Monte Carlo quantique et en champ moyen en pointillés avec $U_2/U_0 = 0.1$ (à gauche) et $U_2/U_0 = 1.0$ (à droite) (cf. Figure 5.11 et Figure 5.14). Les diagrammes de phase en Monte Carlo quantique présentent des lobes MI pointus, ce qui est la caractéristique de la classe d’universalité de Kosterlitz-Thouless du modèle XY bidimensionnel [66]. Pour $U_2/U_0 = 0.1$: la phase superfluide et la phase de Mott $\rho = 1$ sont quasi-polarisées. La phase de Mott $\rho = 2$ est non dégénérée et les deux populations sont équilibrées: les histogrammes $P(\rho_0) = P(\rho_\Lambda)$ sont centrés. La ligne verticale en trait discontinu correspond à la coupe de la Figure 5.45. Pour $U_2/U_0 = 1.0$: tous les lobes MI de densités impaires ont disparu.

Lorsque $t/U_0 = 0$, le système adopte une phase de Mott avec ρ bosons par site lorsque le potentiel chimique μ satisfait la condition $\rho - 1 < \mu/U_0 < \rho - U_2/U_0$ pour des densités impaires et $\rho - 1 - U_2/U_0 < \mu/U_0 < \rho$ pour des densités paires. La base des lobes MI vaut $\Delta\mu/U_0 = 1 - U_2/U_0$ pour les densités impaires et vaut $\Delta\mu/U_0 = 1 + U_2/U_0$ pour les densités paires. Ainsi, à la différence du cas précédent $U_2/U_0 < 0$, seules les phases de Mott de densités impaires disparaissent lorsque $U_2/U_0 = 1.0$ (Figure 5.35 à droite). Lorsque $t/U_0 \neq 0$, les deux diagrammes présentent les mêmes différences qualitatives que celles du cas $U_2/U_0 < 0$ et les extrémités des lobes diffèrent environ d’un facteur 2.

Phase de Mott $\rho = 1$

Pour des petites tailles ($L \leq 20$), les distributions sont égales $P(\rho_0) = P(\rho_\Lambda)$ et présentent chacune deux *maxima*, l’un situé proche de la densité totale ρ et l’autre situé proche de 0 (cf. Figure 5.37 avec $\beta = \{6L/t, 8L/t\}$). Ce comportement résulte du fait que le système adopte très souvent soit un état presque entièrement composé de particules de spin 0, soit un état presque entièrement composé de particules de spin Λ .

Cependant, la probabilité de passer d'un de ces états à l'autre diminue lorsque la taille L du système augmente. Ceci est dû au fait que la barrière d'énergie à franchir pour passer d'un système composé principalement de particules 0 (Λ) à un système composé principalement de particules Λ (0) croît avec la taille du système. Numériquement, l'augmentation de la taille va rompre l'ergodicité de la simulation: l'espace des états ne sera plus entièrement visité. Le système va donc essentiellement visiter les états d'énergie proche de celle de l'état de plus basse énergie déjà visité. Sortir de cette zone prendra d'autant plus de temps que L est grand. Dans nos simulations, la limite d'un système de grande taille est atteinte lorsque $L = 40$ et la symétrie axiale des histogrammes en $\rho/2$ est rompue. À titre d'exemple, les histogrammes de la phase de Mott $\rho = 1$ présentés sur la Figure 5.36 correspondent à un système essentiellement composé de particules de spin 0 ($\max(P(\rho_\Lambda))$ en $\rho_\Lambda \simeq 0$ et $\max(P(\rho_0))$ en $\rho_0 \simeq 1$).

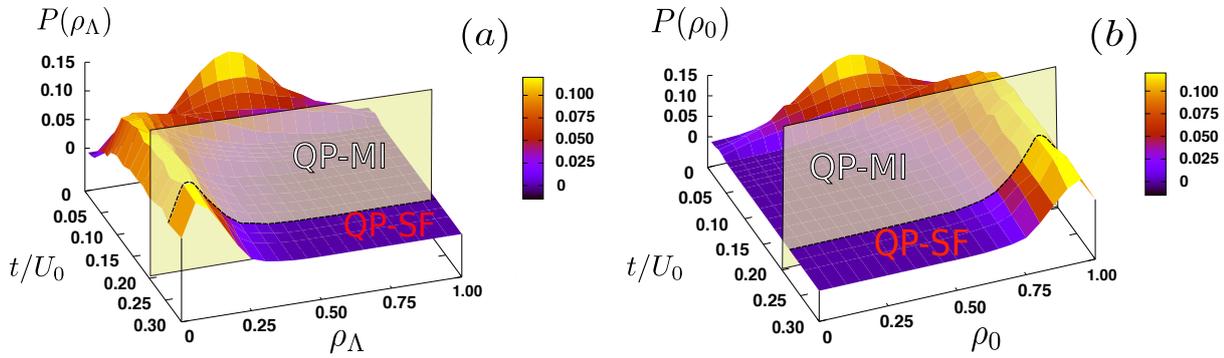


FIGURE 5.36 – Histogrammes des densités des particules Λ (a) et 0 (b) en fonction de t/U_0 pour la transition MI-superfluide avec la densité totale $\rho = 1$ et le rapport $U_2/U_0 = 0.1$ pour $L = 40$ et $\beta = 80/t$. Lorsque $t/U_0 \lesssim 0.05$, les effets thermiques présents ($k_B T > t^2/U_0$) équilibrent les deux populations. Dans la phase de Mott, les histogrammes sont quasi-polarisés (QP): le maximum de la distribution de l'une des deux espèces (spin Λ ici) se situe en $\rho_\sigma \simeq 0$ et le maximum de la distribution de l'autre espèce se situe en $\rho_\sigma \simeq 1$. La quasi-polarisation persiste dans la phase superfluide, *i.e.* pour $t/U_0 \gtrsim 0.20$. Ce comportement, observé pour différentes tailles, ne peut pas être prédit par le champ moyen.

Nous montrerons que ce comportement des histogrammes est associé à une organisation des spins de symétrie continue dans le plan yz . Le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg, appliqué aux systèmes 1D à température nulle, interdit tout ordre de symétrie continue d'exister dans la limite thermodynamique. Cette considération théorique nous permet de conclure que le déséquilibre des populations observé dans nos simulations correspond à un « quasi-ordre à longue portée » (QLRO) pour lequel les fonctions de corrélations décroissent en loi de puissance. Ce déséquilibre n'existe que pour des systèmes de taille finie car en 1D à température nulle, les fluctuations quantiques empêchent tout ordre à longue portée de symétrie continue de se développer dans la limite thermodynamique. Pour cette raison, le déséquilibre des populations est nommé « quasi-polarisation » plutôt que « polarisation », terme associé à un « ordre à longue portée » (LRO). L'intérêt d'étudier de tels phénomènes liés à la taille finie du système provient des systèmes expérimentaux pour lesquels la taille reste limitée (quelques milliers de particules). Les effets de taille finie rencontrés dans nos simulations peuvent donc aussi apparaître expérimentalement [121].

Du point de vue des bosons de Schwinger [75], les spins présentent une certaine rigidité dans le plan yz qui tend à les aligner dans la même direction pour un système de taille finie L et donne donc une quasi-polarisation telle que $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \neq 0$ [cf. Eq. (5.18)]. Lorsque la taille du système augmente, cette "aimantation" dans le plan yz va peu à peu pointer aléatoirement dans toutes les directions possibles et va donc changer la projection du spin suivant l'axe z . Lorsque $L \rightarrow \infty$, "l'aimantation" totale sera donnée par la valeur moyenne de vecteurs d'orientation aléatoire et sera donc nulle, dans ce cas, $S_{zz}(\mathbf{R} \rightarrow \infty) = 0$ et la quasi-polarisation disparaît. La restriction due aux limites de notre algorithme ne nous permet pas de confirmer cette prédiction théorique. En effet, il nous est difficile d'étudier proprement des systèmes de taille $L > 80$.

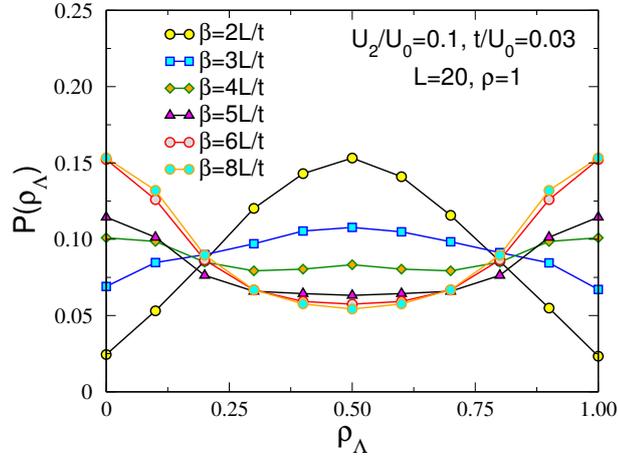


FIGURE 5.37 – Évolution de l'histogramme $P(\rho_\Lambda)$ en fonction de l'inverse de la température β avec $L = 20$ et $U_2/U_0 = 0.1$ situé à la base de la phase de Mott $\rho = 1$ telle que $t/U_0 = 0.03$. Cet histogramme est centré pour la température la plus chaude $\beta = 2L/t$ et se « quasi-polarise » lorsque la température diminue, *i.e.* lorsque β augmente. Cet histogramme se stabilise lorsque l'on atteint la température nulle, telle que $\beta = 6L/t$. Cette évolution met clairement en évidence les effets thermiques non négligeables lorsque $\beta < 6L/t$. La limite de température nulle est atteinte lorsque $k_B T \ll t^2/U_0$.

Dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$, les effets thermiques présents équilibrent les deux populations. En effet, la Figure 5.37 montre que l'histogramme $P(\rho_\Lambda)$, centré en $\rho_\Lambda = 0.5$ pour $\beta = 2L/t$, se « quasi-polarise » progressivement lorsque l'on baisse la température, *i.e.* lorsque l'on augmente la valeur de β . Cet histogramme se stabilise lorsque l'on atteint la limite de température nulle telle que $\beta = 6L/t$. Nous avons montré pour le cas $U_2/U_0 < 0$ que, dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$, le hamiltonien $\mathcal{H}_{spin^{1/2}}$ se réduit à un hamiltonien effectif de Heisenberg anisotrope [Eq. (5.20)]. Ce modèle montre que, dans cette limite de forte interaction, une nouvelle échelle d'énergie intervient: t^2/U_0 . À température fixée, les spins se découplent lorsque $k_B T \gtrsim t^2/U_0$, ce qui permet aux effets thermiques, si faibles soient-ils devant t et U_0 , d'intervenir dans la statistique.

Dans la limite de température nulle, les corrélations densité-densité sur site, associées aux simulations de la Figure 5.36, sont telles que $C_{00}(0) \gtrsim 0.7$ et $C_{\Lambda\Lambda}(0) \lesssim 0.3$: sur un site donné, il y a toujours soit une particule 0, soit une particule Λ , mais la probabilité de trouver une particule

0 est plus grande à cause de la polarisation. La probabilité qu'une particule 0 et qu'une particule Λ soient situées sur le même site reste très faible. Cependant, les corrélations spin-spin sur site sont identiques à celles du cas $U_2/U_0 = -0.1$ (cf. Tableau 5.7).

L'analyse des fonctions de corrélations montre que:

- les valeurs asymptotiques des corrélations densité-densité sont égales aux produits des densités: $C_{00}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0^2$, $C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_\Lambda^2$ et $C_{0\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0\rho_\Lambda$ (cf. Figure 5.38). Il n'y a donc aucun ordre de densité. Cependant, à température nulle, ces corrélations ne sont pas égales entre elles, ce qui implique que $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \neq 0$ [cf. Eq. (5.15)]. Il existe donc des corrélations spin-spin suivant l'axe z . La valeur de $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \neq 0$ dépend de la quasi-polarisation et ne converge pas vers une valeur unique. Lorsque la quasi-polarisation est très importante, $\rho_0 \rightarrow \rho$ et $\rho_\Lambda \rightarrow 0$ par exemple, cette quantité est telle que $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \rightarrow 0.25$;
- les fonctions de Green décroissent exponentiellement, sauf $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ qui décroît lentement, indiquant l'existence de mouvements cohérents anticorrélés (Figure 5.39). D'après l'égalité $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) = S_{xx}(\mathbf{R}) + S_{yy}(\mathbf{R})$, un quasi-ordre magnétique s'établit dans le plan xy . De plus, lorsque $t/U_0 \rightarrow 0$, les effets thermiques détruisent peu à peu la cohérence des mouvements anticorrélés.

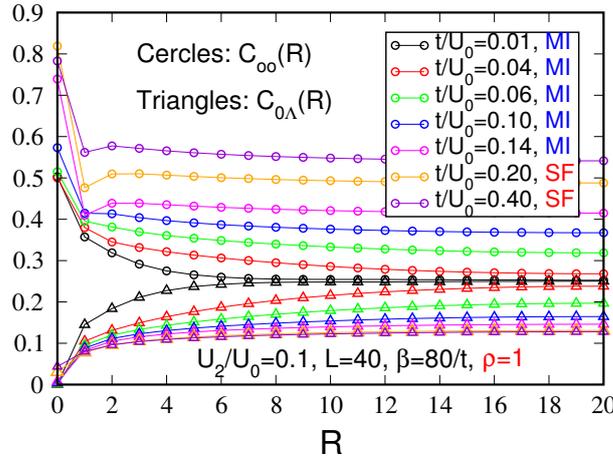


FIGURE 5.38 – Corrélations densité-densité $C_{00}(\mathbf{R})$ et $C_{0\Lambda}(\mathbf{R})$ pour des valeurs de t/U_0 faisant passer le système de la phase MI vers la phase superfluide avec $\rho = 1$ et $U_2/U_0 = 0.1$. Lorsque $t/U_0 \rightarrow 0$, les effets thermiques sont importants: les populations sont équilibrées et $C_{00}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{0\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = \rho_0\rho_\Lambda \simeq 0.25$. Dans la phase de Mott et dans la phase superfluide, les densités sont polarisées avec ici $\rho_0 > \rho_\Lambda$. Les corrélations densité-densité atteignent assez rapidement leurs valeurs asymptotiques telles que $C_{00}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0^2$, $C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_\Lambda^2$ et $C_{0\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0\rho_\Lambda$.

Bien qu'il ne soit pas possible d'étudier numériquement la décroissance des fonctions de Green, il est possible de discriminer le LRO du QLRO par les arguments suivants: d'une part, les fonctions de corrélations densité-densité permettent de déduire que $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \neq 0$ et, d'autre part, la fonction de Green anticorrélée indique que $S_{xx}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) + S_{yy}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \neq 0$. De plus,

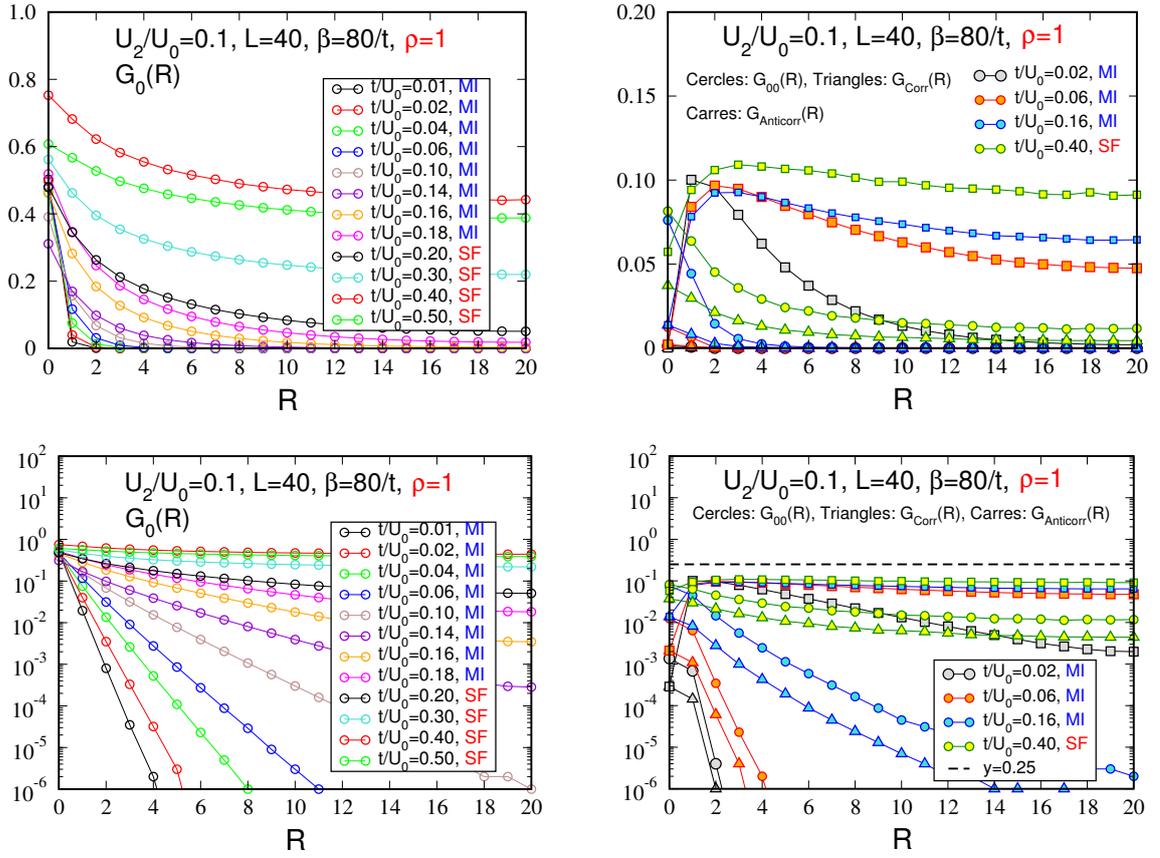


FIGURE 5.39 – Fonction de Green individuelle $G_0(\mathbf{R})$ (à gauche) et fonctions de Green de paires $G_{00}(\mathbf{R})$, $G_{Corr}(\mathbf{R})$ et $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ (à droite) en échelle linéaire (en haut) et semi-log (en bas) pour des valeurs de t/U_0 faisant passer le système de la phase MI vers la phase superfluide avec $\rho = 1$ et $U_2/U_0 = 0.1$. La fonction $G_\Lambda(\mathbf{R})$ ($G_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R})$), non tracée ici, suit le même comportement que $G_0(\mathbf{R})$ ($G_{00}(\mathbf{R})$), mais prend des valeurs plus faibles. Dans les phases MI et SF, $G_{Anticorr}$ décroît lentement, indiquant l'existence de mouvements cohérents anticorrélés. Dans la phase MI, toutes les autres fonctions de Green décroissent exponentiellement. Dans la phase superfluide, toutes les autres fonctions de Green décroissent en loi de puissance: tous les mouvements sont cohérents et les mouvements anticorrélés présents dans la phase de Mott restent dominants.

les valeurs asymptotiques des corrélations densité-densité nous permettent de calculer la valeur asymptotique $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)$ via l'égalité $S_{zz}(\mathbf{L}/2) = (C_{00}(\mathbf{L}/2) + C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{L}/2) - 2C_{0\Lambda}(\mathbf{L}/2))/4$. La comparaison de $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)$ avec la valeur asymptotique de la fonction de Green anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)$ pour différentes valeurs de t/U_0 dans la phase de Mott $\rho = 1$ montre que $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)$ (cf. Tableau 5.9). Nous en déduisons que $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = S_{xx}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) + S_{yy}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)$. Enfin, le modèle effectif de Heisenberg anisotrope [Eq. (5.20)] apporte une information supplémentaire sur l'ordre magnétique. En effet, ce modèle prédit que:

- J_x est négatif pour $U_2/U_0 \in]0, 1/3[$ et est positif pour $U_2/U_0 \in]1/3, 1[$;
- J_y et J_z sont toujours négatifs pour $U_2/U_0 \in]0, 1[$: les interactions spin-spin dans le plan yz sont donc toujours ferromagnétiques.

t/U_0	$S_{zz}(\mathbf{L}/2)$	$G_{Anticorr}(\mathbf{L}/2)$
0.08	0.08 ± 0.02	0.06 ± 0.01
0.10	0.07 ± 0.02	0.06 ± 0.01
0.12	0.09 ± 0.03	0.07 ± 0.01
0.14	0.07 ± 0.03	0.05 ± 0.01
0.18	0.08 ± 0.03	0.07 ± 0.01

TABLE 5.9 – Valeurs asymptotiques des corrélations spin-spin $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)$ et de la fonction de Green anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)$ pour différentes valeurs de t/U_0 dans la phase de Mott $\rho = 1$ avec $U_2/U_0 = 0.1$, $L = 40$ et $\beta = 80/t$.

Cependant, la relation $|J_y| = |J_z| > |J_x|$ pour $U_2/U_0 \in]0, 1[$ implique qu'un quasi-ordre ferromagnétique va être favorisé dans le plan yz et que les corrélations spin-spin suivant les axes y et z sont égales. Ceci conduit à l'égalité $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = S_{yy}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)$ et $S_{xx}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq 0$.

La symétrie continue associée à cette organisation des spins dans le plan yz , ainsi que le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg appliqué au système 1D à température nulle, nous permet de conclure qu'un quasi-ordre ferromagnétique à longue portée existe dans le plan yz .

Phase de Mott $\rho = 2$

Cette phase non dégénérée présente un équilibre des populations: les histogrammes $P(\rho_\Lambda) = P(\rho_0)$ sont centrés en $\rho_\sigma = 1$ et les densités moyennes valent $\rho_0 = \rho_\Lambda = 1$ (Figure 5.40). Les quantités sur site sont en accord avec celles du champ moyen qui prédit que chaque site de cette phase est décrit par l'état singulet $|\varphi_1\rangle = (|00\rangle - |\Lambda\Lambda\rangle)/\sqrt{2}$. (cf. Tableau 5.10). En moyenne, nous avons environ une chance sur deux de trouver deux particules identiques, mais aucune chance de trouver deux particules différentes à cause du coût d'interaction $U_0 + U_2$ trop élevé.

	$C_{00}(0)$	$C_{0\Lambda}(0)$	$C_{\Lambda\Lambda}(0)$	$S_{xx}(0)$	$S_{yy}(0)$	$S_{zz}(0)$	$S^2(0)$	$\Delta S(0)$
CM $ \varphi_1\rangle$	2	0	2	0	1	1	2	-2
MCQ	$\sim 2 > \rho_0^2$	$\sim 0 < \rho_0\rho_\Lambda$	$\sim 2 > \rho_\Lambda^2$	~ 0	~ 1	~ 1	~ 2	~ -2

TABLE 5.10 – Corrélations densité-densité et spin-spin sur site pour l'état $|\varphi_1\rangle = (|00\rangle - |\Lambda\Lambda\rangle)/\sqrt{2}$ obtenus en champ moyen pour la phase de Mott $\rho = 2$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. La dernière ligne du tableau indique les résultats approximatifs mesurés avec la méthode de Monte Carlo quantique dans toute la phase de Mott $\rho = 2$. Les deux méthodes donnent les mêmes résultats lorsque $t/U_0 \rightarrow 0$.

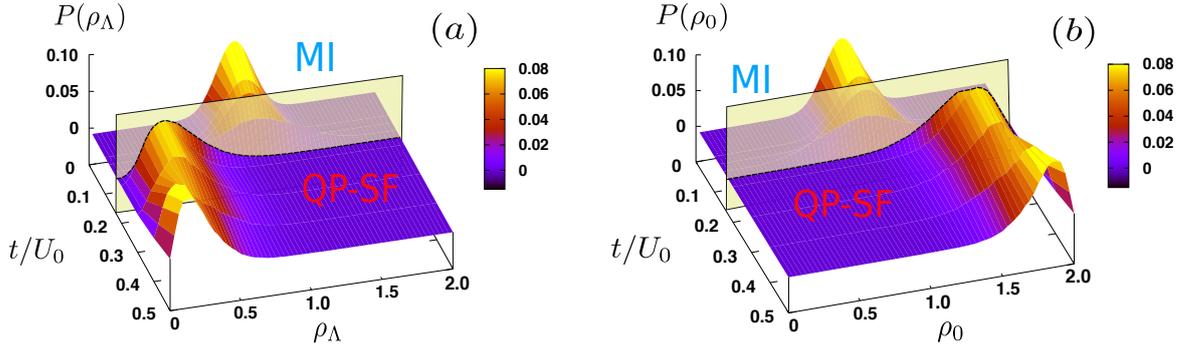


FIGURE 5.40 – Histogrammes des densités des particules Λ (a) et 0 (b) en fonction de t/U_0 pour la transition MI-superfluide avec $\rho = 2$ et $U_2/U_0 = 0.1$ pour $L = 64$ et $\beta = 128/t$. Dans la phase de Mott, *i.e.* pour $t/U_0 < 0.17$, les populations sont équilibrées $P(\rho_\Lambda) = P(\rho_0)$ et les deux distributions sont centrées en $\rho_\sigma = 1$. Lorsque le système devient superfluide à $t/U_0 \simeq 0.17$, les histogrammes se quasi-polarisent (QP): le maximum de la distribution d'une des deux espèces (spin Λ ici) se situe en $\rho_\sigma \simeq 0$, alors que le maximum de la distribution de l'autre espèce se situe en $\rho_\sigma \simeq 2$. Ce comportement est observé pour différentes tailles.

Concernant les fonctions de corrélations:

- les corrélations densité-densité sont asymptotiquement égales entre elles et valent le produit des densités $\rho_0\rho_\Lambda = 1$ (Figure 5.41) ;

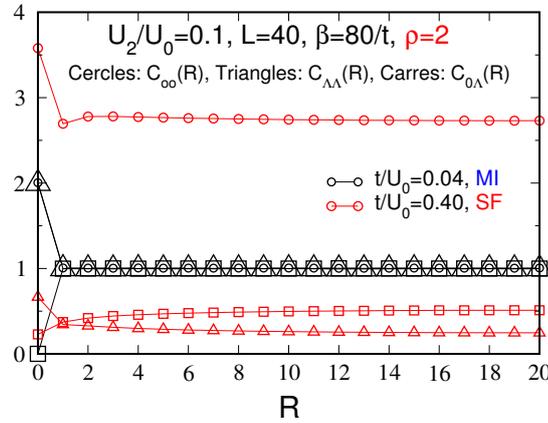


FIGURE 5.41 – Fonctions de corrélations densité-densité pour la phase MI et la phase superfluide avec $\rho = 2$ et $U_2/U_0 = 0.1$. Dans toute la phase de Mott, $C_{00}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) = C_{0\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0\rho_\Lambda \simeq 1$. Dans la phase superfluide, les densités sont quasi-polarisées avec ici $\rho_0 > \rho_\Lambda$. Les valeurs asymptotiques des corrélations densité-densité sont telles que $C_{00}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0^2$, $C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_\Lambda^2$ et $C_{0\Lambda}(\mathbf{R}) \simeq \rho_0\rho_\Lambda$, soit aucun ordre de densité à longue portée.

- toutes les fonctions de Green décroissent exponentiellement (Figure 5.42). Cette phase n'est pas dégénérée lorsque $t/U_0 = 0$, il n'existe donc aucune dégénérescence que le terme ciné-

tique puisse lever. Cet argument explique l'absence de mouvements cohérents anticorrélés, mouvements précédemment observés avec $U_2/U_0 < 0$ et $U_2/U_0 = 0$.

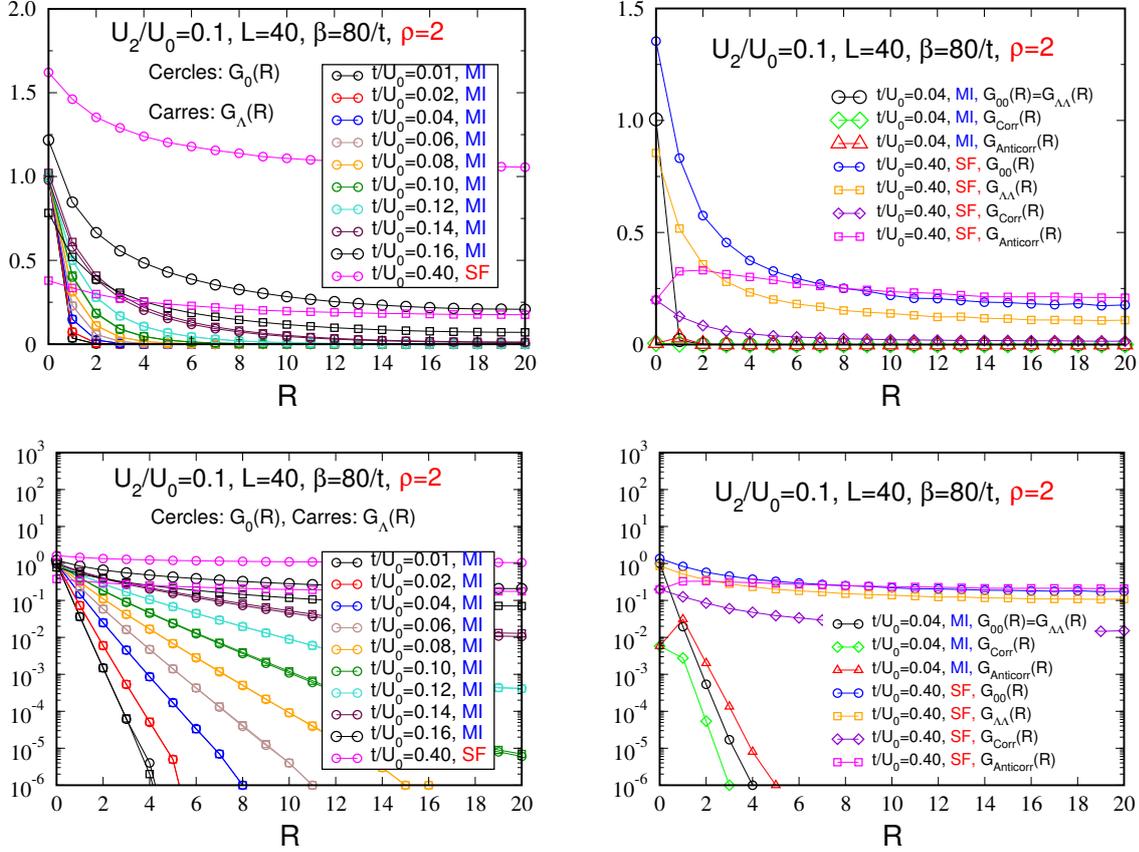


FIGURE 5.42 – Fonctions de Green individuelles (à gauche) et fonctions de Green de paires (à droite) en échelle linéaire (en haut) et semi-log (en bas) pour des valeurs de t/U_0 faisant passer le système de la phase MI vers la phase superfluide avec $\rho = 2$ et $U_2/U_0 = 0.1$. Dans la phase de Mott, les deux populations sont équilibrées, toutes les fonctions de Green décroissent exponentiellement. Dans la phase superfluide, phase polarisée ici composée principalement de particules 0, toutes les fonctions de Green décroissent en loi de puissance. Tous les mouvements sont cohérents et les mouvements corrélés sont minoritaires.

Par conséquent, aucun ordre magnétique n'existe. L'unicité de la fonction d'onde du système dans cette phase, égale à $|\Phi\rangle = \otimes_{i=1}^L |\varphi_1\rangle_i = \otimes_{i=1}^L [(|00\rangle - |\Lambda\Lambda\rangle)/\sqrt{2}]_i$ lorsque $t/U_0 = 0$, fait de celle-ci la phase la mieux décrite par la méthode du champ moyen.

Phase de Mott $\rho = 3$

Nous discutons cette phase afin de montrer que les phases de Mott de densités impaires ont des propriétés communes. La Figure 5.43 montre que cette phase est aussi quasi-polarisée. Pour une telle densité, l'ergodicité des simulations n'est plus assurée pour $L \geq 12$ et le temps de calcul doit être au moins doublé afin d'obtenir des données de qualité équivalente aux précédentes. Le

Tableau 5.11 permet de comparer les quantités locales mesurées avec nos deux méthodes. La méthode de Monte Carlo quantique donne des résultats égaux à la moyenne de ceux du champ moyen lorsque $t/U_0 \rightarrow 0$, les états $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont donc visités avec la même probabilité. Pour

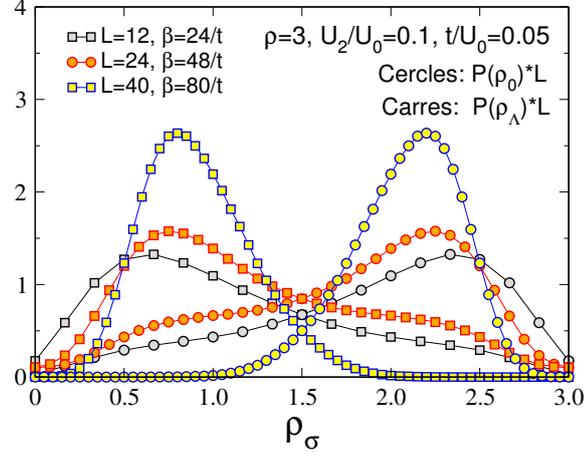


FIGURE 5.43 – Histogrammes des densités pour la phase MI $\rho = 3$ avec $U_2/U_0 = 0.1$ pour trois tailles $L = \{12, 24, 40\}$ et $\beta = 2L/t$. Les histogrammes sont multipliés par L afin d’avoir une échelle appropriée. Pour $L = 40$, les histogrammes $P(\rho_\Lambda)$ et $P(\rho_0)$ sont respectivement centrés en $\rho_\Lambda \simeq 0.8$ et $\rho_0 \simeq 2.2$.

	$C_{00}(0)$	$C_{0\Lambda}(0)$	$C_{\Lambda\Lambda}(0)$	$S_{xx}(0)$	$S_{yy}(0)$	$S_{zz}(0)$	$S^2(0)$	$\Delta S(0)$
CM $ \varphi_1\rangle$	1	0.5	7	0.25	1.75	1.75	3.75	-3.25
CM $ \varphi_2\rangle$	7	0.5	1	0.25	1.75	1.75	3.75	-3.25
MCQ	~ 4	~ 0.5	~ 4	~ 0.25	~ 1.75	~ 1.75	~ 3.75	~ -3.25

TABLE 5.11 – Corrélations densité-densité et spin-spin sur site pour les états $|\varphi_1\rangle = (\sqrt{3}|\Lambda\Lambda\Lambda\rangle - |00\Lambda\rangle)/2$ et $|\varphi_2\rangle = (|\Lambda\Lambda 0\rangle - \sqrt{3}|000\rangle)/2$ obtenus en champ moyen pour la phase de Mott $\rho = 3$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. La dernière ligne indique les résultats approximatifs mesurés avec la méthode de Monte Carlo quantique avec $L = 12$.

des systèmes de grande taille, les valeurs asymptotiques des corrélations densité-densité, égales aux produits des densités, ne sont pas égales entre elles. De plus, des mouvements anticorrélés de particules 0 et Λ existent et assurent la levée de la dégénérescence de cette phase prédite par le champ moyen.

En résumé, les phases isolantes de Mott de densités paires et impaires sont très différentes:

- lorsque ρ est impaire: le système est quasi-polarisé et des mouvements cohérents anticorrélés existent. Nous avons montré, pour la phase de Mott $\rho = 1$, qu’un quasi-ordre magnétique à longue portée (QLRO), associé à la quasi-polarisation, existe dans le plan yz .

- lorsque ρ est paire: les populations sont équilibrées, aucun mouvement cohérent n'est observé, ce qui correspond aux états non dégénérés trouvés en champ moyen. De plus, le système n'adopte aucun ordre magnétique à longue portée.

Les phases de Mott de densités paires, non dégénérées, sont les phases les mieux décrites par la méthode du champ moyen. Les phases de Mott $\rho = \{1, 2\}$ sont représentées sur la Figure 5.44.

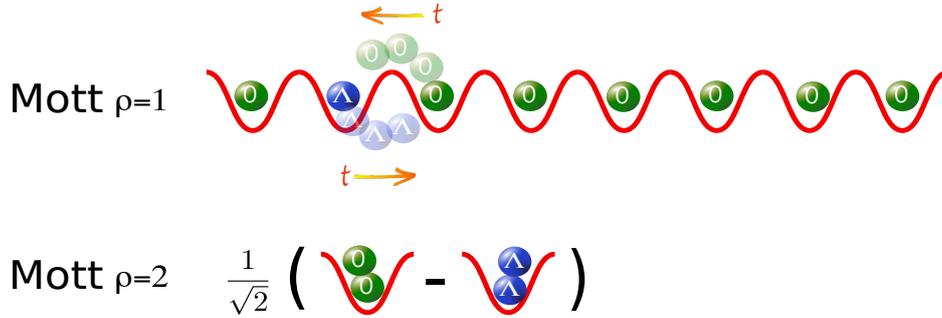


FIGURE 5.44 – Représentation des phases de Mott $\rho = 1$ et $\rho = 2$ pour $U_2/U_0 = 0.1$. La phase de Mott $\rho = 1$ est quasi-polarisée, avec ici $\rho_0 > \rho_\Lambda$, et des mouvements cohérents anticorrélés d'une particule 0 et Λ sont présents. Dans la phase de Mott $\rho = 2$, les populations sont équilibrées et aucun mouvement cohérent n'existe. La physique de cette phase est assez bien décrite par l'état sur site $|\varphi_1\rangle = (|00\rangle - |\Lambda\Lambda\rangle)/\sqrt{2}$.

Phase superfluide

Cette phase est quasi-polarisée (Figures 5.36 et 5.40 pour $\rho = 1$ et 2). Lorsque la polarisation induit un déséquilibre tel que $\rho_0 > \rho_\Lambda$, les corrélations densité-densité sur site sont telles que $C_{00}(0) > C_{\Lambda\Lambda}(0) > C_{0\Lambda}(0)$ (Figures 5.38 et 5.41 pour $\rho = 1$ et 2). Les états sur site composés de particules de spin 0 sont alors favorisés et les états mixtes sont défavorisés à cause du coût d'interaction $U_0 + U_2$ trop grand. De plus, $\Delta S(0)$ prend sa valeur *maximale* en favorisant un ordre de spin sur site dans le plan yz tel que $S_{yy}(0) = S_{zz}(0) \geq S_{xx}(0)$. Ces résultats sur site sont cohérents avec ceux du champ moyen.

D'autre part, les valeurs asymptotiques des corrélations densité-densité, égales aux produits des densités $C_{00}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0^2$, $C_{\Lambda\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_\Lambda^2$ et $C_{0\Lambda}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0\rho_\Lambda$, indiquent l'absence d'ordre de densité (Figures 5.38 et 5.41 pour $\rho = 1$ et 2). Cependant, ces valeurs non égales entre elles impliquent la présence de corrélations spin-spin suivant l'axe z .

Par ailleurs, toutes les fonctions de Green décroissent en loi de puissance et la fonction de Green anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ admet des valeurs supérieures aux autres: tous les mouvements sont quasi cohérents et les mouvements anticorrélés sont dominants (Figures 5.39 et 5.42 pour $\rho = 1$ et 2). Il existe donc aussi des corrélations spin-spin dans le plan xy . Bien qu'il nous soit impossible de prouver l'absence d'ordre magnétique suivant l'axe x , l'expression du hamiltonien Eq. (3.26) laisse supposer que, à l'instar de la phase de Mott $\rho = 1$, seules les corrélations spin-spin dans le plan yz existent. Dans ce cas, la signature de $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ correspond uniquement aux corrélations spin-spin suivant l'axe y et le système admet un QLRO dans le plan yz .

Transitions de phases

La Figure 5.45 présente l'évolution de la densité totale ρ et de la densité superfluide ρ_s lorsque le potentiel chimique μ/U_0 augmente. Cette coupe verticale est représentée sur le diagramme de phase (Figure 5.35) par la ligne verticale en trait discontinu. Cette coupe, très similaire à celles des cas $U_2/U_0 = 0$ et $U_2/U_0 = -0.1$, traverse les lobes MI $\rho = 1$ et $\rho = 2$ du diagramme de phase, ainsi que la région superfluide qui les sépare. Aucune discontinuité n'est visible dans l'évolution de ρ et de ρ_s lorsque l'on augmente la taille du système: toutes les transitions sont du second ordre. La méthode du champ moyen prédit qu'il existe une zone métastable au bout des lobes des phases de Mott de densité paire lorsque $U_2/U_0 \in]0, 0.20]$. Cette métastabilité implique que la transition Mott-superfluide soit du premier ordre. Sur cette coupe, le lobe MI $\rho = 2$ n'est pas coupé à son extrémité, l'ordre de la transition ne contredit donc pas les résultats du champ moyen. Afin de confirmer ou d'infirmer qu'une transition du premier ordre existe, il est nécessaire d'étudier l'évolution de la densité superfluide ρ_s à l'extrémité du lobe MI $\rho = 2$.

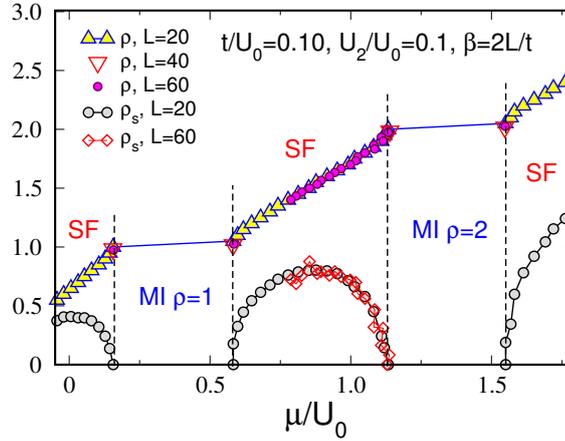


FIGURE 5.45 – Densité ρ et densité superfluide ρ_s en fonction du potentiel chimique μ pour $U_2/U_0 = 0.1$ pour différentes tailles. Ces courbes correspondent à la coupe verticale du diagramme de phase Figure 5.35 en trait discontinu située en $t/U_0 = 0.10$. Aucune discontinuité n'est visible lorsque la taille augmente: toutes les transitions sont du second ordre.

La Figure 5.46 montre l'évolution de ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = \{1, 2\}$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. La densité superfluide est sensible aux effets de taille finie et on voit nettement que la pente devient verticale lorsque la taille augmente pour $\rho = 2$. L'évolution de ρ_s est continue et la décroissance exponentielle des lobes MI du diagramme de phase de la Figure 5.35, ainsi que les arguments de *scaling* [66] indiquent que ces transitions sont de la classe d'universalité de Kosterlitz-Thouless. Le comportement qualitatif de ces courbes est donc très similaire aux cas $U_2/U_0 = 0$ et $U_2/U_0 = -0.1$, seule la valeur de t/U_0 à la transition change. Ces résultats, obtenus avec $U_2/U_0 = 0.1$, sont donc en désaccord avec la méthode du champ moyen qui prédit un transition du second (premier) ordre lorsque la densité est impaire (paire). La même analyse effectuée avec $U_2/U_0 = \{0.01, 0.05, 0.25, 0.50, 1.00\}$ conduit à la même conclusion. Il n'est pas étonnant que le champ moyen échoue dans les prédictions de l'ordre de cette transition en 1D.

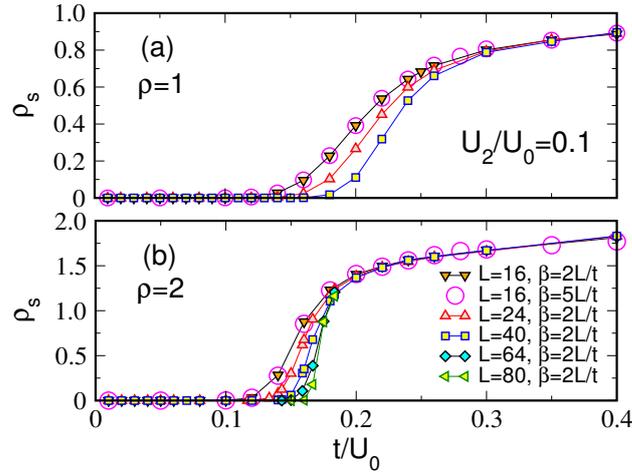


FIGURE 5.46 – Densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 lors de la transition Mott-superfluide pour les densités $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec $U_2/U_0 = 0.1$ pour différentes tailles. La densité superfluide ρ_s est sensible aux effets de taille finie. Les courbes pour $L = 16$ avec $\beta = \{2L/t, 5L/t\}$ se superposent: la limite de température nulle est bien satisfaite pour ρ_s avec $\beta = 2L/t$. Ces transitions sont de la classe d'universalité de Kosterlitz-Thouless du modèle XY 2D.

5.3 Conclusion du Chapitre 5: bosons de spin-1/2 sur réseau 1D

Dans ce premier chapitre, nous avons étudié le système de bosons à deux états de spin décrit par le hamiltonien $\mathcal{H}_{spin1/2}$ [Eq. (3.26)] à température nulle. Nous l'avons, tout d'abord, étudié avec une méthode de champ moyen qui transforme le hamiltonien $\mathcal{H}_{spin1/2}$ via une approximation supposant le système uniforme. Nous obtenons ainsi le hamiltonien sur site $\mathcal{H}_{spin1/2}^r$ [Eq. (3.31)] que nous diagonalisons numériquement. Cette méthode nous restreint donc à une analyse locale, *i.e.* sur site. Nous avons détaillé les trois cas suivants: sans conversion du spin $U_2/U_0 = 0$ et avec des conversions du spin telles que $U_2/U_0 < 0$ et $U_2/U_0 > 0$. Pour ces trois cas, le diagramme de phase est composé de phases isolantes de Mott et d'une phase superfluide. Le champ moyen prédit que:

- pour $U_2/U_0 = 0$: les phases de Mott et la phase superfluide sont dégénérées, toutes les transitions sont du second ordre;
- pour $U_2/U_0 < 0$: les phases de Mott sont deux fois dégénérées. Les populations sont équilibrées dans tout le diagramme de phase: $\rho_0 = \rho_\Lambda$ et, lorsque $\rho > 1$, une « aimantation » sur site suivant l'axe x est favorisée. Toutes les transitions sont du second ordre et toutes les phases de Mott disparaissent lorsque $|U_2|/U_0 = 1$;
- pour $U_2/U_0 > 0$: les phases de Mott de densité impaire sont deux fois dégénérées et les populations sont déséquilibrées. À l'inverse, les phases de Mott de densité paire ne sont pas dégénérées et $\rho_0 = \rho_\Lambda$. Dans toutes les phases de Mott, lorsque $\rho > 1$, une « aimantation » sur site dans le plan yz est favorisée. La phase superfluide est polarisée: soit $\rho_{s0} = 0$ et $\rho_{s\Lambda} = \rho$, soit $\rho_{s0} = \rho$ et $\rho_{s\Lambda} = 0$. Nous insistons sur le fait que cette polarisation, en accord avec la méthode de Monte Carlo quantique, n'a pas été observée lors des études antérieures effectuées par Krutitsky *et al.* [7, 8]. Le hamiltonien $\mathcal{H}_{spin1/2}^r$ permet donc une meilleure

description du système que leur choix $\mathcal{H}_{spin1/2}^K$ [Eq. (3.11)]. Pour des densités paires, la transition Mott-superfluide est du premier ordre pour $U_2/U_0 \in]0, 0.2]$. De plus, lorsque $U_2/U_0 = 1$, toutes les phases de Mott de densité impaire disparaissent.

La méthode de Monte Carlo quantique, méthode exacte, confirme certaines propriétés locales des phases et permet d’approfondir l’étude de ce système grâce au calcul des fonctions de corrélations renseignant sur la globalité du système. Nos travaux montrent que l’influence des effets thermiques devient considérable pour la phase de Mott $\rho = 1$ dans la limite de forte interaction entre particules $U_0 \gg t$ et montrent aussi que ces effets augmentent lorsque t/U_0 diminue. Un modèle effectif de spin basé sur le modèle de Heisenberg nous a permis de comprendre cet effet. D’après la méthode de Monte Carlo quantique:

- pour $U_2/U_0 = 0$: il existe dans les phases de Mott des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules de spin différent, mouvements de permutation d’une particule 0 et d’une particule Λ situées sur deux sites voisins. Lorsque $t/U_0 \neq 0$, ces mouvements assurent la levée de la dégénérescence de ces phases, dégénérescence observée lorsque $t/U_0 = 0$, et correspondent à un quasi-ordre magnétique à longue portée (QLRO) dans le plan xy . Dans ce cas sans conversions, nous montrons qu’il existe une superfluidité anticorrélée non nulle dans les phases de Mott ;
- pour $U_2/U_0 < 0$: des mouvements anticorrélés cohérents sont présents dans toutes les phases. De plus, les histogrammes des densités sont égaux et centrés et les deux populations sont équilibrées dans tout le diagramme de phase. Un ordre ferromagnétique à longue portée (LRO), de type Ising, existe suivant l’axe x dans les phases de Mott. Dans la phase superfluide, les corrélations spin-spin indiquent que les spins s’organisent dans le plan xy , ce que nous interprétons comme un alignement suivant l’axe x . Suivant cette hypothèse, le système adopte le même ordre magnétique que dans les phases de Mott ;
- pour $U_2/U_0 > 0$: pour les systèmes de tailles finies étudiés, les phases de Mott de densité impaire, ainsi que la phase superfluide sont principalement composées d’une seule espèce. Des mouvements anticorrélés sont aussi présents dans ces phases et des corrélations spin-spin existent dans le plan yz . À la différence du cas $U_2/U_0 < 0$, la symétrie associée à cette organisation magnétique est continue. Le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg, appliqué aux systèmes 1D à température nulle, interdit à un tel ordre d’exister, ce qui nous permet de conclure que cette organisation magnétique correspond à un QLRO. Les phases de Mott de densité impaire, ainsi que la phase superfluide, présentent donc un quasi-ordre ferromagnétique à longue portée dans le plan yz . *A contrario*, les phases de Mott de densité paire, décrites par un état unique en champ moyen, présentent des populations équilibrées. Aucun mouvement cohérent n’existe et ces phases ne présentent aucun ordre ou quasi-ordre magnétique.

Enfin, quel que soit le rapport U_2/U_0 , toutes les transitions étudiées avec la méthode de Monte Carlo quantique sont du second ordre, excepté les transitions à densité fixée qui sont de la classe d’universalité de Kosterlitz-Thouless, ce qui contredit les prédictions du champ moyen. Ce résultat n’est pas surprenant: le champ moyen ne devient correct qu’en grande dimension et échoue donc à décrire correctement les transitions en 1D.

Chapitre 6

Bosons de spin-1/2 sur réseau 2D

Nous poursuivons dans ce chapitre l'étude du système de boson de spin-1/2, précédemment menée à 1D au [Chapitre 5](#), en étendant la dimension spatiale à 2D pour un réseau optique carré de taille $L \times L$. L'étude à température nulle présentée à la [Section 6.1](#) permet une comparaison directe avec les résultats du [Chapitre 5](#), permettant ainsi de voir l'influence de la dimension spatiale. À 2D, les fluctuations quantiques sont moins fortes et une phase ordonnée peut exister à température nulle¹. En effet, le nombre de sites plus proches voisins multiplié par deux augmente les interactions entre particules, réduisant ainsi les fluctuations des opérateurs de création et d'annihilation autour de leur valeur moyenne. Cela renforce l'hypothèse du champ moyen qui suppose les fluctuations nulles et remplace les opérateurs de création et d'annihilation par leur valeur moyenne. La nature de certaines phases est donc profondément affectée et nous verrons que des transitions de phase du premier ordre peuvent exister.

Afin d'alléger le contenu de la [Section 6.1](#), nous nous focaliserons essentiellement sur les différences entre le cas 2D et le cas 1D. Nous verrons dans cette section que la méthode du champ moyen et la méthode de Monte Carlo quantique sont en bon accord qualitatif. Les principaux résultats de la [Section 6.1](#) ont été publiés dans la revue *Physical Review B* [[18](#)]. À la [Section 6.2](#), nous étudierons l'influence des effets thermiques, effets toujours présents expérimentalement. Lorsque la température est non nulle, nous verrons que la méthode du champ moyen utilisée est incapable de décrire correctement le diagramme de phase, les propriétés de certaines phases et l'ordre des transitions. Cette section présente donc les limites de validité de cette méthode pourtant souvent utilisée à température finie [[9](#), [16](#)]. Les principaux résultats de la [Section 6.2](#) ont été publiés dans la revue *The European Physical Journal B* [[19](#)].

6.1 Étude à température nulle

Tous les résultats obtenus avec la méthode du champ moyen présentés à la [Section 5.1](#) restent identiques, la seule différence quantitative étant qu'à 2D l'axe t/U_0 est divisé par un facteur 2. Nous ne discuterons donc pas les résultats obtenus avec cette méthode et renvoyons le lecteur à la [Section 5.1](#). Nous nous focaliserons seulement sur les résultats obtenus avec la méthode de Monte Carlo quantique utilisée avec le même algorithme qu'à 1D [[95](#), [96](#)]. Un modèle similaire a déjà été étudié avec la méthode de Monte Carlo quantique [[74](#)].

1. Une phase condensée de Bose-Einstein, par exemple.

6.1.1 Cas $U_2/U_0 < 0$: ordre ferromagnétique de type Ising

Pour $|U_2|/U_0 < 1$, le diagramme de phase est toujours composé de phases isolantes de Mott et d'une phase superfluide. À la différence du cas 1D, la fraction condensée $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ non nulle dans la phase superfluide est la signature d'une phase condensée de Bose-Einstein. La Figure 6.1 représente le diagramme de phase obtenu avec $U_2/U_0 = -0.1$ pour trois systèmes carrés de taille $L \times L$ avec $L = \{8, 10, 12\}$. Ce diagramme a été obtenu en effectuant des coupes verticales dans l'ensemble canonique, *i.e.* en augmentant le nombre total de particules d'une unité, simulation par simulation pour une valeur de t/U_0 fixée.

Sur cette figure, les trois tailles donnent les mêmes résultats: les effets de taille finie sont négligeables concernant la délimitation des phases. De plus, les points pour $L = 10$ avec $\beta = 2L/t$ et $\beta = 4L/t$ se superposent ce qui signifie que la limite de température nulle est raisonnablement atteinte. Une conséquence liée à la dimensionnalité est que les lobes des phases de Mott se sont "arrondis" par rapport à ceux du cas 1D (*cf.* Figure 5.27) et leur longueur a diminué d'un facteur trois environ. Plus précisément, la décroissance en loi de puissance des lobes MI ainsi que les arguments de *scaling* [66] indiquent l'existence de transitions du second ordre à l'extrémité des lobes, de la classe d'universalité du modèle XY classique 3D au bout des lobes. Afin de comparer les deux méthodes, le diagramme de phase obtenu avec la méthode de champ moyen est tracé en pointillés. L'accord qualitatif et quantitatif de ces deux méthodes est meilleur qu'à 1D¹.

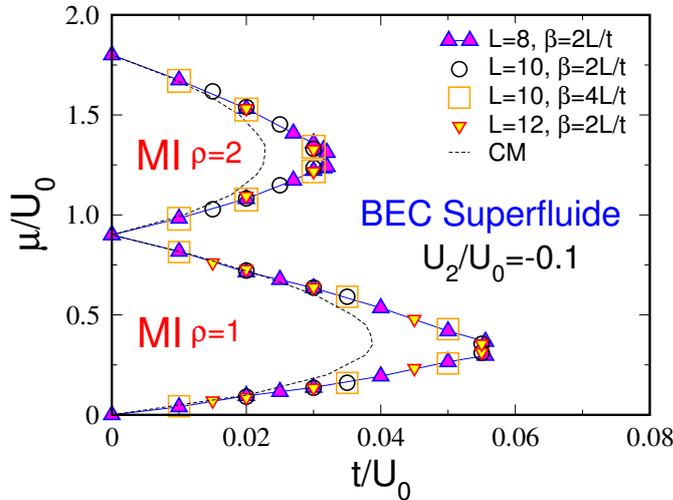


FIGURE 6.1 – Diagramme de phase en Monte Carlo quantique avec $U_2/U_0 = -0.1$ et diagramme de phase en champ moyen en pointillés (*cf.* Figure 5.5 avec $d = 2$). Les barres d'erreurs sont plus petites que la taille des symboles et les lobes du diagramme de phase en Monte Carlo quantique se sont arrondis comparé au cas 1D (*cf.* Figure 5.27). En 2D, l'accord des diagrammes de phase obtenus avec les deux méthodes est meilleur qu'à 1D. Les deux populations sont équilibrées dans tout le diagramme de phase: les histogrammes $P(\rho_0) = P(\rho_\Lambda)$ sont centrés et $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$. De plus, la fraction condensée, non nulle dans la phase superfluide, indique l'existence d'un condensat de Bose-Einstein (BEC). Les transitions de phases sont toutes du second ordre.

1. En 2D, l'extrémité des lobes diffère d'un facteur 1.5 environ.

Phase de Mott $\rho = 1$

Comme pour le cas 1D:

- les populations de spin 0 et Λ sont équilibrées: les histogrammes $P(\rho_0) = P(\rho_\Lambda)$ sont centrés et $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2 = 0.5$ (cf. Figure 6.2). Ceci est cohérent avec le fait qu’aucun ordre de densité n’existe, ou de façon équivalente, qu’aucun ordre magnétique n’existe suivant l’axe z [cf. Eq. (5.18)];
- des effets thermiques interviennent lorsque $t/U_0 \rightarrow 0$: on aperçoit sur la Figure 6.2 une faible déformation de l’histogramme dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$ due aux effets de température finie. Le modèle effectif de Heisenberg anisotrope [Eq. (5.20)] permet d’expliquer l’apparition d’effets thermiques dans cette limite;

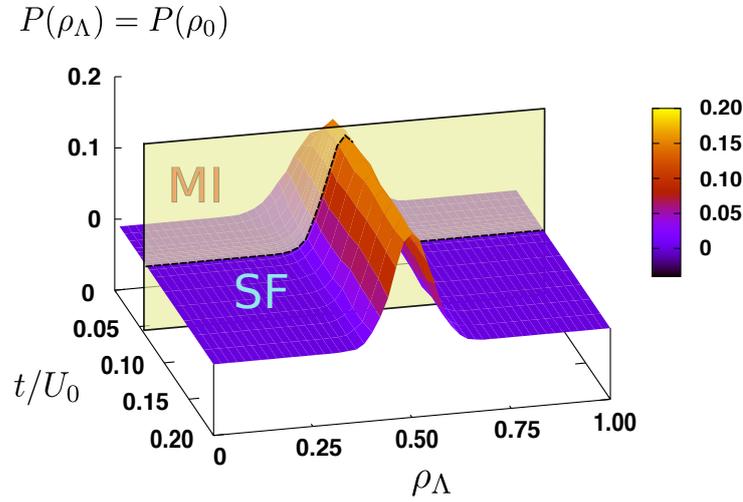


FIGURE 6.2 – Histogramme des densités des particules Λ en fonction de t/U_0 pour la transition MI-superfluide avec $\rho = 1$ et $U_2/U_0 = -0.1$ pour $L^2 = 10 \times 10$ et $\beta = 20/t$. Pour $t/U_0 \in [0, 0.055]$, le système est dans la phase de Mott et lorsque $t/U_0 > 0.055$ le système est superfluide. L’allure de cet histogramme est la même dans les deux phases et n’est pas affectée par la transition. Des effets thermiques déforment légèrement l’histogramme lorsque $t/U_0 \rightarrow 0$. Les histogrammes des deux espèces sont égaux et centrés en $\rho/2 = 0.50$, $\forall t/U_0$.

- toutes les fonctions de Green décroissent exponentiellement, excepté la fonction de Green anticorrélée qui sature rapidement vers sa valeur asymptotique telle que $G_{Anticorr}(\mathbf{L}/2) \simeq \rho_0 \rho_\Lambda \simeq 0.25$ [cf. Figure 6.3 (a) et (b)]. Il existe donc des mouvements parfaitement cohérents anticorrélés de deux particules de spins 0 et Λ . D’après l’égalité $S_{xx}(\mathbf{R}) + S_{yy}(\mathbf{R}) = G_{Anticorr}(\mathbf{R})$, $\forall \mathbf{R} \neq \mathbf{0}$, ces mouvements correspondent à une organisation magnétique dans le plan xy . Nous avons précédemment expliqué que ce type de mouvements assurent une cohérence lorsque $t/U_0 \neq 0$. Comme pour le cas 1D, à 2D, le modèle effectif de Heisenberg anisotrope [Eq. (5.20)] nous permet de conclure que seules les corrélations spin-spin suivant l’axe x existent dans cette phase. À l’instar du cas 1D, le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg, appliqué aux systèmes 2D à température nulle, n’interdit pas à cet ordre de symétrie discrète, de type Ising, d’exister (cf. Tableau 3.1).

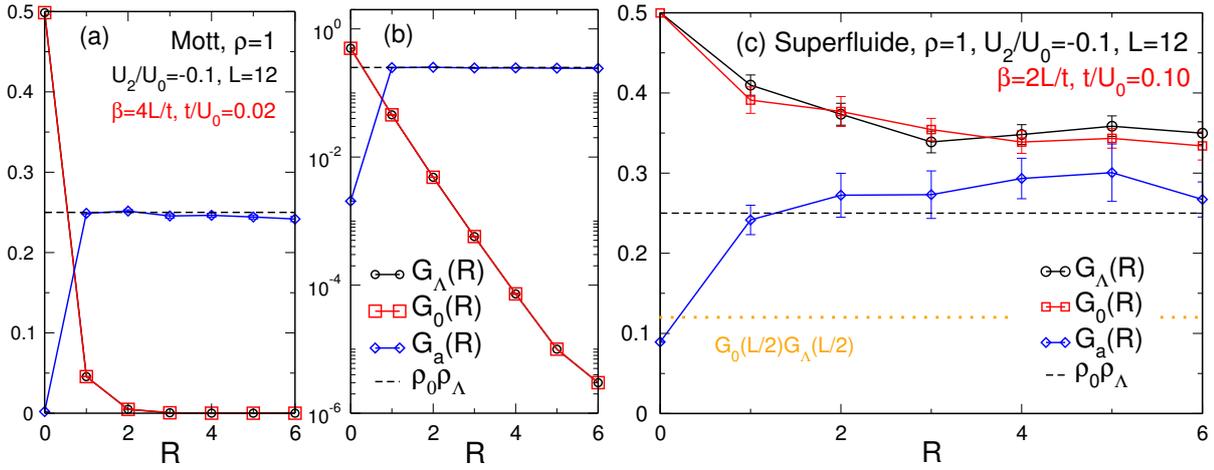


FIGURE 6.3 – Fonctions de Green individuelles $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et $G_0(\mathbf{R})$ et fonction de Green de paire anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) \equiv G_a(\mathbf{R})$ en échelle linéaire [(a) et (c)] et semi-log (b) pour $\rho = 1$ avec $U_2/U_0 = -0.1$. En (a) et (b), $t/U_0 = 0.02$: dans la phase de Mott, seuls des mouvements anticorrélés parfaitement cohérents existent dans le système: $G_a(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0\rho_\Lambda \simeq 0.25$. En (c), $t/U_0 = 0.10$: dans la phase superfluide, les fonctions de Green saturent: les mouvements individuels sont cohérents et les mouvements cohérents anticorrélés sont toujours présents.

Phase superfluide $\rho = 1$

Les populations de spin 0 et Λ sont équilibrées (*cf.* Figure 6.2). Les fonctions de Green individuelles $G_0(\mathbf{R})$ et $G_\Lambda(\mathbf{R})$ saturent, signature d'un ordre à longue distance (LRO) associé au condensat de Bose-Einstein et indiquant qu'une cohérence de phase existe [*cf.* Figure 6.3 (c)]. Pour $t/U_0 = 0.10$, $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) > G_0(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)G_\Lambda(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)$ indique que les particules sont toujours corrélées. Bien que les particules se déplacent quasi librement individuellement, il existe toujours des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules 0 et Λ . Dans cette phase aussi, un ordre magnétique à longue portée s'établit dans le plan xy . À la différence du cas 1D, les densités de la fraction condensée de chaque espèces $\rho_0(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ et $\rho_\Lambda(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ sont non nulles et égales. La densité totale de la fraction condensée $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0}) = \rho_0(\mathbf{k} = \mathbf{0}) + \rho_\Lambda(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ se comporte comme la densité superfluide, mais reste quantitativement légèrement inférieure (Figures 6.13 et 6.14). Ceci est en accord avec le fait que certaines particules d'impulsion non nulle contribuent à la superfluidité.

Phase de Mott $\rho = 2$

Comme pour le cas 1D:

- les populations de spin 0 et Λ sont équilibrées;
- lorsque $t/U_0 = 0$, deux états dégénérés sur site minimisent l'énergie libre: $|\varphi_1\rangle = |0\Lambda\rangle$ et $|\varphi_2\rangle = (|00\rangle + |\Lambda\Lambda\rangle)/\sqrt{2}$. Le système est donc très largement dégénéré. Lorsque $t/U_0 \neq 0$, tous ces états dégénérés sont couplés par des contributions du second ordre provenant du terme cinétique et la dégénérescence de cette phase est levée en établissant une cohérence

de phase parfaite *via* des mouvements anticorrélés de paires de particules de spins différents. Plus explicitement: qu'un site soit occupé par deux particules de même spin ou deux particules de spins différents, l'énergie sur site est identique et vaut $U_0 + U_2$. Ainsi, quelle que soit la configuration initiale, permuter deux particules de spins 0 et Λ situées sur deux sites voisins va changer l'état du système sans changer son énergie. La Figure 6.4 (a) et (b) montre la cohérence de phase parfaite de $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ qui atteint sa valeur *maximale* telle que $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0 \rho_\Lambda \simeq 1$, alors que les fonctions de Green individuelles $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et $G_0(\mathbf{R})$ décroissent exponentiellement ;

- d'après les mêmes arguments que le cas 1D, un ordre magnétique à longue portée, de type Ising, est établi suivant l'axe x .

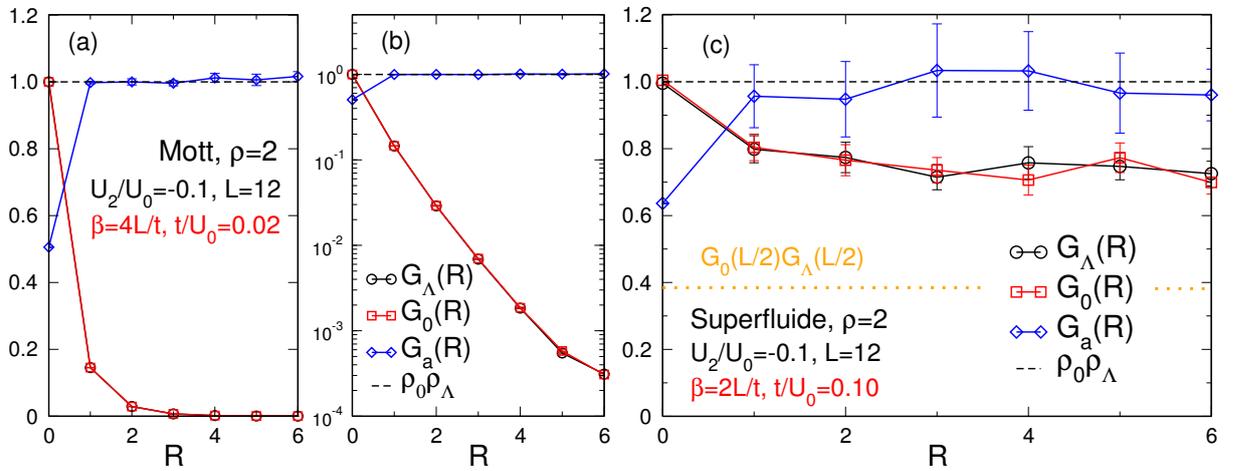


FIGURE 6.4 – Fonctions de Green individuelles $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et $G_0(\mathbf{R})$ et fonction de Green de paire anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) \equiv G_a(\mathbf{R})$ en échelle linéaire [(a) et (c)] et semi-log (b) pour $\rho = 2$ et $U_2/U_0 = -0.1$. En (a) et (b), $t/U_0 = 0.02$: dans la phase de Mott, seuls des mouvements anticorrélés parfaitement cohérents existent: $G_a(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0 \rho_\Lambda \simeq 1$. En (c), $t/U_0 = 0.10$: dans la phase superfluide, les fonctions de Green saturent, tous les mouvements sont cohérents. De plus, les particules sont toujours corrélées car $G_{Anticorr}(\mathbf{L}/2) > G_0(\mathbf{L}/2)G_\Lambda(\mathbf{L}/2)$ et les mouvements anticorrélés sont parfaitement cohérents.

Phase superfluide $\rho = 2$

Cette phase est très similaire à la phase superfluide avec $\rho = 1$. La Figure 6.4 (b) montre qu'il existe simultanément des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules 0 et Λ et des mouvements cohérents individuels. Ici encore, la contribution majeure semble provenir des mouvements cohérents anticorrélés. La fraction condensée $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0}) = \rho_0(\mathbf{k} = \mathbf{0}) + \rho_\Lambda(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ est non nulle et se comporte comme la densité superfluide, bien que légèrement inférieure quantitativement (Figures 6.13 et 6.14).

Transitions de phases

Nous nous focalisons sur l'extrémité des lobes de Mott. Sur la Figure 6.5, nous traçons la densité superfluide en fonction de t/U_0 lors de la transition MI-superfluide en fixant la densité totale. Les courbes pour $L = 8$ avec $\beta = 2L/t$ et $\beta = 5L/t$ sont identiques: la limite de température nulle est bien satisfaite pour $\beta = 2L/t$. De plus, les effets de taille finie sont négligeables pour les tailles étudiées. Sur cette figure, la densité superfluide ρ_s évolue de façon continue pour les deux densités. À la différence du cas 1D, la forme des extrémités des lobes (*cf.* Figure 6.1) indique que ces transitions, de la classe d'universalité du modèle XY classique 3D [66], sont du second ordre. Bien que l'ordre de ces transitions soit en accord avec les prédictions du champ moyen, nous ne pouvons pas comparer les exposants critiques de ces transitions.

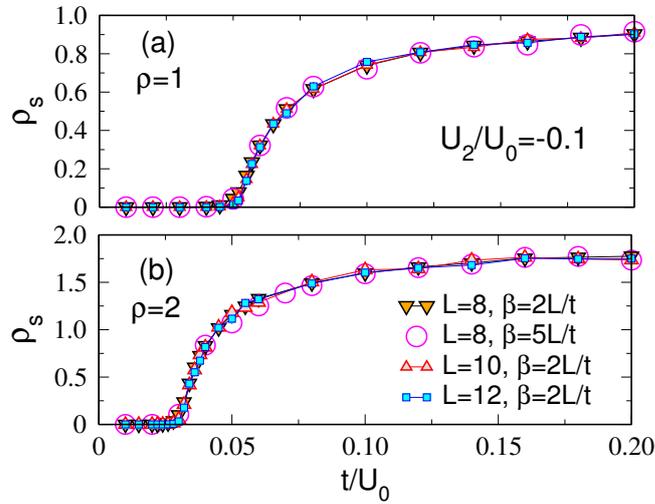


FIGURE 6.5 – Densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 lors de la transition MI-superfluide pour les densités constantes $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec $U_2/U_0 = -0.1$ pour trois réseaux carrés de côté $L = \{8, 10, 12\}$. Il n'y a aucun signe visible de discontinuité lorsque la taille augmente: ces transitions sont du second ordre, comme le prédit l'analyse en champ moyen. Les effets de taille finie et de température sont négligeables.

En résumé, pour $U_2/U_0 < 0$, les propriétés principales des phases sont similaires à celles du cas 1D. Cependant, en comparaison avec le cas 1D:

- la fraction condensée $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ et la densité superfluide sont simultanément non nulles: le comportement superfluide est donc ici une propriété d'une phase condensée de Bose-Einstein. À l'inverse du cas 1D, pour lequel le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg interdit l'existence de tout ordre à longue portée de symétrie continue dans la limite thermodynamique, le système peut adopter, en 2D à température nulle, une phase ordonnée de symétrie continue, telle que la phase condensée de Bose-Einstein. Ceci explique pourquoi les fonctions de Green peuvent désormais développer un ordre à longue portée ;
- les extrémités des lobes des phases de Mott, qui décroissent en loi de puissance, se sont arrondies et l'accord avec le diagramme de phase du champ moyen est meilleur. Ceci indique

que les transitions de phases à densité constante, de la classe d'universalité du modèle XY classique 3D, sont du second ordre, alors qu'à 1D celles-ci sont de la classe d'universalité de Kosterlitz-Thouless du modèle XY bidimensionnel.

6.1.2 Cas $U_2/U_0 > 0$: polarisation et transitions du premier ordre

Ce cas est plus riche que le cas précédent et des différences importantes existent entre le cas 1D et le cas 2D. La Figure 6.6 représente le diagramme de phase avec $U_2/U_0 = 0.1$ pour différentes tailles. Ce diagramme de phase est composé de phases isolantes de Mott et d'une phase superfluide pour laquelle la fraction condensée est non nulle. À l'inverse des phases de Mott de densités paires, les phases de Mott de densités impaires et la phase superfluide sont polarisées.

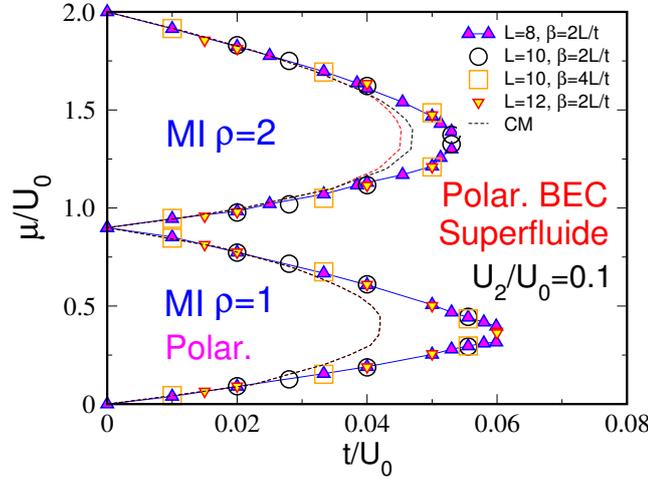


FIGURE 6.6 – Diagramme de phase en Monte Carlo quantique avec $U_2/U_0 = 0.1$ et diagramme de phase en champ moyen en pointillés (*cf.* Figure 5.11 avec $d=2$). Les effets de taille finie et de température sont négligeables et les barres d'erreurs sont plus petites que la taille des symboles. La phase de Mott $\rho = 1$ et la phase superfluide sont polarisées, à l'inverse de la phase de Mott $\rho = 2$ pour laquelle les populations sont équilibrées. La fraction condensée est non nulle dans la phase superfluide, indiquant que cette phase est une phase condensée de Bose-Einstein. Les transitions de phases sont du second ordre exceptées au bout du lobe $\rho = 2$ où les transitions sont du premier ordre, ce qui confirme les prédictions du champ moyen. La transition MI-superfluide avec $\rho = 1$ fixée est de la classe d'universalité du modèle XY classique 3D.

◦ Lorsque $t/U_0 = 0$, la largeur des lobes MI impairs vaut $\Delta\mu/U_0 = 1 - U_2/U_0$ et celle des lobes pairs vaut $\Delta\mu/U_0 = 1 + U_2/U_0$. Comme nous l'avons vu en 1D, ceci implique que tous les lobes impairs disparaissent lorsque $U_2/U_0 = 1$.

◦ Lorsque $t/U_0 \neq 0$, à l'instar du cas précédent, les lobes des phases de Mott se sont arrondis en comparaison à ceux du cas 1D (*cf.* Figure 5.35), signature, pour $\rho = 1$, de transitions de phases du second ordre de la classe d'universalité du modèle XY classique 3D [66] et leur longueur a diminué d'un facteur trois environ.

Afin de comparer les deux méthodes, le diagramme de phase obtenu avec la méthode du champ moyen est tracé en pointillés. Selon le champ moyen, une zone métastable existe à l'extrémité du lobe MI $\rho = 2$ entre les courbes en pointillés noirs et rouges. Les deux méthodes sont en meilleur accord qu'à 1D¹.

Phase de Mott $\rho = 1$

Comme pour le cas 1D:

- à température fixée, des effets thermiques interviennent dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$. Hors de cette limite, le système est fortement polarisé (Figure 6.7). À la différence du cas 1D qui présente une quasi-polarisation, la polarisation, associée à un ordre à longue portée de symétrie continue, persiste dans la limite thermodynamique ;
- toutes les fonctions de Green décroissent exponentiellement à l'exception de la fonction de Green anticorrélée qui atteint très rapidement un plateau tel que $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq 1/8 < \rho_0\rho_\Lambda$ [cf. Figure 6.8 (a)]. Cette valeur asymptotique a été prédite par M. Foss-Feig². De plus, des mouvements cohérents anticorrélés lèvent la dégénérescence de cette phase présente lorsque $t/U_0 = 0$. À la différence du cas $U_2/U_0 < 0$, $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \neq \rho_0\rho_\Lambda$;
- un ordre ferromagnétique à longue portée existe dans le plan yz .

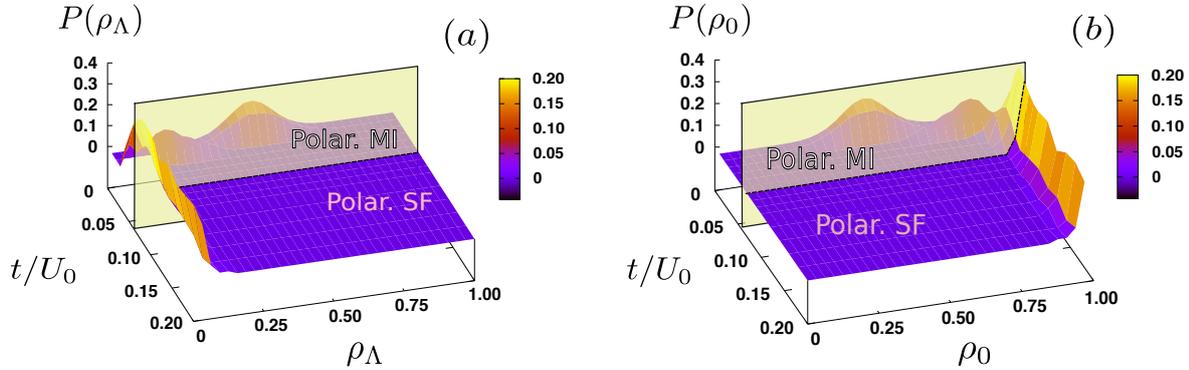


FIGURE 6.7 – Histogrammes des densités des particules Λ (a) et 0 (b) en fonction de t/U_0 pour la transition Mott-superfluide avec $\rho = 1$ et $U_2/U_0 = 0.1$ pour $L = 8$ et $\beta = 16/t$. Pour ces paramètres, des effets thermiques interviennent lorsque $t/U_0 < 0.02$. Dans la phase de Mott, les histogrammes se polarisent: le maximum de la distribution de l'une des deux espèces (spin Λ ici) se situe en $\rho_\sigma \simeq 0$, alors que le maximum de la distribution de l'autre espèce se situe en $\rho_\sigma \simeq 1$. La polarisation persiste dans la phase superfluide pour $t/U_0 > 0.06$. Ce comportement, observé pour différentes tailles, ne peut pas être prédit par la méthode du champ moyen sur site.

1. En 2D, l'extrémité des lobes impairs (pairs) diffère d'un facteur 1.5 (1.2) environ.
2. Communication privée.

Phase superfluide $\rho = 1$

Cette phase est polarisée et $G_0(\mathbf{R})$ sature avec $G_0(\mathbf{R}) > G_\Lambda(\mathbf{R})$ à cause de la polarisation. [cf. Figure 6.8 (c) et (d)]. Bien que les particules se déplacent quasi librement individuellement, le plateau de $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)$ indique qu'il existe toujours des mouvements anticorrélés de paires de particules 0 et Λ . De plus, pour $t/U_0 = 0.10$, les particules sont toujours corrélées car $G_{Anticorr}(\mathbf{L}/2) > G_0(\mathbf{L}/2)G_\Lambda(\mathbf{L}/2)$. À la différence du cas 1D, les densités de la fraction condensée de chaque espèce $\rho_0(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ et $\rho_\Lambda(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ sont non nulles. Cependant, ces densités ne sont pas égales à cause de la polarisation.

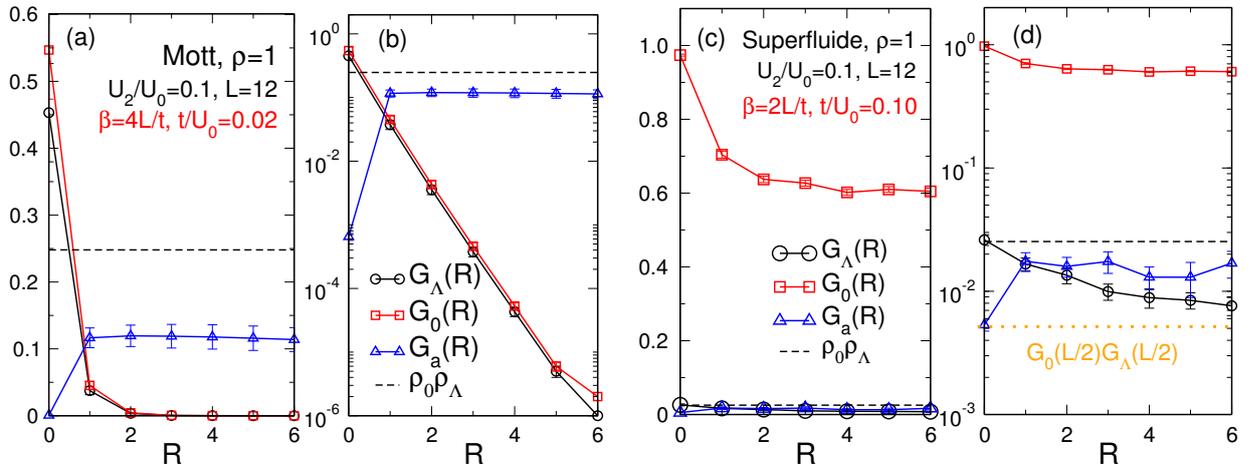


FIGURE 6.8 – Fonctions de Green individuelles $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et $G_0(\mathbf{R})$ et fonction de Green de paire anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) \equiv G_a(\mathbf{R})$ en échelle linéaire [(a) et (c)] et semi-log [(b) et (d)] pour $\rho = 1$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. En (a) et (b), $t/U_0 = 0.02$: dans la phase de Mott, seuls des mouvements cohérents anticorrélés existent dans le système et $G_a(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq 1/8 < \rho_0\rho_\Lambda$. En (c) et (d), $t/U_0 = 0.10$: dans la phase superfluide, $G_0(\mathbf{R})$ sature avec $G_0(\mathbf{R}) > G_\Lambda(\mathbf{R})$ à cause de la polarisation. Les particules 0 et Λ sont corrélées $G_{Anticorr}(\mathbf{L}/2) > G_0(\mathbf{L}/2)G_\Lambda(\mathbf{L}/2)$ et des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules 0 et Λ sont présents.

Phase de Mott $\rho = 2$

Les populations sont équilibrées, les histogrammes $P(\rho_0) = P(\rho_\Lambda)$ sont centrés en $\rho/2 = 1$ et les densités valent $\rho_0 \simeq \rho_\Lambda \simeq \rho/2 \simeq 1$ (cf. Figure 6.9). L'unicité de la fonction d'onde du système dans cette phase pour $t/U_0 = 0$, égale à $|\Phi\rangle = \otimes_{i=1}^L [(|00\rangle - |\Lambda\Lambda\rangle)/\sqrt{2}]_i$, fait de celle-ci la phase la mieux décrite par la méthode du champ moyen. Lorsque t/U_0 devient non nul, il n'existe aucune dégénérescence que le terme cinétique puisse lever, d'où l'absence de mouvements cohérents anticorrélés dans cette phase et la décroissance exponentielle des fonctions de Green [cf. Figure 6.10 (a)]. Aucun ordre magnétique à longue portée n'existe dans cette phase. Ces résultats sont similaires à ceux du cas 1D.

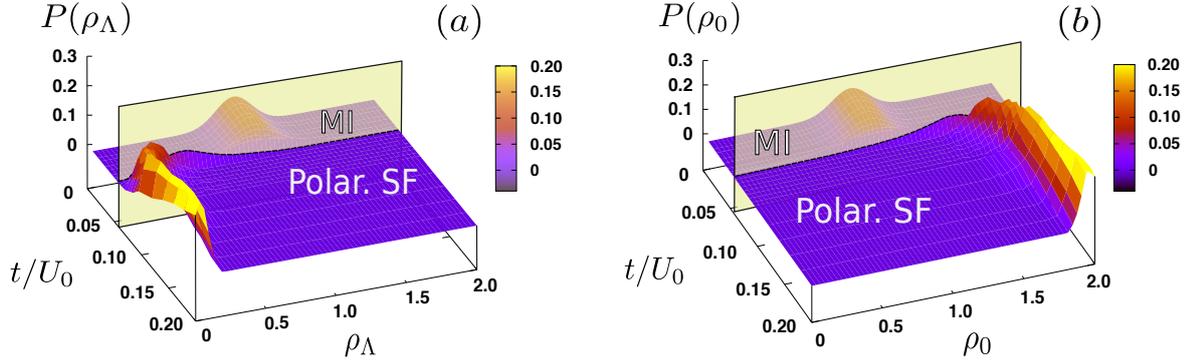


FIGURE 6.9 – Histogrammes des densités des particules Λ (a) et 0 (b) en fonction de t/U_0 pour la transition MI-superfluide avec $\rho = 2$ et $U_2/U_0 = 0.1$ pour $L = 8$ et $\beta = 16/t$. Dans toute la phase de Mott, les populations sont équilibrées: les distributions $P(\rho_\Lambda) = P(\rho_0)$ sont centrées en $\rho/2 = 1$. Lorsque le système devient superfluide ($t/U_0 \simeq 0.052$), les histogrammes se polarisent: le maximum de la distribution de l'une des deux espèces (spin Λ ici) est localisé en $\rho_\sigma \simeq 0$, alors que le maximum de la distribution de l'autre espèce se situe en $\rho_\sigma \simeq 2$.

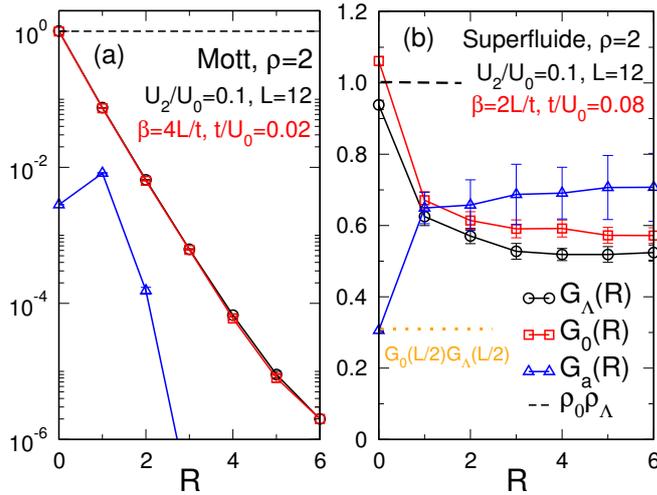


FIGURE 6.10 – Fonctions de Green individuelles $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et $G_0(\mathbf{R})$ et fonction de Green anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) \equiv G_a(\mathbf{R})$ en échelle semi-log (a) et linéaire (b) pour $\rho = 2$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. En (a), $t/U_0 = 0.02$: dans la phase de Mott, aucune cohérence de phase n'existe, toutes les fonctions de Green décroissent exponentiellement. En (b), $t/U_0 = 0.10$: dans la phase superfluide, les fonctions de Green saturent: tous les mouvements sont cohérents.

Phase superfluide $\rho = 2$

Les propriétés de cette phase sont les mêmes qu'avec $\rho = 1$. Cette phase est polarisée (cf. Figure 6.9) et la Figure 6.10 (b) montre qu'il existe, en plus des mouvements cohérents individuels, des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules 0 et Λ . Le régime de fortes corrélations est toujours satisfait pour $t/U_0 = 0.10$ et les particules sont toujours corrélées.

Nous venons de montrer que les propriétés des phases de Mott et de la phase superfluide sont similaires à celles présentées en 1D. Cependant, la fraction condensée et la densité superfluide sont simultanément non nulles dans la phase superfluide. À la différence du cas 1D pour lequel il existe un QLRO, le système adopte un ordre de phase à longue portée et la superfluidité est, par conséquent, une propriété d'une phase condensée de Bose-Einstein. Nous montrons maintenant que la dimension du système a une forte influence sur les transitions de phases.

Transitions de phases

La méthode du champ moyen prédit qu'il existe une zone métastable à l'extrémité des lobes des phases de Mott de densités paires pour $U_2/U_0 \in]0, 0.20]$ (cf. Figure 5.13). Ceci se traduit par une transition Mott-superfluide du premier ordre.

La méthode de Monte Carlo quantique à 1D, en désaccord avec le champ moyen, nous a permis de constater que les transitions sont du second ordre, excepté aux points critiques situés aux extrémités des lobes MI, pour lesquels la transition à densité fixée est de la classe d'universalité du modèle XY bidimensionnel. Dans ce cas, les fluctuations quantiques trop importantes ne permettent pas à la métastabilité de s'établir, et donc aux transitions du premier ordre d'apparaître. Ceci n'est plus vrai à 2D.

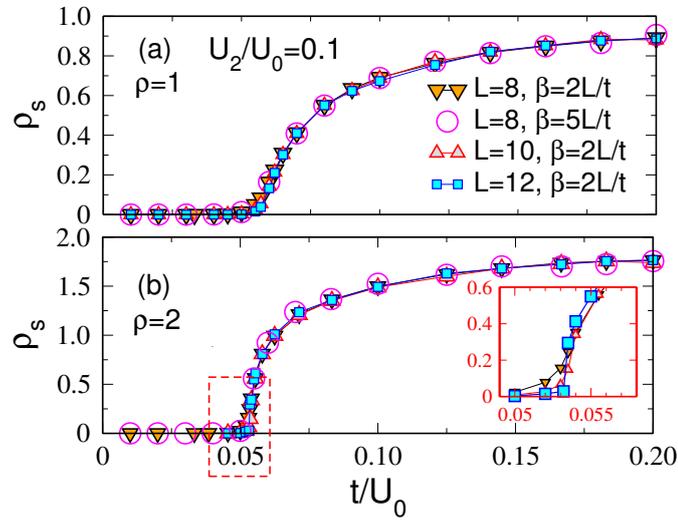


FIGURE 6.11 – Densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 lors de la transition MI-superfluide pour les densités constantes $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec $U_2/U_0 = 0.1$ pour trois réseaux carrés de côté $L = \{8, 10, 12\}$. Les effets de taille et de température finie sont faibles et les barres d'erreurs sont plus petites que la taille des symboles. Pour $\rho = 1$, il n'y a aucun signe de discontinuité lorsque la taille augmente: la transition est du second ordre. Pour $\rho = 2$, la figure insérée représente un agrandissement des courbes à la transition. Nous observons une discontinuité de ρ_s lorsque la taille augmente: la transition est du premier ordre. Ceci est en accord avec les prédictions du champ moyen.

Nous traçons sur la Figure 6.11 la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 lors de la transition MI-superfluide pour les densités constantes $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec $U_2/U_0 = 0.1$. Pour $\rho = 1$, il n'y a aucun signe de discontinuité lorsque la taille augmente: la transition, de la classe d'universalité du modèle XY 3D [66], est du second ordre. *A contrario*, pour $\rho = 2$, nous observons une discontinuité de ρ_s lorsque la taille augmente laissant supposer que cette transition est du premier ordre.

Afin de confirmer ce résultat, nous effectuons une coupe verticale du diagramme de phase passant par le bout du lobe MI $\rho = 2$. En effet, un autre indicateur d'une transition du premier ordre est l'observation d'une compressibilité négative $\kappa = \partial\rho/\partial\mu$ dans l'ensemble canonique et d'une discontinuité de ρ en fonction de μ/U_0 dans l'ensemble grand canonique [122]. Dans l'ensemble canonique, la construction de Maxwell permet de déduire la valeur de t_c/U_0 à la transition.

Nous traçons sur la Figure 6.12 la densité ρ en fonction de μ/U_0 dans l'ensemble canonique (a) et dans l'ensemble grand canonique (b) associée à la coupe verticale du diagramme de phase passant par l'extrémité du lobe MI $\rho = 2$. Dans les deux ensembles, la signature d'une transition du premier ordre est très claire. Nous avons choisi le rapport $U_2/U_0 = 0.05$ car la zone métastable est plus étendue pour ce rapport, ce qui rend plus explicite la représentation graphique de la signature d'une transition du premier ordre. Cependant, cette signature est aussi observée dans les deux ensembles pour le rapport $U_2/U_0 = 0.1$. Un saut de la densité superfluide ρ_s est aussi observé pour ces coupes.

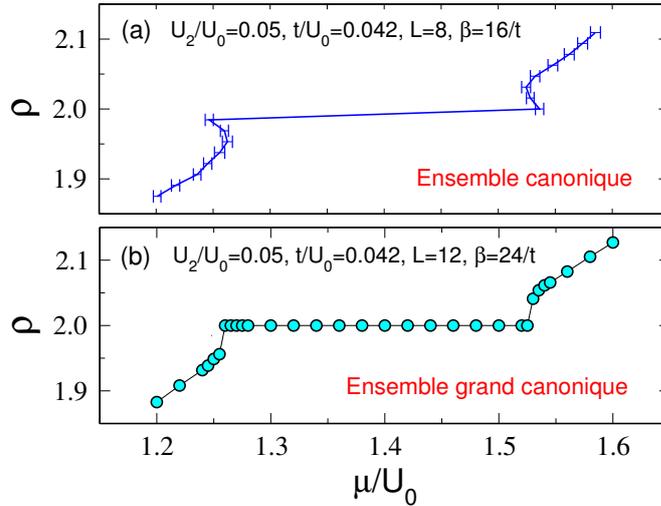


FIGURE 6.12 – Densité totale ρ en fonction de μ/U_0 dans l'ensemble canonique (a) et dans l'ensemble grand canonique (b), respectivement pour $L = 8$ et $L = 12$ à température nulle $\beta = 2L/t$ avec $U_2/U_0 = 0.05$ et $t/U_0 = 0.042$. Ces courbes correspondent à une coupe verticale du lobe MI $\rho = 2$ à son extrémité. La pente négative (compressibilité négative) de ρ observée dans l'ensemble canonique est le signe qu'une métastabilité existe. De même pour la discontinuité de ρ observée dans l'ensemble grand canonique. Pour ces deux courbes, la densité superfluide, non tracée ici, présente une discontinuité et la transition est du premier ordre, en accord avec les prédictions du champ moyen. Cette signature dans les deux ensembles est aussi observée pour le rapport $U_2/U_0 = 0.1$.

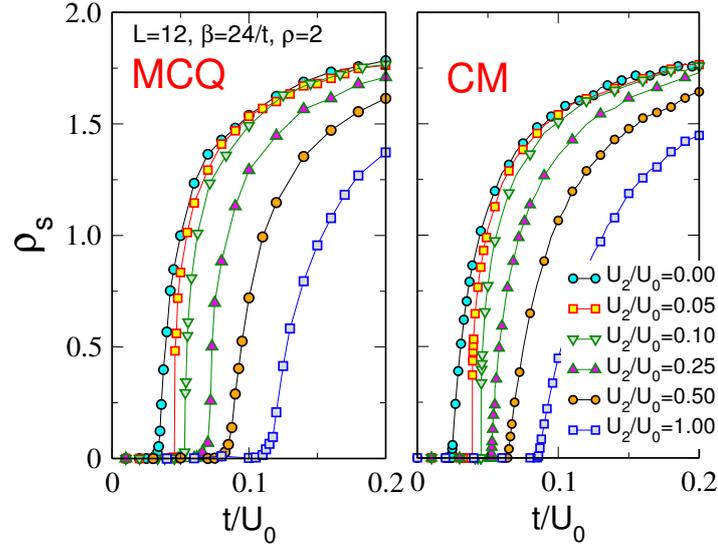


FIGURE 6.13 – Densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 avec une densité constante $\rho = 2$ pour $U_2/U_0 = \{0.00, 0.05, 0.10, 0.25, 0.50, 1.00\}$ avec la méthode de Monte Carlo quantique (à gauche) et avec la méthode du champ moyen (à droite). Les deux méthodes sont en bon accord qualitatif et quantitatif. Sur les deux graphes, l'évolution continue de ρ_s pour $U_2/U_0 = \{0.00, 0.25, 0.50, 1.00\}$ indique que ces transitions sont du second ordre. Sur ces figures, seuls les rapports $U_2/U_0 = \{0.05, 0.10\}$ présentent une discontinuité dans l'évolution de ρ_s , signature d'une transition du premier ordre.

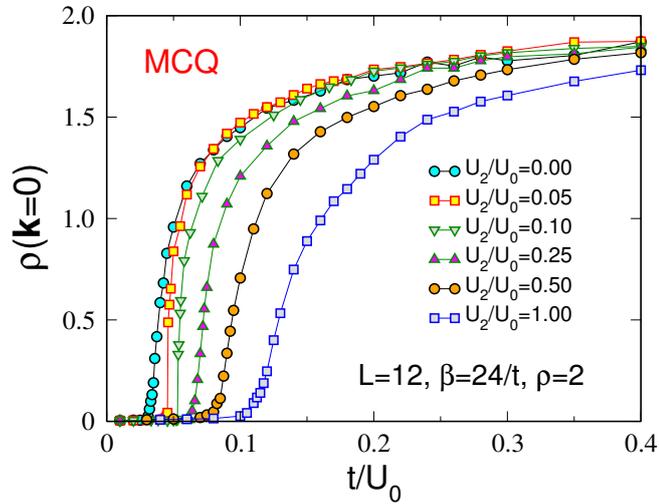


FIGURE 6.14 – Fraction condensée $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ en fonction de t/U_0 avec une densité constante $\rho = 2$ pour $U_2/U_0 = \{0.00, 0.05, 0.10, 0.25, 0.50, 1.00\}$ avec la méthode de Monte Carlo quantique pour $L = 12$ et $\beta = 2L/t$. L'allure de $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ est très similaire à celle de ρ_s de la Figure 6.13 à gauche, mais $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ est quantitativement légèrement inférieure à ρ_s . Pour $U_2/U_0 = \{0.05, 0.10\}$, $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ présente une discontinuité dans son évolution: signature d'une transition du premier ordre.

Nous venons de voir que, contrairement au cas 1D, le champ moyen et la méthode de Monte Carlo quantique sont en accord pour l'ordre des transitions pour les rapports $U_2/U_0 = 0.05$ et $U_2/U_0 = 0.10$. Qu'en est-il des autres valeurs de U_2/U_0 ?

Le champ moyen prédit que la transition avec $\rho = 2$ est du premier ordre lorsque $U_2/U_0 \in]0, 0.2]$ et est du second ordre sinon (*cf.* Figures. 5.13 et 5.18). La Figure 6.13 montre la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour différents rapports U_2/U_0 avec la méthode de Monte Carlo quantique (à gauche) et avec la méthode du champ moyen (à droite). La figure de droite correspond à la Figure 5.18 avec $d = 2$. Sur ces deux graphes, la transition est du second ordre pour $U_2/U_0 = \{0.00, 0.25, 0.50, 1.00\}$ et est du premier ordre pour $U_2/U_0 = \{0.05, 0.10\}$. Les deux méthodes sont en bon accord qualitatif et quantitatif: le saut de ρ_s , nul en $U_2/U_0 = 0$, augmente vers sa valeur *maximale* en $U_2/U_0 \simeq 0.05$, puis décroît jusqu'à zéro en $U_2/U_0 \sim 0.2$.

Il est intéressant de montrer que la densité superfluide ρ_s et la fraction condensée $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ évoluent de façon similaire. Nous traçons sur la Figure 6.14 la fraction condensée $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ mesurée en Monte Carlo quantique en fonction de t/U_0 avec une densité constante $\rho = 2$ pour différentes valeurs de U_2/U_0 . Ces valeurs correspondent aux simulations de la Figure 6.13 à gauche. Bien que ρ_s et $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ évoluent de façon qualitative identique, nous observons quantitativement que $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ est légèrement inférieure à ρ_s . Ceci est en accord avec le fait que certaines particules d'impulsion non nulle contribuent à la superfluidité. De plus, sur cette figure aussi, seuls les rapports $U_2/U_0 = \{0.05, 0.10\}$ présentent une discontinuité dans l'évolution de $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$.

6.1.3 Conclusion de la Section 6.1: étude 2D à température nulle

Cette étude 2D a montré que les quantités locales sont qualitativement identiques à celles du cas 1D. Les principales différences observées dues à la dimensionnalité concernent l'ordre à longue portée des fonctions de Green, la forme des diagrammes de phases, ainsi que la nature des transitions de phases:

- à l'inverse du cas 1D, pour lequel le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg interdit l'existence de tout ordre à longue portée de symétrie continue dans la limite thermodynamique, le système peut adopter, en 2D à température nulle, une phase ordonnée de symétrie continue, telle que la phase condensée de Bose-Einstein (*cf.* Tableau 3.1). Nos mesures montrent que la superfluidité est une phase condensée de Bose-Einstein ;
- par ailleurs, le quasi-ordre à longue portée associé à la quasi-polarisation des phases de Mott de densité impaire et de la phase superfluide avec $U_2/U_0 > 0$ à 1D, se transforme, à 2D, en un ordre à longue portée dont la signature est le plateau de la fonction de Green anticorrélée. Les phases de Mott de densité impaire et la phase superfluide sont polarisées et présentent un ordre ferromagnétique à longue portée dans le plan yz ;
- les extrémités des lobes des phases de Mott, qui décroissent en loi de puissance, se sont arrondies et l'accord avec le diagramme de phase du champ moyen est meilleur.

Enfin, l'importance majeure de la dimensionnalité apparaît dans l'ordre des transitions: des transitions du premier ordre existent désormais pour le cas $U_2/U_0 > 0$ au bout du lobe de Mott $\rho = 2$. Plus précisément, ces transitions sont du premier ordre lorsque $U_2/U_0 \in]0, 0.2]$, comme le prédit le champ moyen. Dans tous les autres cas, les transitions sont du second ordre et les transitions à densité constante sont de la classe d'universalité du modèle XY classique 3D, alors qu'en 1D, celles-ci sont de la classe d'universalité de Kosterlitz-Thouless du modèle XY bidimensionnel. Nous avons aussi montré que la fraction condensée et la densité superfluide suivent le même comportement. Dans la section suivante, nous montrons, pour un système 2D, l'impact des effets thermiques sur les phases et sur les transitions de phases précédemment discutées.

6.2 Influence des effets thermiques

Expérimentalement, il est toujours difficile de s'affranchir des effets thermiques. Le refroidissement subrecul, permet en pratique d'atteindre les températures les plus basses, de l'ordre du nanokelvin (10^{-9} K), soit le milliardième de degré au-dessus du zéro absolu [123]. Bien que cette température soit extrêmement basse à notre échelle, l'énergie thermique $k_B T$ qui lui est associée reste proche des différentes énergies mises en jeu t , U_0 , U_2 et t^2/U_0 . D'autant plus, nous avons vu qu'il n'est pas évident que les conditions $k_B T \ll \{t, U_0, U_2\}$ et $k_B T \ll t^2/U_0$ soient simultanément satisfaites dans la limite de forte interaction $U_0 \gg t$.

L'étude des effets thermiques permet d'établir un lien entre la théorie et l'expérience en se rapprochant un peu plus des conditions expérimentales. Une conséquence importante des effets thermiques pour un système 2D est que les fluctuations thermiques détruisent systématiquement tout ordre de symétrie continue à longue portée dans la limite thermodynamique (*cf.* Théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg [67, 68, 69]). Le condensat de Bose-Einstein va donc disparaître dès lors que la température nulle n'est plus satisfaite. À l'instar du cas 1D à température nulle, nous verrons cependant qu'un quasi-ordre à longue portée¹ peut s'établir dans la phase superfluide pour un système de taille finie (*cf.* Tableau 3.1). La petitesse de la taille des systèmes étudiés rend un tel ordre difficilement distinguable d'un véritable ordre à longue portée. Ce problème concerne aussi les systèmes expérimentaux de taille finie $L \times L$, avec généralement $L \sim 1000$.

L'étude en champ moyen nécessite, pour une gamme de paramètres μ, U_0, U_2, T fixés, de minimiser l'énergie libre $\mathcal{F} = -k_B T \ln \mathcal{Z}$ par rapport au paramètre d'ordre, soit $\sum_{\sigma} \partial \mathcal{F} / \partial \psi_{\sigma} = 0$ et $\mathcal{F}(\psi_{eq}) = \min(\mathcal{F})$. Pour cela, il faut calculer la fonction de partition \mathcal{Z} telle que $\mathcal{Z} = \sum_{\alpha} e^{-\beta \mathcal{E}_{\alpha}}$ avec $\beta = 1/k_B T$. La diagonalisation numérique de la matrice hamiltonienne considérée permet d'obtenir les vecteurs propres $|\varphi_{\alpha}\rangle$ et les valeurs propres \mathcal{E}_{α} qui satisfont l'équation aux valeurs propres

$$\mathcal{H}_{spin1/2}^{\mathbf{r}} |\varphi_{\alpha}\rangle = \mathcal{E}_{\alpha} |\varphi_{\alpha}\rangle,$$

où $\mathcal{H}_{spin1/2}^{\mathbf{r}}$ est le hamiltonien sur site [Eq. (3.31)]. Nous renvoyons le lecteur à la Section 3.3 pour plus de détails.

Nous présenterons les résultats des deux méthodes simultanément afin de les comparer directement. Nous aborderons, tout d'abord, le cas le plus complexe $U_2/U_0 > 0$ puis nous discuterons brièvement le cas plus simple $U_2/U_0 < 0$.

6.2.1 Cas $U_2/U_0 > 0$: quasi-polarisation et disparition du premier ordre

À température nulle, le système adopte une phase isolante de Mott lorsque la densité est entière et lorsque la répulsion entre les particules est forte. Lorsque la répulsion sur site est faible, le terme cinétique est alors minimisé et le système adopte une phase condensée de Bose-Einstein à propriété superfluide (*cf.* Section 2.2). À deux dimensions, seule la propriété superfluide persiste lorsque la température est basse, mais non nulle, et la phase superfluide disparaît à haute température pour laisser place à une nouvelle phase. Cette nouvelle phase compressible ne présente aucune cohérence de phase: c'est un liquide de Bose normal (NBL).

1. Décroissance des fonctions de Green en loi de puissance.

Par ailleurs, la phase de Mott, phase incompressible, n'existe strictement qu'à température nulle. Il est cependant possible de fixer un critère quantitatif afin de discriminer une phase désordonnée peu compressible à basse température d'une phase désordonnée compressible (NBL) à haute température [9, 16]. Par abus de langage, nous appellerons la phase peu compressible « région de Mott ». Le passage de la région de Mott vers le NBL ne présente aucune singularité, ne rompt aucune symétrie et est simplement un *crossover* entre deux comportements différents, peu compressible et compressible, de la même phase. Nous définissons arbitrairement ce critère de la façon suivante: lorsque la densité du système diffère de plus ou moins 1% d'une valeur entière, le système cesse d'adopter la région de Mott et adopte la phase NBL. De plus, la mesure de la variance locale de la densité permet d'obtenir la compressibilité locale $\tilde{\kappa} = \beta (\langle n_{\mathbf{r}}^2 \rangle - \langle n_{\mathbf{r}} \rangle^2)$, où $n_{\mathbf{r}}$ est le nombre total de particules au site \mathbf{r} . Cette quantité permet aussi de distinguer les deux phases désordonnées car $\tilde{\kappa} \simeq 0$ dans la région de Mott, alors que cette quantité est significativement plus grande dans la phase NBL.

Nature des phases et fonte des régions de Mott

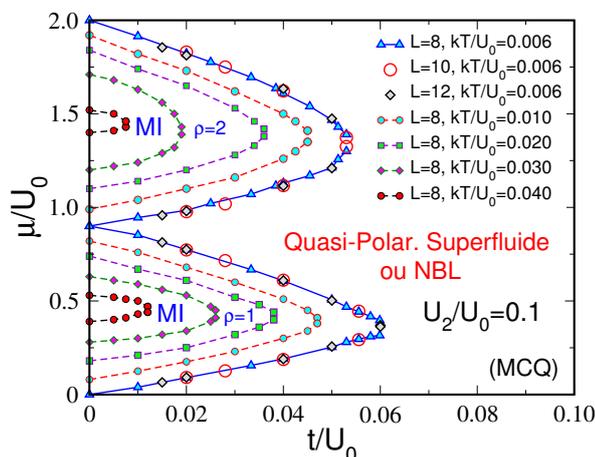


FIGURE 6.15 – Évolution des régions de Mott (MI) de densités $\rho = 1$ et $\rho = 2$ en fonction de la température T pour un système carré de côté $L = \{8, 10, 12\}$ en Monte Carlo quantique avec $U_2/U_0 = 0.1$. Aucune polarisation n'est observée dans les régions de Mott lorsque la température est non nulle ($kT/U_0 > 0.006$). Ces régions disparaissent progressivement lorsque la température augmente et finissent par disparaître totalement lorsque $kT/U_0 \simeq 0.05$. Dans la limite de température nulle ($kT/U_0 \leq 0.006$), seule la phase superfluide existe en dehors des phases de Mott et il existe une transition de phase. Lorsque $kT/U_0 > 0.006$, un liquide de Bose normal (NBL) se développe progressivement entre les lobes MI et la délimitation en pointillés des régions de Mott avec la phase voisine symbolise le *crossover* lorsque la phase voisine est la phase liquide.

Nous montrons sur la Figure 6.15 l'évolution des régions de Mott (MI) de densités $\rho = 1$ et $\rho = 2$ pour différentes températures avec la méthode de Monte Carlo quantique (MCQ) pour $U_2/U_0 = 0.1$. Pour une température donnée, ce graphe est obtenu en effectuant des coupes verticales dans le plan $(t/U_0, \mu/U_0)$, *i.e.* en fixant la valeur de t/U_0 et en variant μ/U_0 dans l'ensemble grand canonique. La région de Mott avec une densité $\rho = 1$ est détectée lorsque la densité superfluide est nulle et lorsque la densité totale est telle que $\rho \in [0.99, 1.01]$. De même, la région MI $\rho = 2$ est détectée lorsque $\rho_s = 0$ et lorsque la densité totale est telle que $\rho \in [1.98, 2.02]$.

Nous voyons sur cette figure que les lobes MI disparaissent progressivement lorsque la température augmente et finissent par disparaître totalement lorsque $kT/U_0 \simeq 0.05$, où k est la constante de Boltzmann. Nous avons vu, dans la limite de température nulle (ici $kT/U_0 \leq 0.006$) à 2D, que la phase de Mott $\rho = 1$ est polarisée et des effets thermiques interviennent dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$. *A contrario*, la phase de Mott $\rho = 2$ ne présente aucune polarisation. Lorsque la température est non nulle mais basse, *i.e.* $kT/U_0 = 0.010$ par exemple, aucune quasi-polarisation n'est observée dans les régions de Mott: les histogrammes sont égaux et centrés en $\rho/2$ et les densités moyennes sont égales $\rho_0 \simeq \rho_\Lambda \simeq \rho/2$. L'équilibre des populations dans la région de Mott $\rho = 2$ n'est donc pas affecté par les effets thermiques, contrairement à la région de Mott $\rho = 1$ qui se dépolarise très rapidement lorsque la température augmente. En dehors des régions de Mott, le système est soit liquide non polarisé (NBL), soit superfluide quasi-polarisé.

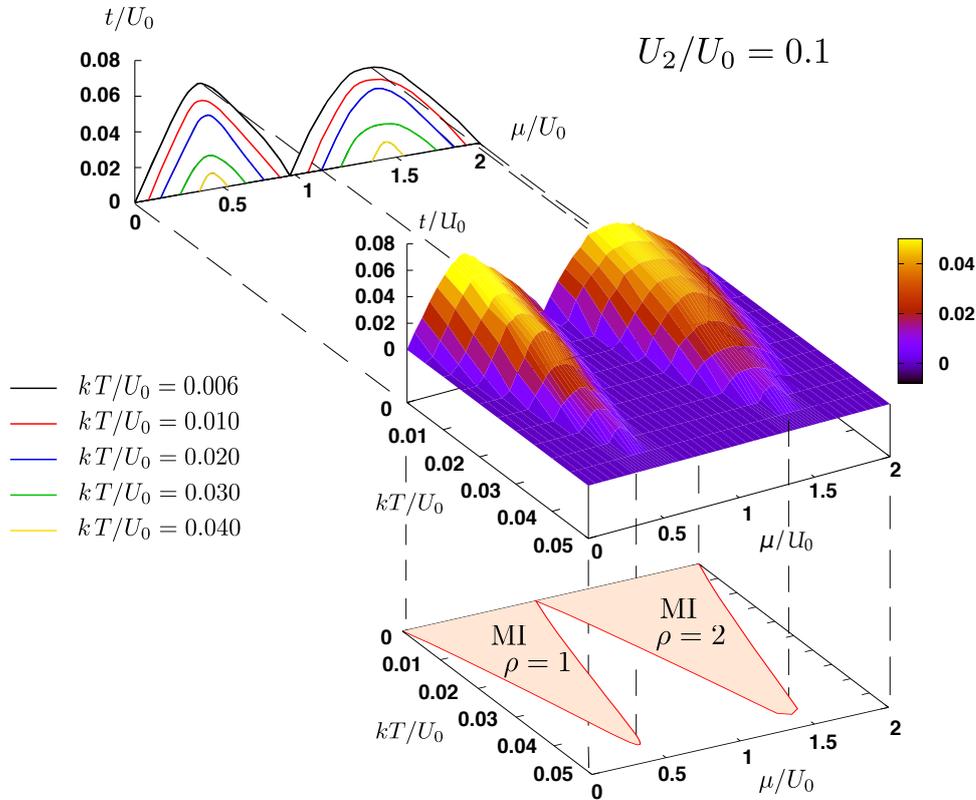


FIGURE 6.16 – Fonte des régions de Mott de densité $\rho = 1$ et $\rho = 2$ représentées en 3D avec la méthode de Monte Carlo quantique pour $U_2/U_0 = 0.1$ et $L = 8$. La projection du graphe 3D dans le plan $(\mu/U_0, t/U_0)$, en haut, correspond à la Figure 6.15. La projection du graphe 3D dans le plan $(\mu/U_0, kT/U_0)$, en bas, montre l'évolution de la base ($t/U_0 = 0$) des lobes de Mott en fonction de la température. Le gap à la base des lobes diminue quasi linéairement avec la température.

La dépolarisation de la région de Mott $\rho = 1$ implique que l'ordre ferromagnétique à longue portée existant dans le plan yz disparaisse dès lors que les effets thermiques interviennent. Cette interprétation est cohérente avec l'argument théorique qui interdit l'existence d'un ordre à longue

portée de symétrie continue pour un système macroscopique¹. Nous montrons sur la Figure 6.16 la fonte de ces lobes de Mott en 3D toujours avec $U_2/U_0 = 0.1$. Nous pouvons voir dans le plan du bas que le gap à la base des lobes diminue quasi linéairement avec la température.

Comparaison des diagrammes de phase avec $kT/U_0 = 0.03$

La Figure 6.17 montre les diagrammes de phase pour une température fixe, telle que $kT/U_0 = 0.03$, obtenus avec la méthode de Monte Carlo quantique (à gauche) et avec la méthode du champ moyen (à droite) pour $U_2/U_0 = 0.1$. La phase NBL et la phase superfluide sont toutes les deux des phases compressibles et la mesure directe de la densité superfluide ρ_s permet de les discriminer.

◦ Figure 6.17 à gauche: la phase liquide (NBL) et les régions de Mott ne sont pas polarisées, les populations sont équilibrées. D'autre part, la phase des fonctions d'onde présente un QLRO dans la phase superfluide. Cette phase présente aussi un QLRO magnétique dans le plan yz associée à une quasi-polarisation: les populations sont donc déséquilibrées pour les tailles étudiées (cf. Figure 6.20). Au fur et à mesure que la température a augmenté depuis zéro, les extrémités des lobes de Mott et la phase superfluide qui leur est contiguë ont été détruites par les fluctuations thermiques et le liquide est apparu. Pour $kT/U_0 = 0.03$, la phase NBL est donc la phase intermédiaire entre les phases de Mott et la phase superfluide.

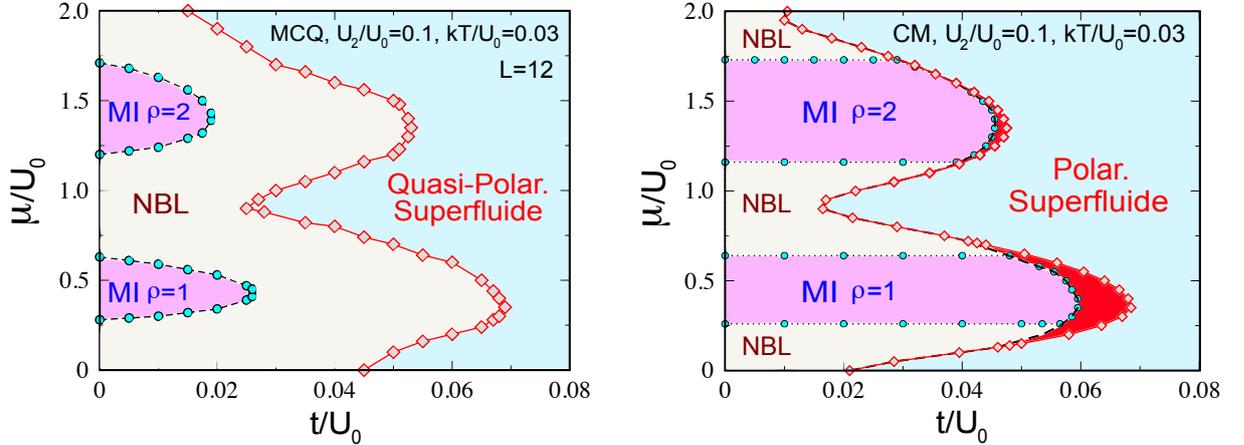


FIGURE 6.17 – Diagrammes de phase pour la température $kT/U_0 = 0.03$ obtenus avec la méthode de Monte Carlo quantique (à gauche) et avec la méthode du champ moyen (à droite) pour $U_2/U_0 = 0.1$. La méthode de Monte Carlo quantique montre qu’une région liquide (NBL) intermédiaire s’est développée entre les régions de Mott et la phase superfluide. La méthode du champ moyen est incapable de reproduire correctement ces résultats, car le terme cinétique n’est pas pris en compte dans les phases désordonnées (MI ou NBL). De plus, elle prédit l’existence de zones métastables (en rouge) et donc l’existence de transitions du premier ordre. Ceci contredit les résultats obtenus avec la méthode de Monte Carlo quantique.

1. cf. théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg à 2D à température finie [67, 68, 69].

◦ Figure 6.17 à droite: à la différence du cas en température nulle (*cf.* Figure 6.6), seule la délimitation entre la phase superfluide et les autres phases est en accord avec le diagramme en MCQ de gauche. La méthode du champ moyen ne permet pas d'obtenir les phases de Mott et la phase NBL de façon cohérente avec les résultats obtenus en Monte Carlo quantique. La raison de cet échec est que lorsque le système n'est pas superfluide, *i.e.* lorsque le paramètre d'ordre ψ est nul, le terme cinétique ne joue aucun rôle. Ainsi, le *crossover* entre la phase de Mott et le NBL est indépendant de t/U_0 et la démarcation de ces deux régions est invariablement la même, d'où l'horizontalité de leur démarcation sur cette figure.

Avec cette méthode, il est donc seulement possible de distinguer de façon satisfaisante la phase superfluide d'une phase désordonnée. Nous attirons l'attention du lecteur sur le fait que cette limite de la méthode du champ moyen sur site apparaît aussi à température nulle pour des systèmes en présence de désordre [12]. Dans ce cas, la région NBL est remplacée par un verre de Bose (Bose Glass) qui se développe lorsque le désordre croît (*cf.* Figure 4 de la Réf. [12]). Comme à température nulle, le champ moyen prédit une phase superfluide polarisée. Un autre point surprenant avec cette méthode concerne l'ordre des transitions. À température nulle, seule la transition MI-superfluide avec $\rho = 2$ est du premier ordre pour le rapport $U_2/U_0 = 0.1$. À température finie, les transitions de phases entre la phase superfluide et la phase désordonnée sont du premier ordre aux extrémités des lobes MI $\rho = 1$ et $\rho = 2$. La région de métastabilité associée à ces transitions est représentée en rouge sur cette figure. L'ordre de ces transitions est invalidé par la méthode de Monte Carlo quantique.

Nous pouvons donc conclure que cette méthode de champ moyen ne permet pas d'obtenir un diagramme de phase satisfaisant et est incapable de prédire correctement l'ordre des transitions à température finie.

Comparaison des diagrammes de phase pour les densités $\rho = 1$ et $\rho = 2$

Nous nous intéressons plus précisément aux diagrammes de phase pour les densités $\rho = 1$ et $\rho = 2$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. Afin de montrer les limites de la méthode du champ moyen à température finie, nous utilisons et comparons, ici encore, les deux méthodes. Nous représentons sur la Figure 6.18 les diagrammes de phase pour la densité $\rho = 1$ [graphes (a) et (b)] et pour la densité $\rho = 2$ [graphes (c) et (d)]. Les diagrammes de phase du haut [(a) et (c)] sont obtenus avec la méthode de Monte Carlo quantique et ceux du bas [(b) et (d)] sont obtenus avec celle du champ moyen.

◦ *Méthode de Monte Carlo quantique* [Figure 6.18 (a) et (c)]

À température nulle:

- la phase superfluide polarisée est une propriété d'une phase condensée de Bose-Einstein (BEC) ;
- la phase de Mott $\rho = 1$ est polarisée ;
- il existe une transition de phase quantique entre la phase de Mott et la phase superfluide polarisée ;
- le point jaune situé à la transition MI-superfluide $\rho = 2$ indique que la transition est du premier ordre.

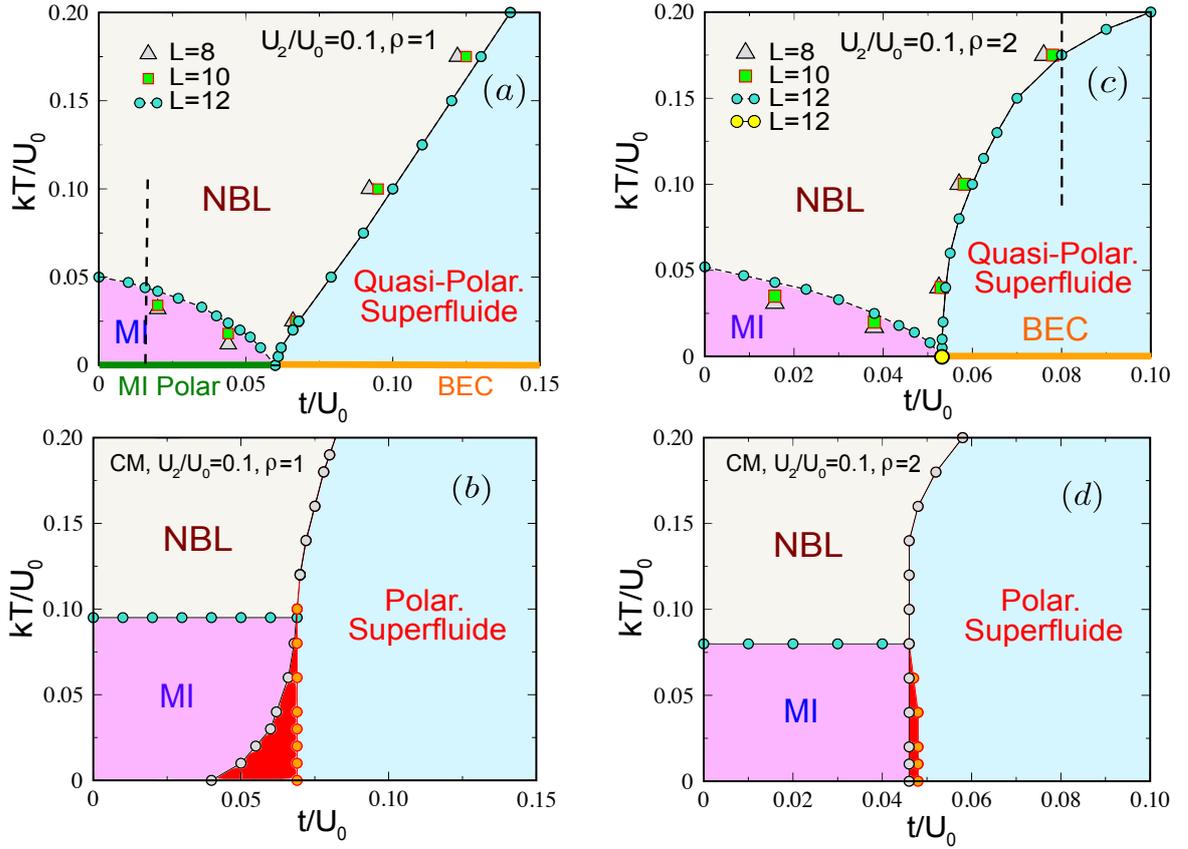


FIGURE 6.18 – Diagrammes de phase pour la densité $\rho = 1$ [(a) et (b)] et pour la densité $\rho = 2$ [(c) et (d)] avec le rapport $U_2/U_0 = 0.1$. Les diagrammes de phase du haut [(a) et (c)] sont obtenus avec la méthode de Monte Carlo quantique (MCQ) et ceux du bas [(b) et (d)] sont obtenus avec la méthode du champ moyen (CM). Avec la méthode de MCQ: lorsque $kT/U_0 = 0$, il existe une phase de Mott et une phase condensée de Bose-Einstein superfluide polarisée. La phase de Mott $\rho = 1$ est aussi polarisée et la transition MI-superfluide est du premier ordre pour $\rho = 2$ (point jaune). Pour les deux densités, une phase liquide intermédiaire non polarisée se développe lorsque $kT/U_0 \neq 0$ et la région MI disparaît peu à peu. La polarisation du Mott $\rho = 1$ et le BEC disparaissent dès lors que la limite de la température nulle n'est plus respectée. La phase superfluide présente une quasi-polarisation due aux effets de taille finie et aucune transition du premier ordre n'existe. Avec la méthode du CM: la délimitation des phases à température finie n'est pas cohérente avec la méthode de MCQ et les régions rouges sont les régions de métastabilité pour lesquelles les transitions sont du premier ordre. Cette méthode échoue à température finie.

À température finie:

- le condensat de Bose-Einstein disparaît dès lors que la limite de la température nulle n'est plus respectée;
- la phase superfluide n'est plus strictement polarisée, mais présente une quasi-polarisation;
- aucune forme de polarisation n'est observée dans les régions de Mott pour les températures étudiées;
- une phase intermédiaire désordonnée (NBL) se développe comme le prédit la théorie [3].

Remarques:

- *Dépolarisation de la région MI* $\rho = 1$: cette région est équivalente à un système de spin-1/2 sur réseau et est décrite par un modèle effectif de spin de Heisenberg anisotrope [cf. Eq. (5.20)] dont le couplage des spins est de l'ordre de t^2/U_0 . Dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$, nous avons vu que ce couplage faible rend la phase de Mott $\rho = 1$ très sensible aux effets thermiques. Cette sensibilité permet de comprendre pourquoi cette région se dépolarise très rapidement pour de faibles températures, typiquement pour $kT/U_0 > 0.006$ [Figure 6.19 (a)]. Du point de vue des bosons de Schwinger [75], l'absence de polarisation se traduit par le fait que $S_{zz}(\mathbf{R} \rightarrow \infty) = \sum_{\mathbf{r}} \langle S_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^z S_{\mathbf{r}}^z \rangle / L^2 = 0$, avec $S_{\mathbf{r}}^z = (\hat{n}_{0\mathbf{r}} - \hat{n}_{\Lambda\mathbf{r}}) / 2$ [cf. Eq. (5.18)]. Par conséquent, les deux populations sont équilibrées.
- *Quasi-polarisation de la phase superfluide*: les histogrammes mesurés dans cette phase sont quasi-polarisés (cf. Figure 6.20). La quasi-polarisation a déjà été discutée à la sous-section 5.2.4 pour le cas 1D à température nulle. Nous avons expliqué que, dans ce cas, les fluctuations quantiques empêchent l'ordre magnétique à longue portée, associé à la polarisation, de se développer dans la limite thermodynamique. Dans notre cas, ce sont les fluctuations thermiques qui empêchent cet ordre à longue portée de se développer dans la limite thermodynamique.

Indépendamment de nos mesures, nous savons par des arguments théoriques que, dans la phase superfluide à basse température, les fonctions de Green décroissent en loi de puissance $G(\mathbf{R}) \propto R^{-\eta}$ pour une distance R assez grande. Ce comportement est la signature d'un quasi-ordre à longue portée (QLRO), l'ordre à longue portée (LRO) étant seulement établi lorsque la température est nulle: le coefficient η variant de $1/4$ à 0 dans la phase superfluide lorsque la température tend vers zéro [124]. Il est bien entendu que lorsque la température est grande, le système adopte la phase NBL non polarisée et les fonctions de Green décroissent exponentiellement. Cependant, la petitesse des systèmes étudiés ($L \leq 14$) en Monte Carlo quantique ne permet pas de distinguer le QLRO du LRO, bien qu'il soit facile de distinguer la décroissance exponentielle. La quasi-polarisation de la phase superfluide est donc, là encore, associée à un QLRO et n'existe que pour des systèmes de taille finie.

Du point de vue des bosons de Schwinger, les spins présentent une certaine rigidité dans le plan yz qui tend à les aligner dans la même direction pour un système de taille finie $L \times L$ et donne donc une quasi-polarisation telle que $S_{zz}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \neq 0$. Lorsque la taille du système augmente, cette "aimantation" dans le plan yz va peu à peu pointer aléatoirement dans toutes les directions possibles et va donc changer la projection du spin suivant l'axe z . Dans la limite thermodynamique, "l'aimantation" totale sera donnée par la valeur moyenne de vecteurs d'orientation aléatoire et sera donc nulle: $S_{zz}(\mathbf{R} \rightarrow \infty) = 0$ dans ce cas et la polarisation disparaît.

- *Méthode du champ moyen* [Figure 6.18 (b) et (d)]

Les diagrammes sont composés de régions de Mott (MI), d'une phase liquide (NBL) et d'une phase superfluide polarisée (« Polar. Superfluide »). Les régions rouges sont les régions de métastabilité pour lesquelles les transitions sont du premier ordre. L'analyse effectuée en Monte

Carlo quantique ne montre pas l'existence de zones métastables. De plus, il est évident que cette méthode est incapable de déterminer correctement les différentes phases à température finie: le *crossover* MI-NBL ne tient pas compte du terme cinétique. Nous poursuivons donc notre étude en utilisant seulement la méthode de Monte Carlo quantique.

Transitions de phases

◦ *Crossover MI-NBL* $\rho = 1$ avec $t/U_0 = 0.02$

Cette coupe verticale est représentée par le trait vertical discontinu dans le diagramme de phase Figure 6.18 (a). Nous traçons sur la Figure 6.19 (a) l'évolution de $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ pour différentes valeurs de la température associées à ce *crossover*. À température nulle, soit $kT/U_0 = 0.0004$, la phase de Mott polarisée présente des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules 0 et Λ . La signature de ces mouvements est le plateau de la fonction de Green anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2)$. Toujours dans la région de Mott, lorsque $0.01 \leq kT/U_0 \leq 0.045$, la fonction de Green $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ décroît exponentiellement: les effets thermiques ont détruit les mouvements cohérents anticorrélés. Ceci confirme la grande sensibilité de cette phase par rapport aux effets thermiques. Aucun ordre n'est observé dans l'intervalle de température étudié, ce qui n'exclut pas qu'un quasi-ordre puisse exister pour de plus faibles températures. Le *crossover* a lieu lorsque $kT/U_0 \sim 0.045$. La fonction de Green $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ décroît exponentiellement dans toute la phase NBL.

◦ *Transition de phase superfluide-NBL*

Lors de la transition superfluide-NBL ayant lieu à température non nulle, nous montrons que:

- A. les fonctions de Green $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ passent d'une décroissance en loi de puissance à une décroissance exponentielle;
- B. les histogrammes se dépolarisent;
- C. le saut universel et la chaleur spécifique permettent de déterminer la température critique.

À titre d'exemple, considérons la transition de phase superfluide-NBL $\rho = 2$ avec $U_2/U_0 = 0.1$ et $t/U_0 = 0.08$. Cette coupe est représentée par le trait vertical discontinu de la Figure 6.18 (c), où la mesure de ρ_s permet de voir que, dans ce cas, la transition a lieu pour $kT/U_0 \simeq 0.175$.

A. Concernant le premier point, la Figure 6.19 (b) montre l'évolution de $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et de $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) \equiv G_a(\mathbf{R})$ avec ces paramètres. Bien que le changement de la pente de ces courbes soit progressif, nous pouvons noter que celui-ci apparaît environ à la transition. Sur cette figure, $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et $G_a(\mathbf{R})$ décroissent en loi de puissance dans la phase superfluide lorsque $kT/U_0 < 0.175$ et tendent vers une décroissance exponentielle dans la phase NBL, soit lorsque kT/U_0 augmente depuis $kT/U_0 \simeq 0.175$. La fonction de Green $G_0(\mathbf{R})$, non tracée, suit le même comportement.

B. Concernant la dépolarisation des histogrammes: la quasi-polarisation de la phase superfluide disparaît systématiquement lorsque le système adopte la phase NBL, soit à la température de transition T_c . Nous montrons sur la Figure 6.20 l'évolution de l'historgramme $P(\rho_\Lambda)$ en fonction

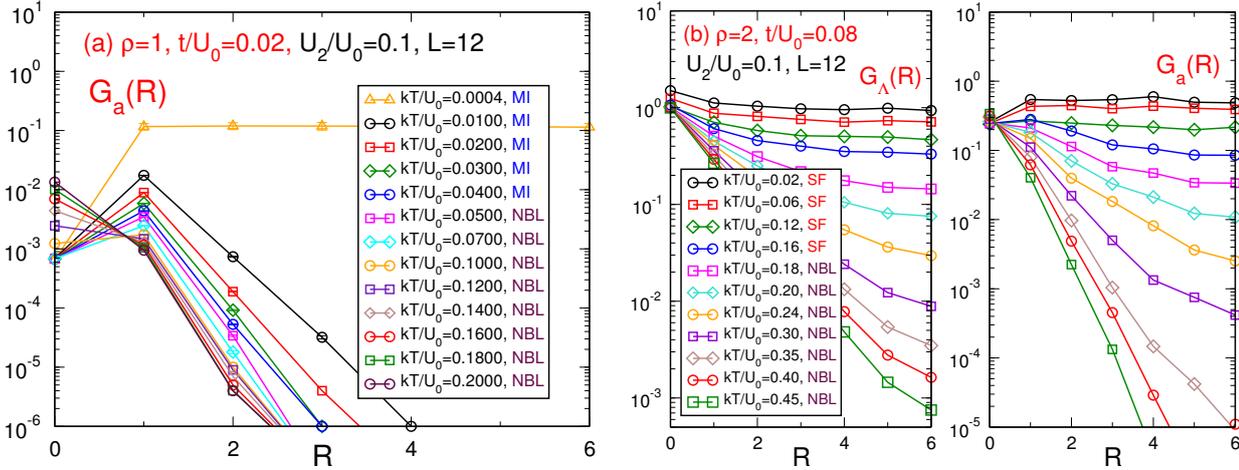


FIGURE 6.19 – En (a): fonction de Green anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) \equiv G_a(\mathbf{R})$ en échelle semi-log pour différentes températures lors du passage de la région MI vers la phase NBL avec les paramètres $U_2/U_0 = 0.1$, $L = 12$, $t/U_0 = 0.02$ et $\rho = 1$. La fonction $G_a(\mathbf{R})$ décroît exponentiellement $\forall T$, excepté dans la limite de température nulle $kT/U_0 = 0.0004$. En (b): fonction de Green individuelle $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et anticorrélée $G_a(\mathbf{R})$ en échelle semi-log pour différentes températures lors du passage de la phase superfluide vers la phase NBL avec les paramètres $U_2/U_0 = 0.1$, $L = 12$, $t/U_0 = 0.08$ et $\rho = 2$. La transition a lieu pour $kT/U_0 \simeq 0.175$. Dans la phase superfluide, $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et $G_a(\mathbf{R})$ décroissent en loi de puissance alors que ces fonctions décroissent exponentiellement dans la phase NBL, ce qui signifie qu'aucun mouvement cohérent n'existe dans la phase NBL.

de la température associée à cette coupe. Nous voyons sur cette figure que le système est quasi-polarisé pour $kT/U_0 < 0.175$ et l'histogramme se centre lors de la transition pour $kT_c/U_0 \sim 0.175$. Les deux populations restent équilibrées dans toute la phase NBL. Dans la phase superfluide, deux quasi-ordres à longue portée existent: celui lié à la symétrie globale de phase $U(1)$ associée à la superfluidité standard et celui lié à l'arrangement des spins dans le plan yz , soit la quasi-polarisation. Ces deux QLRO disparaissent lorsque le système devient liquide. Dans la phase superfluide, les spins, corrélés dans le plan yz , s'orientent aléatoirement dans l'espace lorsque la dépolarisation se produit.

C. Enfin, nous montrons que le saut universel satisfait par ρ_s , issu de la classe d'universalité de Berezinsky-Kosterlitz-Thouless (BKT), et la chaleur spécifique C permettent de déterminer la température critique T_c . Lors d'une transition BKT, la densité superfluide ρ_s satisfait la contrainte du saut universel à la température de transition T_c [125]. Dans notre cas, cette contrainte se traduit par la relation $\rho_s(T_c) = kT/\pi t$, avec k la constante de Boltzmann et t le paramètre de saut du hamiltonien. La température à la transition T_c peut donc être déterminée par l'intersection de ρ_s avec la droite $kT/\pi t$. Cette détermination graphique de la transition est montrée sur la Figure 6.21 pour différentes valeurs de t/U_0 avec le rapport $U_2/U_0 = 0.1$ et $\rho = 2$. La classe d'universalité BKT et le saut universel sont validés par une méthode totalement indépendante: la température T_c à la transition est déterminée par le maximum de la chaleur spécifique C . En effet, la valeur de C diverge à la transition dans la limite thermodynamique.

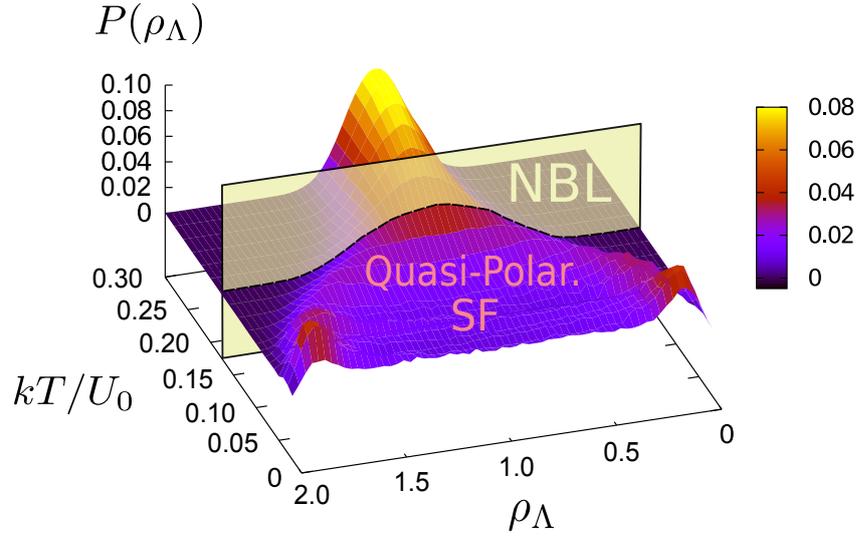


FIGURE 6.20 – Histogramme $P(\rho_\Lambda)$ en fonction de la température lors de la transition de la phase superfluide vers la phase NBL avec $U_2/U_0 = 0.1$, $t/U_0 = 0.08$, $L = 8$ et $\rho = 2$. Lorsque $kT/U_0 < 0.175$, le système superfluide présente une quasi-polarisation. Lorsque $kT/U_0 > 0.175$, le système adopte une phase liquide de Bose normal non polarisée. La température pour laquelle la quasi-polarisation disparaît est donc approximativement la même que celle de la transition.

Dans le cas d'un système de taille finie, C atteint son maximum à la transition. Nous avons utilisé un système de petite taille ($L = 8$ pour la Figure 6.21) car C est extrêmement difficile à calculer à basse température pour $U_2 > 0$ pour des tailles plus grandes.

t/U_0	$T_c(\rho_s)$	$T_c(C_{\max})$
0.06	1.49 ± 0.10	1.67 ± 0.15
0.07	1.82 ± 0.05	1.85 ± 0.15
0.08	1.99 ± 0.05	2.00 ± 0.15
0.09	2.10 ± 0.05	2.10 ± 0.20
0.10	2.19 ± 0.05	2.20 ± 0.20

TABLE 6.1 – Valeurs de la température à la transition pour différentes valeurs de t/U_0 avec $U_2/U_0 = 0.1$ et $L = 8$. La température critique $T_c(\rho_s)$ est obtenue *via* le saut universel alors que $T_c(C_{\max})$ est obtenue *via* le maximum de C : les valeurs sont en bon accord. L'hypothèse du saut universel est donc bien valide et le même comportement est observé pour la transition superfluide-NBL avec $\rho = 1$. Les données sont extraites de la Figure 6.21.

Le Tableau 6.1 permet de comparer les valeurs de T_c obtenues par le saut universel et par le maximum de C . Les valeurs de la température critique T_c obtenues par les deux méthodes indépendantes sont en bon accord: l'hypothèse du saut universel est donc bien valide et la nature de la transition est bien du type BKT.

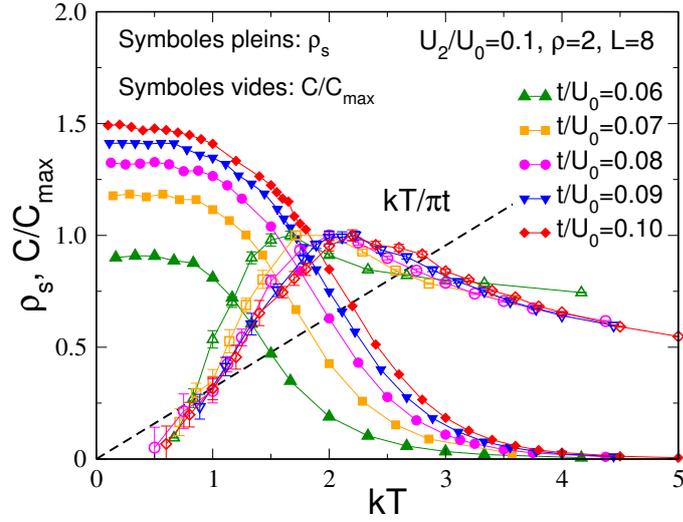


FIGURE 6.21 – Densité superfluide ρ_s et chaleur spécifique C en fonction de la température pour différentes valeurs de t/U_0 avec $U_2/U_0 = 0.1$, $\rho = 2$ et $L = 8$. Selon le saut universel pour les transitions du type BKT, la température à la transition T_c est déterminée par l'intersection de ρ_s avec la droite $kT/\pi t$. Il est possible de déterminer T_c indépendamment en cherchant la température pour laquelle $C(T)$ atteint son maximum, indicateur de la transition de phase. Ces deux méthodes sont cohérentes (cf. Tableau 6.1).

Comme nous l'avons mentionné, ces données sont obtenues pour un système de petite taille de côté $L = 8$. La Figure 6.22 montre les effets de taille finie sur la densité superfluide pour deux valeurs de t/U_0 . Il n'est pas surprenant de voir que la pente de ces courbes à la transition augmente lorsque la taille du système augmente. La détermination de la température critique par le saut universel est donc plus précise pour des grandes tailles. En effet, lorsque $L > 8$, la barre d'erreur des données de C augmente significativement et ne permet plus de déterminer le maximum de C proprement. Il n'est donc plus possible de déterminer la température critique T_c par la méthode du maximum de C . Nous observons le même comportement pour la transition superfluide-NBL avec la densité $\rho = 1$.

◦ *Coupe du diagramme de phase à température fixée $kT/U_0 = 0.02$*

Revenons au diagramme de phase Figure 6.15. La Figure 6.23 correspond à une coupe verticale de ce diagramme avec $t/U_0 = 0.035$ pour une température fixée $kT/U_0 = 0.02$. Nous traçons sur cette figure la densité ρ , la densité superfluide ρ_s et la compressibilité locale $\tilde{\kappa}$ normalisée en fonction de μ/U_0 . Cette coupe traverse la phase superfluide, la phase NBL et les phases MI $\rho = 1$ et $\rho = 2$. Lors du passage de la région MI vers la région NBL, la densité ρ et la compressibilité locale $\tilde{\kappa}$ varient continûment et aucune symétrie n'est brisée, ceci est la signature d'un *crossover*. De plus, la densité prend une valeur quasi entière seulement dans la phase MI et la compressibilité locale est constante dans cette phase. Dans la phase NBL, la densité ne prend pas une valeur entière (à 1% de la densité près) et la compressibilité locale varie. Dans la phase superfluide, la densité superfluide est non nulle et la compressibilité locale est plus grande que dans les deux autres phases. Il est clair qu'aucune discontinuité n'existe sur cette figure et que par conséquent, aucune transition de phase du premier ordre n'existe contrairement aux prédictions du champ moyen.

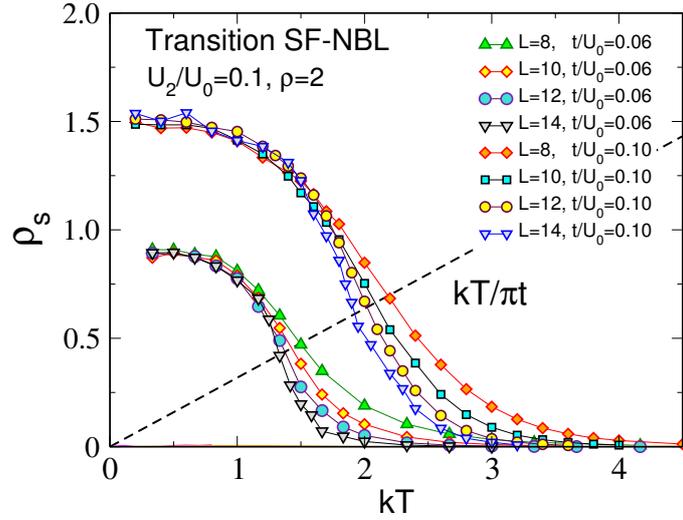


FIGURE 6.22 – Densité superfluide ρ_s lors de la transition superfluide-NBL en fonction de la température pour $t/U_0 = 0.06$ et $t/U_0 = 0.10$ avec $U_2/U_0 = 0.1$ et $\rho = 2$ pour les tailles $L = \{8, 10, 12, 14\}$. La pente de ρ_s à la transition augmente systématiquement lorsque la taille du système augmente. La température critique $T_c(\rho_s)$, donnée par l'intersection de la courbe de ρ_s avec la droite $kT/\pi t$, est donc déterminée de façon plus précise. Nous observons le même comportement pour la transition superfluide-NBL avec $\rho = 1$.

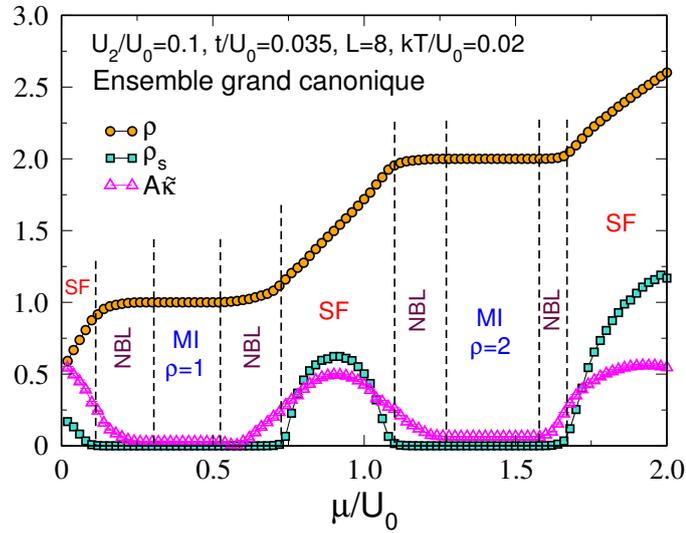


FIGURE 6.23 – Évolution de la densité ρ , de la densité superfluide ρ_s et de la compressibilité locale $\tilde{\kappa}$ en fonction de μ/U_0 avec $U_2/U_0 = 0.1$, $t/U_0 = 0.035$ et $L = 8$ pour une température fixée $kT/U_0 = 0.02$. Cette coupe passe par la phase superfluide ($\rho_s \neq 0$), la phase NBL ($\rho_s = 0$ et $\tilde{\kappa} \neq cste$) et les phases MI ($\rho_s = 0$ et $\tilde{\kappa} = cste$). La compressibilité $\tilde{\kappa}$ est multipliée par un facteur arbitraire A pour une meilleure visibilité.

Nous avons montré, lors de l'analyse 2D à température nulle, que la transition MI-superfluide à densité constante $\rho = 2$ est du premier ordre lorsque $U_2/U_0 \in]0, 0.2]$ et est du second ordre lorsque $U_2/U_0 = 0$ ou $U_2/U_0 \in]0.2, 1.0]$ (*cf.* Figure 6.13). À température finie, aucun signe d'une transition du premier ordre n'a été observé pour les températures étudiées. La discontinuité disparaît très rapidement et est très sensible aux effets thermiques.

En conclusion, la température finie a un impact majeur sur les transitions du premier ordre et sur les mouvements cohérents anticorrélés qui disparaissent très rapidement lorsque la température augmente depuis zéro. Pour une gamme de températures plus élevées, les effets thermiques détruisent la phase de Mott et la phase superfluide pour donner naissance à un liquide de Bose normal, phase compressible désordonnée. Nous allons maintenant traiter le cas $U_2/U_0 < 0$ à température non nulle qui a pour particularité de faire intervenir des mouvements anticorrélés très présents dans les phases de Mott lorsque la température est nulle.

6.2.2 Brève discussion du cas $U_2/U_0 < 0$

À la sous-section 6.1.1, nous avons montré que les phases ne présentent aucune polarisation à température nulle: les deux populations de bosons sont équilibrées. D'autre part, toutes les transitions sont du second ordre et des mouvements cohérents de paires anticorrélées existent dans les phases de Mott. Nous nous intéressons aux effets thermiques en suivant le même plan que celui du cas précédent. Pour cela, nous n'utiliserons que la méthode de Monte Carlo quantique, seule méthode satisfaisante à température finie.

Nature des phases et fonte des régions de Mott

La Figure 6.24 montre l'évolution des régions de Mott de densités $\rho = 1$ et $\rho = 2$ pour différentes températures avec $U_2/U_0 = -0.1$. Cette figure est obtenue en effectuant des coupes verticales dans le plan $(t/U_0, \mu/U_0)$ dans l'ensemble grand canonique. La région MI avec une densité $\rho = 1$ ($\rho = 2$) est détectée lorsque la densité superfluide est nulle et lorsque la densité totale est telle que $\rho \in [0.99, 1.01]$ ($\rho \in [1.98, 2.02]$).

Les lobes MI disparaissent progressivement lorsque la température augmente et disparaissent totalement lorsque $kT/U_0 \simeq 0.05$. Ces résultats sont très similaires à ceux du cas $U_2/U_0 > 0$ (*cf.* Figure 6.15). De même qu'à température nulle, aucune polarisation n'est observée dans les régions de Mott: les histogrammes $P(\rho_0) = P(\rho_\Lambda)$ sont centrés en $\rho/2$ et $\rho_0 = \rho_\Lambda = \rho/2$. En dehors des régions de Mott, le système est soit liquide (NBL), soit superfluide. Ces deux phases aussi ne sont pas polarisées.

Nous allons directement discuter les diagrammes de phase de la Figure 6.25 pour les densités $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec $U_2/U_0 = -0.1$. Pour les deux densités, il existe une transition de phase quantique du second ordre lorsque $kT/U_0 = 0$ entre la phase MI et la phase BEC superfluide. Comme le cas $U_2/U_0 > 0$, lorsque la température augmente depuis zéro, une phase intermédiaire désordonnée, ou NBL, se développe. Pour les deux densités, le condensat de Bose-Einstein disparaît dès lors que la limite de la température nulle n'est plus respectée et aucune polarisation n'est observée. Ces diagrammes de phase sont similaires à ceux du cas $U_2/U_0 = 0.1$ (*cf.* Figure 6.18), notamment pour la densité $\rho = 1$ pour laquelle le terme de conversion n'a presque aucune influence.

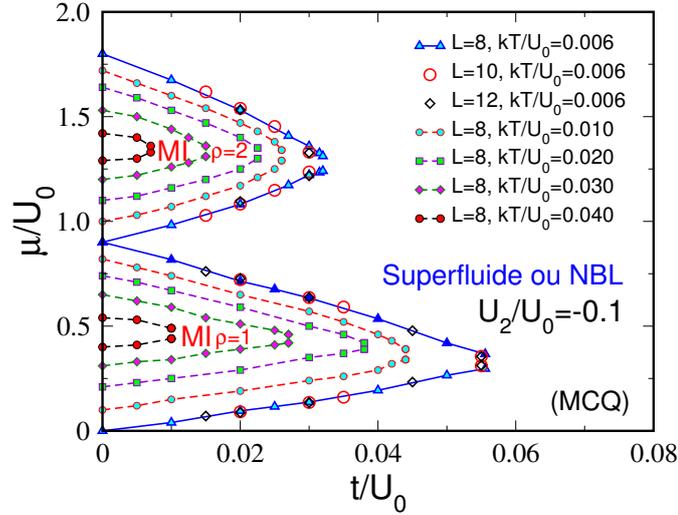


FIGURE 6.24 – Évolution des régions de Mott de densités $\rho = 1$ et $\rho = 2$ en fonction de la température pour un système carré $L \times L$ de trois tailles différentes en Monte Carlo quantique avec $U_2/U_0 = -0.1$. Dans toutes les phases de ce diagramme et pour toutes les températures les deux populations sont équilibrées. Les régions de Mott disparaissent progressivement lorsque la température augmente et finissent par disparaître totalement lorsque $kT/U_0 \simeq 0.05$. Dans la limite de température nulle ($kT/U_0 = 0.006$ sur le graphe), seule la phase superfluide existe en dehors des lobes de Mott et il existe une transition de phase. Lorsque $kT/U_0 > 0.006$, un liquide de Bose normal (NBL) se développe progressivement entre les lobes et la délimitation en pointillés des régions de Mott avec la phase voisine symbolise le *crossover* lorsque la phase voisine est la phase liquide. Ce graphe est très similaire à celui du cas $U_2/U_0 = 0.1$ (cf. Figure 6.15).

Transitions de phases

- *Crossover MI-NBL* $\rho = \{1, 2\}$ avec $t/U_0 = 0.02$

Ces coupes verticales sont représentées par les traits verticaux discontinus dans les diagrammes de phase Figure 6.25 (a) et (b). Nous traçons sur la Figure 6.26 l'évolution de $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ pour différentes valeurs de la température lors de ce *crossover* pour les densités $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b). Lorsque la limite de température nulle est satisfaite, ici $kT/U_0 = 0.0004$, $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ atteint rapidement un plateau tel que $G_{Anticorr}(\mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_0 \rho_\Lambda$, signature de la présence de mouvements cohérents anticorrélés et d'un ordre ferromagnétique à longue portée, de type Ising, suivant l'axe x . Lorsque $kT/U_0 \geq 0.01$, la fonction $G_{Anticorr}(\mathbf{R})$ décroît exponentiellement: il n'existe plus de mouvements cohérents anticorrélés, ni d'ordre de spin. Cette décroissance, observée pour de faibles températures telles que $kT/U_0 \sim 0.01$, montre que les effets thermiques détruisent rapidement l'ordre de spin. L'équilibre des deux populations est donc d'origine thermique, à l'inverse de la limite de température nulle pour laquelle cet équilibre est assuré par un ordre de spin à longue portée suivant l'axe x . Aucun ordre de spin n'existe dans ces phases pour les températures finies étudiées, ce qui n'exclut pas qu'un ordre puisse exister pour de très faibles températures, comme nous le supposons (cf. Tableau 3.1).

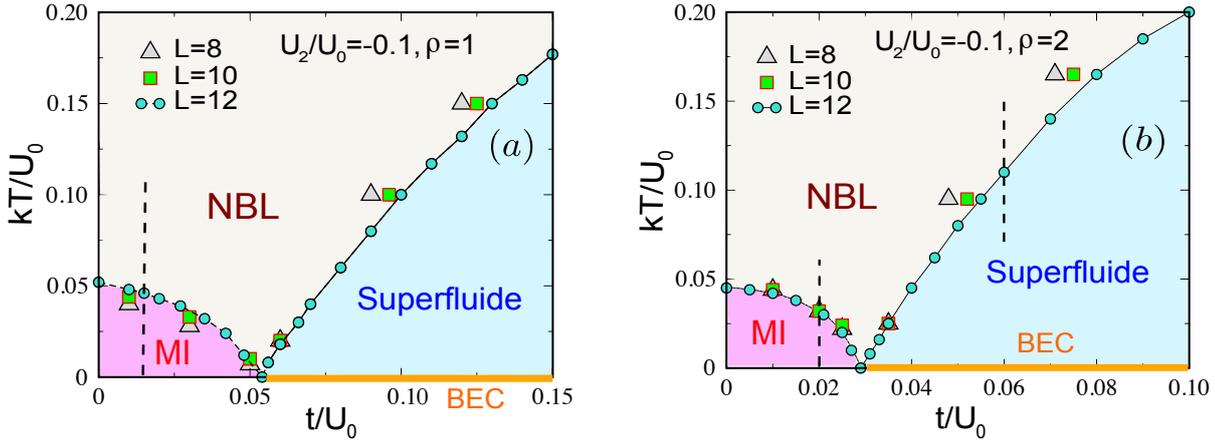


FIGURE 6.25 – Diagrammes de phase pour les densités $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec le rapport $U_2/U_0 = -0.1$ obtenus avec la méthode de Monte Carlo quantique. Lorsque $kT/U_0 = 0$, il existe pour les deux densités une phase de Mott et une phase superfluide, propriété d’une phase condensée de Bose-Einstein (BEC). La transition de phase est continue. Une phase liquide intermédiaire non polarisée se développe lorsque $kT/U_0 \neq 0$ et les régions MI disparaissent peu à peu. Le condensat de Bose-Einstein disparaît lorsque les effets thermiques interviennent. La transition de phase superfluide-NBL est du type BKT et le passage de la région de Mott vers la phase NBL est un *crossover*: aucune discontinuité n’est observée. Les traits verticaux en pointillés situés à $t/U_0 = 0.02$ pour les deux densités correspondent aux coupes de la Figure 6.26 et le trait vertical en pointillés situé à $t/U_0 = 0.06$ pour $\rho = 2$ correspond à la coupe de la Figure 6.27.

◦ Transition de phase superfluide-NBL

Quelle que soit la densité, cette transition ayant lieu à température non nulle est de la classe d’universalité de Berezinsky-Kosterlitz-Thouless (BKT). En effet, la température critique déterminée, d’une part, par l’intersection de ρ_s avec la droite $kT/\pi t$ et déterminée, d’autre part, par le maximum de la capacité thermique C sont en bon accord (*cf.* Tableau 6.2). L’accord de ces deux méthodes indépendantes confirme que la nature de la transition est bien du type BKT.

t/U_0	$T_c(\rho_s)$	$T_c(C_{\max})$
0.06	1.85 ± 0.05	1.75 ± 0.10
0.07	2.00 ± 0.05	2.00 ± 0.10
0.08	2.10 ± 0.05	2.05 ± 0.05
0.09	2.14 ± 0.05	2.16 ± 0.05
0.10	2.18 ± 0.05	2.15 ± 0.05

TABLE 6.2 – Température à la transition superfluide-NBL pour différentes valeurs de t/U_0 avec $U_2/U_0 = -0.1$ et $L = 12$. La température critique $T_c(\rho_s)$ est obtenue *via* le saut universel alors que $T_c(C_{\max})$ est obtenue *via* le maximum de C : les valeurs sont en bon accord. L’hypothèse du saut universel est donc bien valide et le même comportement est observé pour la transition superfluide-NBL avec $\rho = 1$. Similaire au Tableau 6.1.

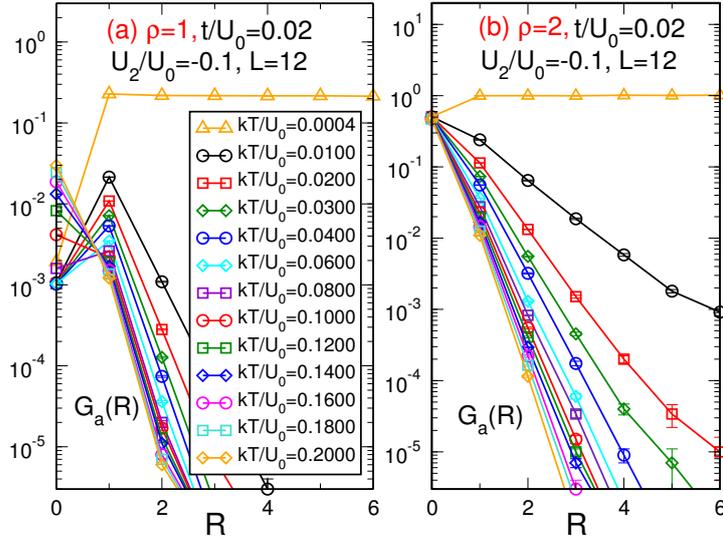


FIGURE 6.26 – Fonction de Green anticorrélée $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) \equiv G_a(\mathbf{R})$ en échelle semi-log pour différentes températures lors du *crossover* MI-NBL avec $U_2/U_0 = -0.1$, $t/U_0 = 0.02$ et $L = 12$ pour les densités $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b). Pour les deux densités, cette fonction décroît exponentiellement $\forall kT/U_0 \geq 0.01$, ce qui n'exclut pas qu'un ordre à longue portée puisse exister pour de très faibles températures dans la région de Mott. Pour les températures étudiées, un ordre à longue portée existe seulement à température nulle, ici $kT/U_0 = 0.0004$, signalant la présence de mouvements cohérents anticorrélés et d'un ordre ferromagnétique à longue portée, de type Ising, suivant l'axe x .

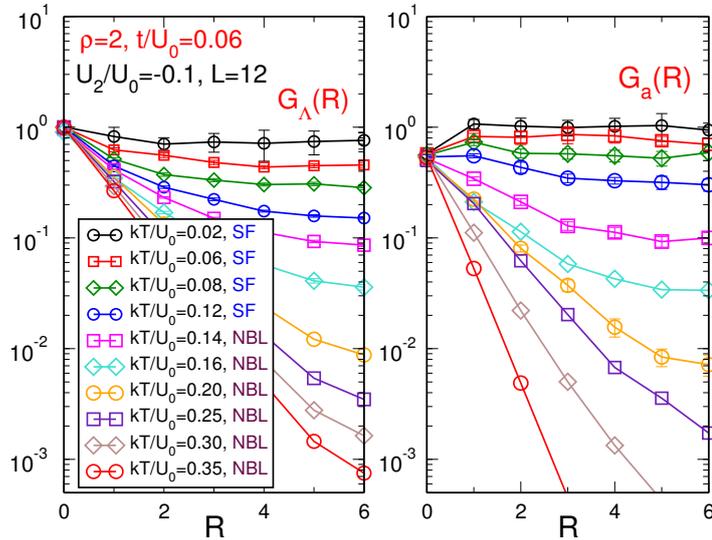


FIGURE 6.27 – Fonction de Green individuelle $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et anticorrélée $G_a(\mathbf{R})$ en échelle semi-log pour différentes températures lors du passage de la phase superfluide vers la phase NBL avec les paramètres $U_2/U_0 = -0.1$, $L = 12$, $t/U_0 = 0.06$ et $\rho = 2$. La transition a lieu vers $kT/U_0 \simeq 0.125$.

Nous traçons sur la Figure 6.27 l'évolution de $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et de $G_{Anticorr}(\mathbf{R}) \equiv G_a(\mathbf{R})$ pour différentes valeurs de la température lors de la transition superfluide-NBL avec $\rho = 2$ (cf. trait vertical de la Figure 6.25 (b) en $t/U_0 = 0.06$). Dans la phase superfluide à température finie, $G_\Lambda(\mathbf{R})$ et $G_a(\mathbf{R})$ décroissent en loi de puissance alors que ces fonctions décroissent exponentiellement dans la phase NBL, ce qui signifie qu'aucun mouvement cohérent n'existe dans la phase NBL. Nous avons précédemment montré que, dans la limite de température nulle, la phase superfluide condensée de Bose-Einstein, présente un ordre magnétique, supposé de type Ising suivant l'axe x . À température finie, la décroissance de $G_a(\mathbf{R})$ en loi de puissance indique que cette organisation magnétique persiste dans la phase superfluide et disparaît lorsque le système adopte la phase NBL.

6.2.3 Conclusion de la Section 6.2: étude 2D à température finie

En 2D à température nulle, la méthode du champ moyen et la méthode de Monte Carlo quantique sont en bon accord qualitatif:

- la superfluidité est une propriété d'une phase condensée de Bose-Einstein ;
- lorsque $U_2/U_0 > 0$, la phase MI $\rho = 1$ et la phase superfluide sont polarisées et la transition de phase MI-superfluide $\rho = 2$ est du premier ordre lorsque $U_2/U_0 \in]0, 0.2]$. Toutes les autres transitions sont du second ordre. La polarisation est associée à un ordre ferromagnétique à longue portée dans le plan yz ;
- lorsque $U_2/U_0 < 0$, toutes les phases sont équilibrées et des mouvements anticorrélés de paires de particules 0 et Λ existent. Un ordre ferromagnétique à longue portée, de type Ising, suivant l'axe x existe dans les phases de Mott et est supposé exister dans la phase superfluide.

À température finie, le condensat de Bose-Einstein est immédiatement détruit par les fluctuations thermiques: aucun ordre à longue portée de symétrie continue ne peut exister. De plus, quel que soit le signe de U_2/U_0 , les effets thermiques détruisent très rapidement tous les mouvements cohérents anticorrélés présents à température nulle.

Par ailleurs, une nouvelle phase désordonnée, de même symétrie que la phase de Mott mais compressible apparaît: cette phase est un liquide de Bose normal. Dans toutes les régions de Mott, ainsi que dans la phase NBL, les effets thermiques équilibrent les populations.

Plus précisément, pour $U_2/U_0 > 0$, la polarisation de la phase de Mott $\rho = 1$, associée à un ordre magnétique à longue portée dans le plan yz , disparaît car les excitations thermiques détruisent rapidement les corrélations spin-spin. Nous observons toutefois une quasi-polarisation de la phase superfluide associée à un quasi-ordre à longue portée. Cette quasi-polarisation, qui n'existe que pour des systèmes de taille finie, présente un intérêt particulier pour les études expérimentales qui mettent en jeu des systèmes de taille limitée.

Pour $U_2/U_0 < 0$, les effets de température finie détruisent très rapidement l'ordre ferromagnétique suivant l'axe x des phases de Mott. Les régions de Mott étudiées ne présentent donc aucun ordre magnétique. Cependant, l'ordre magnétique observé dans la phase superfluide à température nulle, supposé être un LRO de type Ising, persiste dans toute la phase superfluide et disparaît lorsque le système adopte la phase NBL.

Nous avons montré que le passage de la région de Mott vers le NBL est un « crossover » et il nous a fallu fixer un critère quantitatif arbitraire afin de discriminer ces deux phases désordonnées. Par ailleurs, la transition superfluide-NBL est du type BKT et la température de transition est déterminée à la fois par le critère du saut universel et par le maximum de la chaleur spécifique. Aucune transition du premier ordre n'a été observée.

Un autre point important est que la méthode du champ moyen sur site échoue à température finie. En effet, cette méthode ne prenant pas en compte le terme cinétique dans les phases désordonnées est incapable de déterminer correctement la région de Mott et la région NBL. Dans la bibliographie, le même problème intervient, à température nulle en présence de désordre, pour discriminer la phase de Mott du verre de Bose [12].

Enfin, les particularités liées aux effets de conversions du spin, avec $|U_2|/U_0 = 0.1$, semblent très fragiles face aux effets thermiques. Il risque donc d'être très difficile de les observer dans des systèmes expérimentaux pour lesquels les effets thermiques ont toujours une influence.

Quatrième partie

Bosons de spin-1 sur réseau optique 2D
à température nulle

Chapitre 7

Étude en champ moyen

Dans cette partie, nous présentons nos résultats concernant l'étude du système de spin-1 décrit par le hamiltonien \mathcal{H}_{spin1}^f [Eq. (3.30)] avec la méthode du champ moyen à température nulle. Comme pour le modèle de bosons de spin-1/2, trois cas distincts seront abordés: le cas sans conversion $U_2/U_0 = 0$, puis le cas avec conversions du spin tel que $U_2/U_0 < 0$, dit « ferromagnétique » et, enfin, le cas $U_2/U_0 > 0$, dit « antiferromagnétique » du fait du signe des interactions spin-spin sur site. Pour ces trois cas, nous présentons le diagramme de phase du système et discutons les transitions de phases. Nous précisons que cette étude, réalisée à $d = 2$ dimensions, donne quantitativement les mêmes résultats quelle que soit la dimension du système à un facteur d près¹. Les résultats présentés dans toute cette section sont très similaires à ceux obtenus par Pai *et al.* avec la même méthode [9].

7.1 Diagramme de phase et quantités physiques mesurées

L'équilibre du système est obtenu en minimisant l'énergie libre par rapport au paramètre d'ordre $\boldsymbol{\psi} = (\psi_-, \psi_0, \psi_+)$ (*cf.* Section 3.3). À température nulle, l'énergie libre est égale à l'énergie de l'état fondamental \mathcal{E}_g . Nous rappelons que:

- lorsque l'énergie minimum \mathcal{E}_g est obtenue pour $\boldsymbol{\psi} = 0$, la fraction condensée $\psi^2 = \psi_-^2 + \psi_0^2 + \psi_+^2$, égale à la densité superfluide ρ_s selon cette méthode, est nulle et le nombre total de particules sur site ne fluctue pas: le système adopte une phase isolante de Mott (MI) ;
- lorsque l'énergie minimum \mathcal{E}_g est obtenue pour $\boldsymbol{\psi} \neq 0$, la fraction condensée ψ^2 est non nulle et le système adopte la phase superfluide avec la densité superfluide $\rho_s = \psi^2$.

Le diagramme de phase dans le plan $(t/U_0, \mu/U_0)$ est obtenu en déterminant la valeur de $\boldsymbol{\psi}$ minimisant l'énergie interne du système pour chaque couple $(t/U_0, \mu/U_0)$. Les quantités calculables avec cette méthode sont uniquement des quantités sur site. Ces quantités sont:

- les densités des particules de spin $\sigma = \{-1, 0, +1\}$ telles que $\rho_\sigma = \langle \varphi_g | \hat{n}_{\sigma i} | \varphi_g \rangle = \langle \varphi_g | \hat{a}_{\sigma i}^\dagger \hat{a}_{\sigma i} | \varphi_g \rangle$, avec $|\varphi_g\rangle$ le vecteur d'onde de l'état fondamental, ainsi que la densité totale $\rho = \rho_- + \rho_0 + \rho_+$;

1. La quantité t/U_0 est divisée par le facteur d .

- les densités superfluides de chaque espèce $\rho_{s-} = \psi_-^2$, $\rho_{s0} = \psi_0^2$ et $\rho_{s+} = \psi_+^2$, ainsi que la densité superfluide totale $\rho_s = \rho_{s-} + \rho_{s0} + \rho_{s+}$;
- les corrélations densité-densité sur site, définies par $C_{\sigma\sigma'}(0) = \langle \varphi_g | \hat{n}_{\sigma i} \hat{n}_{\sigma' i} | \varphi_g \rangle$, avec les spins σ et σ' égaux à $\{-1, 0, +1\}$;
- les valeurs moyennes des corrélations spin-spin sur site:

$$\begin{cases} F_{xx}(0) &= \langle \varphi_g | (\hat{F}_i^x)^2 | \varphi_g \rangle \\ F_{yy}(0) &= \langle \varphi_g | (\hat{F}_i^y)^2 | \varphi_g \rangle \\ F_{zz}(0) &= \langle \varphi_g | (\hat{F}_i^z)^2 | \varphi_g \rangle \end{cases} \quad (7.1)$$

avec \hat{F}_i^x , \hat{F}_i^y et \hat{F}_i^z les composantes de l'opérateur de spin $\hat{\mathbf{F}}$, défini par $\hat{\mathbf{F}} = \sum_{\sigma, \sigma'} \hat{a}_{\sigma}^{\dagger} \hat{\mathbf{J}}_{\sigma\sigma'} \hat{a}_{\sigma'}$, où $\sigma = \{-1, 0, +1\}$ et $\hat{\mathbf{J}}_{\sigma\sigma'}$ sont les matrices de spin-1. Les expressions de ces composantes sont:

$$\begin{cases} \hat{F}_i^x &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left((\hat{a}_{\downarrow i}^{\dagger} + \hat{a}_{\uparrow i}^{\dagger}) \hat{a}_{0i} + \hat{a}_{0i}^{\dagger} (\hat{a}_{\downarrow i} + \hat{a}_{\uparrow i}) \right) \\ \hat{F}_i^y &= \frac{i}{\sqrt{2}} \left((\hat{a}_{\downarrow i}^{\dagger} - \hat{a}_{\uparrow i}^{\dagger}) \hat{a}_{0i} - \hat{a}_{0i}^{\dagger} (\hat{a}_{\downarrow i} - \hat{a}_{\uparrow i}) \right) \\ \hat{F}_i^z &= \hat{a}_{\uparrow i}^{\dagger} \hat{a}_{\uparrow i} - \hat{a}_{\downarrow i}^{\dagger} \hat{a}_{\downarrow i} = \hat{n}_{\uparrow i} - \hat{n}_{\downarrow i} \end{cases} \quad (7.2)$$

- le moment magnétique local, défini par

$$F^2(0) = \langle \hat{F}_i^2 \rangle = F_{xx}(0) + F_{yy}(0) + F_{zz}(0); \quad (7.3)$$

- le paramètre d'ordre nématique sur site, tenseur \mathcal{Q} de trace nulle dont les composantes diagonales sont:

$$\begin{cases} Q_{xx} &= F_{xx}(0) - \frac{1}{3} F^2(0) \\ Q_{yy} &= F_{yy}(0) - \frac{1}{3} F^2(0) \\ Q_{zz} &= F_{zz}(0) - \frac{1}{3} F^2(0) \end{cases} \quad (7.4)$$

Ces quantités, telles que $Q_{xx} + Q_{yy} + Q_{zz} = 0$, renseignent sur l'ordre magnétique sur site et sont identiquement nulles lorsque les spins sont isotropes [4, 5].

7.2 Mélange sans conversion du spin: $U_2/U_0 = 0$

Ce cas représente un mélange de trois populations de bosons dont le spin ne joue aucun rôle dans le sens où les interactions de répulsion sur site sont toutes identiques. Le diagramme de phase de ce système est représenté sur la Figure 7.1 en haut.

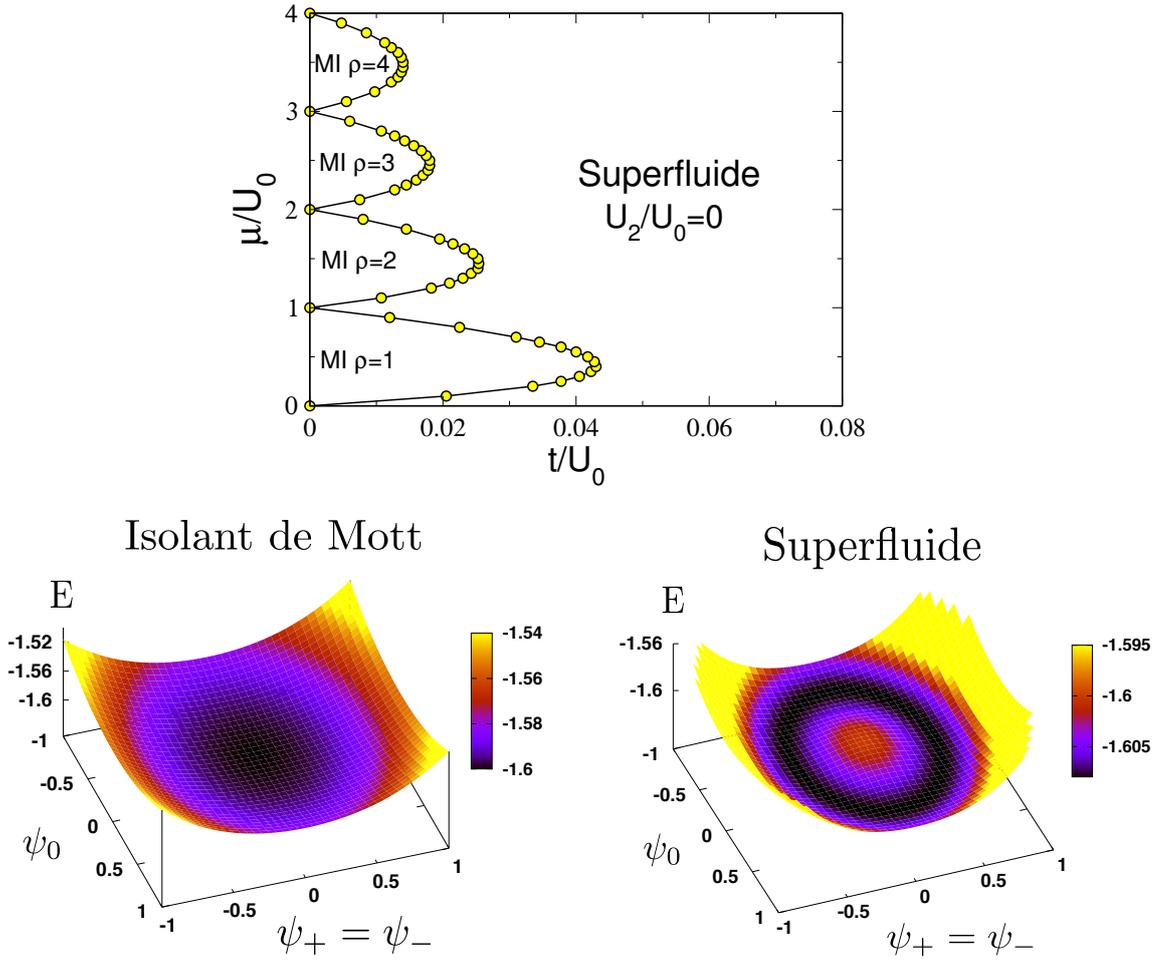


FIGURE 7.1 – Diagramme de phase en champ moyen sans conversion du spin $U_2/U_0 = 0$ (en haut) et surface de l'énergie fondamentale en fonction des composantes du paramètre d'ordre ψ_0 et ψ_{\pm} (en bas). En bas à gauche $(t/U_0, \mu/U_0) = (0.02, 1.30)$: l'énergie est *minimale* pour $\psi = 0$, signature de la phase isolante de Mott. En bas à droite $(t/U_0, \mu/U_0) = (0.03, 1.30)$: l'énergie du fondamental, située sur l'ellipse d'équation $\rho_s = 2\psi_+^2 + \psi_0^2$ avec $\rho_s = cste$, est *minimale* pour $\psi = \sqrt{\rho_s} \neq 0$, signature de la phase superfluide avec ρ_s la densité superfluide associée.

Phases de Mott

La Figure 7.1 en bas à gauche représente la surface typique de l'énergie dans la phase de Mott. Dans la limite $t/U_0 = 0$, le système adopte une phase MI avec ρ bosons par site lorsque le potentiel chimique μ satisfait la condition $\rho - 1 < \mu/U_0 < \rho$. La base des lobes MI vaut $\Delta\mu/U_0 = 1$ pour toutes les valeurs de ρ . Ces propriétés sont très similaires à celles des bosons à deux états de spin. Le Tableau 7.1 indique les différents états $|n_-, n_0, n_+\rangle$ dégénérés, d'énergie \mathcal{E}_g , des phases de Mott $\rho = \{1, 2\}$ avec $U_2/U_0 = 0$. Nous explicitons dans ce tableau les propriétés magnétiques de chacun de ces états. Il n'existe aucune corrélation des densités: les corrélations densité-densité sur site sont égales aux produits des densités considérées. Par ailleurs, la phase de Mott $\rho = 3$ ($\rho = 4$) est composée de dix (quinze) états dégénérés d'énergie $\mathcal{E}_g = 3U_0$ ($\mathcal{E}_g = 6U_0$).

	État $ n_-, n_0, n_+\rangle$	$F_{xx}(0)$	$F_{yy}(0)$	$F_{zz}(0)$	$F^2(0)$	Q_{xx}	Q_{yy}	Q_{zz}
Mott $\rho = 1$ $\mathcal{E}_g = 0$	$ 100\rangle$	0.5	0.5	1	2	-1/6	-1/6	1/3
	$ 010\rangle$	1	1	0	2	1/3	1/3	-2/3
	$ 001\rangle$	0.5	0.5	1	2	-1/6	-1/6	1/3
Mott $\rho = 2$ $\mathcal{E}_g = U_0$	$ 200\rangle$	1	1	4	6	-1	-1	2
	$ 020\rangle$	2	2	0	4	2/3	2/3	-4/3
	$ 002\rangle$	1	1	4	6	-1	-1	2
	$ 110\rangle$	2.5	2.5	1	6	1/2	1/2	-1
	$ 101\rangle$	1	1	0	2	1/3	1/3	-2/3
	$ 011\rangle$	2.5	2.5	1	6	1/2	1/2	-1

TABLE 7.1 – Corrélations spin-spin sur site, moment magnétique local [Eq. (7.3)] et composantes du paramètre d'ordre nématique [Eq. (7.4)] pour les trois (six) états dégénérés, d'énergie \mathcal{E}_g , de la phase de Mott $\rho = 1$ ($\rho = 2$) avec $U_2/U_0 = 0$. Le code couleur permet d'identifier les états de propriétés magnétiques identiques.

Phase superfluide

Le hamiltonien \mathcal{H}_{spin1}^r [Eq. (3.30)] admet la symétrie $\mathcal{H}_{spin1}^r(\hat{n}_{\uparrow r}, \hat{n}_{\downarrow r}) = \mathcal{H}_{spin1}^r(\hat{n}_{\downarrow r}, \hat{n}_{\uparrow r})$. Cette symétrie implique que, lorsque $\psi \neq 0$, l'énergie libre est minimisée avec $\psi_- = \psi_+$ [9]. Par ailleurs, la référence [9] précise que les paramètres ψ_- , ψ_0 et ψ_+ peuvent être restreints à l'ensemble des nombres réels dans l'hypothèse d'un superfluide spatialement uniforme. À titre d'exemple, l'énergie du fondamental dans la phase superfluide est représentée sur la Figure 7.1 en bas à droite. Dans toute la phase superfluide, l'état fondamental est infiniment dégénéré et l'énergie minimum \mathcal{E}_g est située sur l'ellipse d'équation $\rho_s = 2\psi_+^2 + \psi_0^2$ avec $\rho_s = cste$. Ainsi, tous les points situés sur cette ellipse correspondent à des états de même énergie \mathcal{E}_g , de même densité totale ρ et de même densité superfluide ρ_s . Dans l'ensemble grand canonique, les fluctuations du nombre de particules de chaque espèce, issues de l'interaction entre le réservoir de particules condensées et le système sur site, vont faire évoluer librement l'état fondamental du système sur cette ellipse. *A contrario*, la valeur des densités ρ_α et des densités superfluides $\rho_{s\alpha}$ avec $\alpha = \{-, 0, +\}$ varie en fonction des coordonnées du point considéré sur cette ellipse. Il en est de même des valeurs des corrélations spin-spin sur site $F_{xx}(0)$, $F_{yy}(0)$ et $F_{zz}(0)$.

Afin d'illustrer clairement l'influence des coordonnées du point considéré, nous traçons sur la Figure 7.2 (en haut) la projection du graphe 3D de la phase superfluide de la Figure 7.1. Sur cette figure, nous référençons un état fondamental par ses coordonnées polaires. Sur la Figure 7.2 en bas à gauche, nous montrons l'évolution des densités ρ_α et des densités superfluides $\rho_{s\alpha}$, avec $\alpha = \{-, 0, +\}$, lorsque l'angle θ varie. Remarquons que $\rho = 1.93$ et $\rho_s = 0.52$ sont constantes $\forall \theta$. La Figure 7.2 en bas à droite montre le comportement des corrélations spin-spin sur site $F_{xx}(0) = F_{yy}(0)$, $F_{zz}(0)$ et du moment magnétique local $F^2(0)$ lorsque l'on fait varier l'angle θ . Il est important, pour la suite de ce chapitre, de remarquer que:

- $F^2(0)$ atteint son maximum lorsque $\theta = \pi k \pm \pi \arctan(1/\sqrt{2})$ où $k \in \mathbb{Z}$. Pour $\theta \in [0, 2\pi]$, ceci donne en radians $\theta/\pi \simeq \{0.2, 0.8, 1.2, 1.8\}$, soit en degrés $\theta \simeq \{35.3^\circ, 144.7^\circ, 215.3^\circ, 324.7^\circ\}$. Ces angles correspondent aux états tels que $\rho_0 = \rho_- + \rho_+$ et $\rho_{s0} = \rho_{s-} + \rho_{s+}$;

- $F^2(0)$ est minimale pour $\theta = \frac{\pi}{2}k$ où $k \in \mathbb{Z}$. Dans ce cas, les populations sont polarisées avec, d'une part, ($\rho_0 = \rho$, $\rho_- + \rho_+ = 0$) et ($\rho_{s0} = \rho_s$, $\rho_{s-} + \rho_{s+} = 0$) lorsque k est pair, et d'autre part, ($\rho_0 = 0$, $\rho_- + \rho_+ = \rho$) et ($\rho_{s0} = 0$, $\rho_{s-} + \rho_{s+} = \rho_s$) lorsque k est impair.

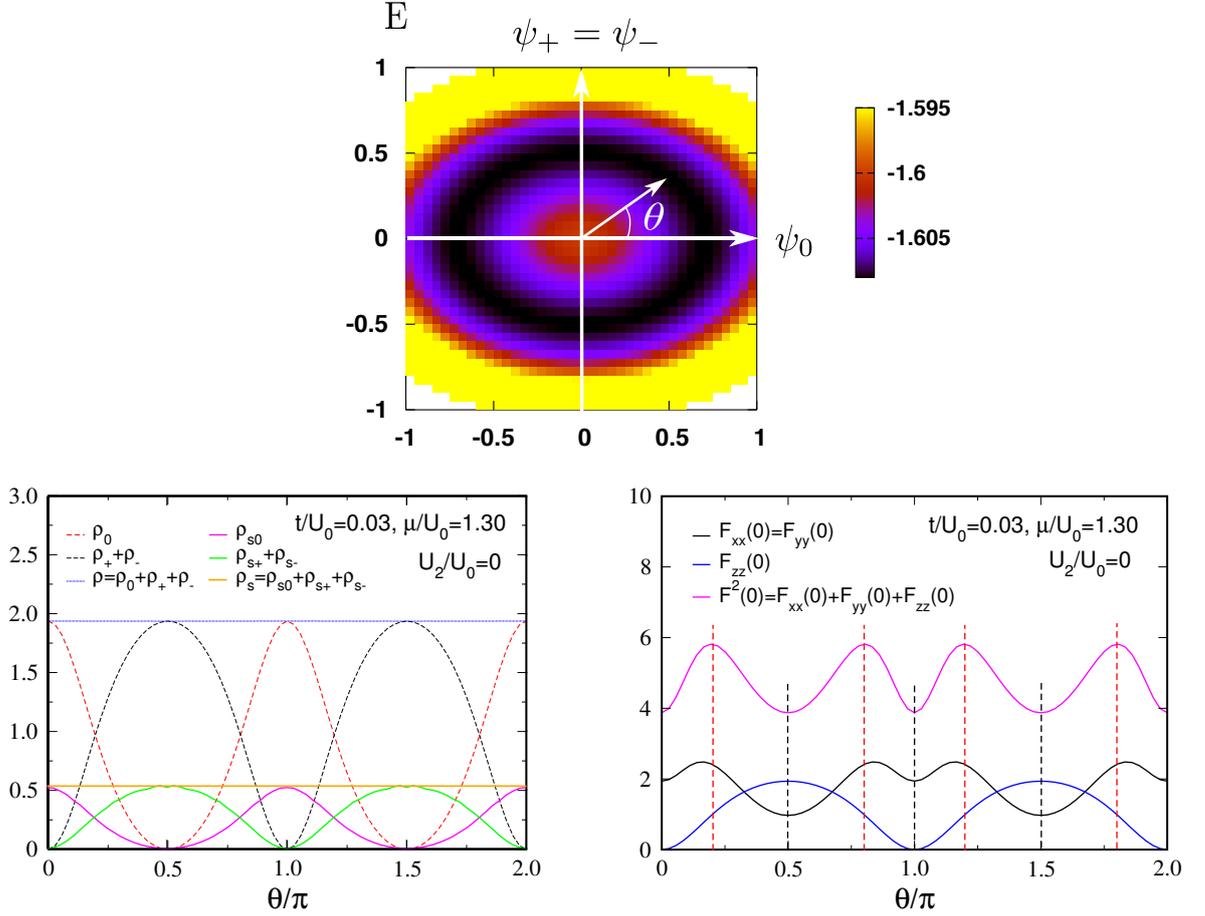


FIGURE 7.2 – En haut: projection de l'énergie en fonction des composantes ψ_0 et $\psi_+ = \psi_-$ du paramètre d'ordre ψ dans la phase superfluide avec les paramètres $(t/U_0, \mu/U_0) = (0.03, 1.30)$ et $U_2/U_0 = 0$. Cette projection correspond au graphe de la Figure 7.1 en bas à droite pour lequel $\rho = 1.93$ et $\rho_s = 0.52$. En bas à gauche: comportements des densités ρ_0 et $\rho_+ + \rho_-$ et des densités superfluides ρ_{s0} et $\rho_{s+} + \rho_{s-}$ associées au graphe du haut en fonction de θ/π . En bas à droite: évolution des corrélations spin-spin sur site $F_{xx}(0)$, $F_{yy}(0)$ et $F_{zz}(0)$ et de leur somme $F^2(0)$ associées au graphe du haut en fonction de θ/π .

Transitions de phases

Les différentes coupes verticales effectuées dans le diagramme de phase, non tracées ici, ne montrent aucune discontinuité des densités et des densités superfluides: toutes les transitions sont du second ordre. Nous montrons, cependant, la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ sur la Figure 7.3. Pour ces coupes aussi, toutes les transitions sont du second ordre.

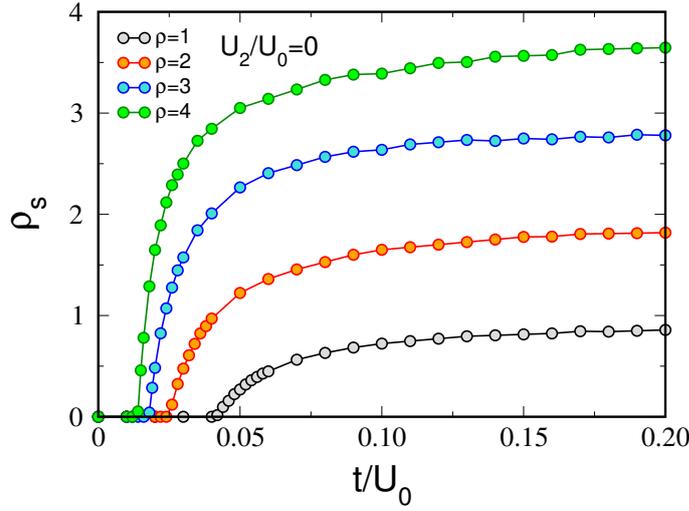


FIGURE 7.3 – Évolution de la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = 0$. Ces courbes correspondent à des coupes horizontales des lobes MI en adaptant le potentiel chimique pour maintenir la densité constante. L'évolution continue de ρ_s est la signature de transitions du second ordre.

Le cas sans conversion du spin que nous venons de présenter va servir de référence pour comprendre l'influence des conversions du spin pour ce système. Nous avons vu que les propriétés de ce système sont très similaires à celles du système de bosons de spin-1/2 précédemment étudié.

7.3 Interaction ferromagnétique: $U_2/U_0 < 0$

Ce cas représente un mélange de trois populations de bosons tel que les espèces de spin -1 et $+1$ peuvent se transformer en particules de spin 0 , et réciproquement. Le signe négatif de U_2 , en facteur devant les interactions spin-spin sur site du hamiltonien \mathcal{H}_{spin1}^r [Eq. (3.30)], va maximiser le moment magnétique local $F(0)$ et est à l'origine de l'appellation « ferromagnétique » dans la bibliographie [4, 36].

Le diagramme de phase avec $U_2/U_0 = -0.1$, composé de phases de Mott et d'une phase superfluide, est représenté sur la Figure 7.4. Le choix de la valeur $U_2/U_0 = -0.1$ vient du fait que la physique pour $U_2/U_0 = 0.1$ est particulièrement intéressante. Garder la même valeur absolue nous permettra de comparer ces deux cas. De plus, ce choix nous permettra d'effectuer une comparaison avec l'étude 1D [9, 22].

Phases de Mott

La Figure 7.5 (a) et (b) représente la surface de l'énergie dans la phase de Mott. Bien que l'énergie la plus basse se situe en $\psi = 0$, nous pouvons noter que la surface de l'énergie adopte une forme différente de celle du cas $U_2/U_0 = 0$ (*cf.* Figure 7.1).

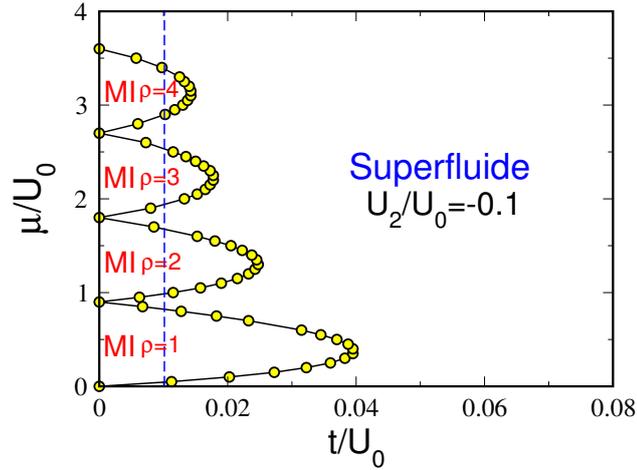


FIGURE 7.4 – Diagramme de phase en champ moyen avec conversions du spin $U_2/U_0 = -0.1$. Toutes les phases de Mott sont dégénérées et les transitions de phases sont toutes du second ordre. La ligne bleue en trait discontinu correspond à la coupe de la Figure 7.6.

Dans la limite $t/U_0 = 0$, le système adopte une phase MI avec ρ bosons par site lorsque le potentiel chimique μ satisfait la condition $(\rho - 1)(1 - |U_2|/U_0) < \mu/U_0 < \rho(1 - |U_2|/U_0)$. La base des lobes MI vaut $\Delta\mu/U_0 = 1 - |U_2|/U_0 = 0.9$ pour toutes valeurs de ρ . Ceci implique que la largeur, en $t/U_0 = 0$, des lobes MI décroît linéairement avec $|U_2|/U_0$ et que toutes les phases MI disparaissent lorsque $|U_2|/U_0 = 0.5$. L'évolution de la surface délimitant la phase de Mott et la phase superfluide en fonction de $|U_2|/U_0$ est qualitativement similaire à celle du système de bosons de spin- $1/2$ (cf. Figure 5.7).

	État $ n_-, n_0, n_+\rangle$	$F_{xx}(0)$	$F_{yy}(0)$	$F_{zz}(0)$	$F^2(0)$	Q_{xx}	Q_{yy}	Q_{zz}
Mott $\rho = 1$ $\mathcal{E}_g = 0$	$ 100\rangle$	0.5	0.5	1	2	-1/6	-1/6	1/3
	$ 010\rangle$	1	1	0	2	1/3	1/3	-2/3
	$ 001\rangle$	0.5	0.5	1	2	-1/6	-1/6	1/3
Mott $\rho = 2$ $\mathcal{E}_g = U_0 + U_2$	$ 200\rangle$	1	1	4	6	-1	-1	2
	$ 002\rangle$	1	1	4	6	-1	-1	2
	$ 110\rangle$	2.5	2.5	1	6	1/2	1/2	-1
	$ 011\rangle$	2.5	2.5	1	6	1/2	1/2	-1
	$(\sqrt{2} 020\rangle + 101\rangle)/\sqrt{3}$	3	3	0	6	1	1	-2

TABLE 7.2 – Corrélations spin-spin sur site et composantes du paramètre d'ordre nématique [Eq. (7.4)] pour les trois (cinq) états dégénérés, d'énergie \mathcal{E}_g , de la phase de Mott $\rho = 1$ ($\rho = 2$) avec $U_2/U_0 = -0.1$. Le code couleur permet d'identifier les états de propriétés magnétiques identiques. Les densités de la superposition linéaire $(\sqrt{2}|020\rangle + |101\rangle)/\sqrt{3}$ sont $(\rho_-, \rho_0, \rho_+) = (1/3, 4/3, 1/3)$. Ce tableau est à comparer avec le Tableau 7.1.

Le Tableau 7.2 indique les états dégénérés, d'énergie \mathcal{E}_g , des phases de Mott $\rho = \{1, 2\}$ avec $U_2/U_0 = -0.1$. Nous explicitons, dans ce tableau, les propriétés magnétiques de chacun de ces états. La comparaison de ce tableau avec le Tableau 7.1 montre que la phase de Mott $\rho = 1$ n'est pas affectée par le terme de conversion. Concernant la phase de Mott $\rho = 2$, à la différence du cas $U_2/U_0 = 0$, seuls les états dont le moment magnétique local $F^2(0)$ est maximisé, avec $F^2(0) = \rho(\rho + 1) = 6$, sont conservés. Les deux états $|020\rangle$ et $|101\rangle$, qui ne satisfont pas individuellement ce critère, forment la superposition linéaire $(\sqrt{2}|020\rangle + |101\rangle)/\sqrt{3}$ qui, elle, le satisfait bien. La phase de Mott $\rho = 3$ [$\rho = 4$] est composée de sept [neuf] états « ferromagnétiques » dégénérés d'énergie $\mathcal{E}_g = 3(U_0 + U_2)$ [$\mathcal{E}_g = 6(U_0 + U_2)$] avec $F^2(0) = \rho(\rho + 1)$.

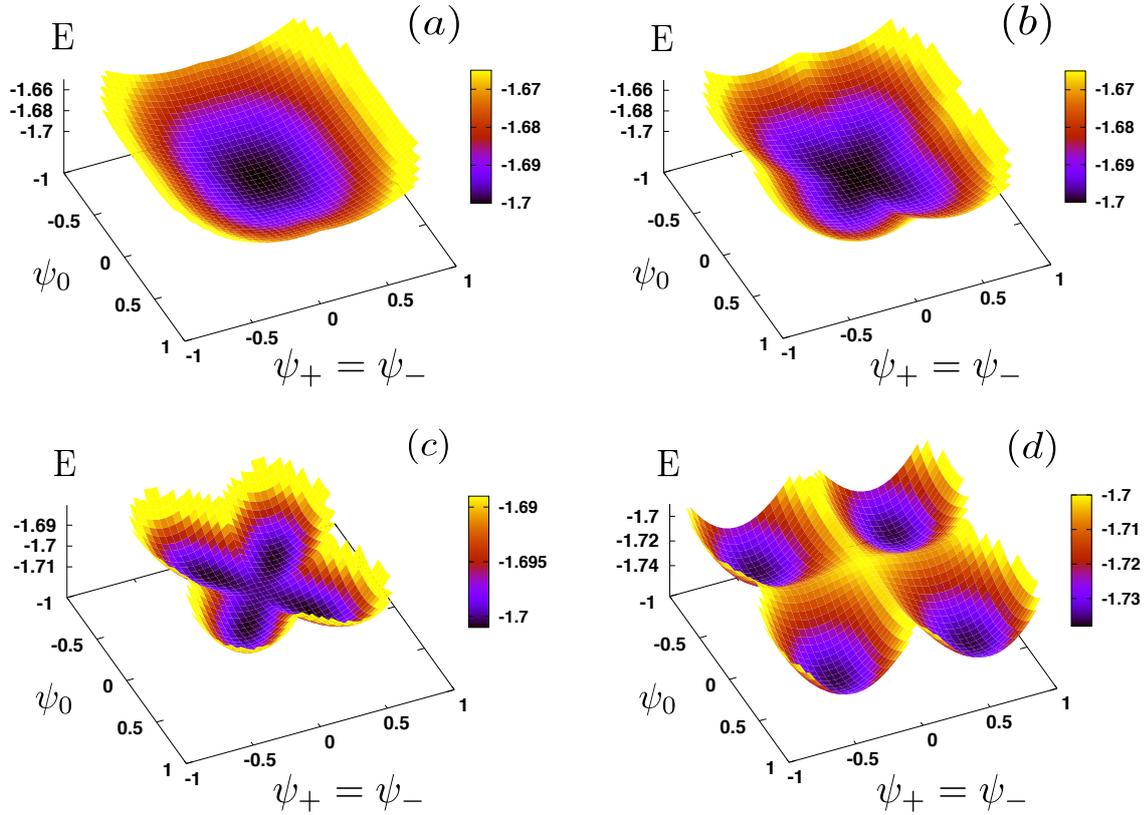


FIGURE 7.5 – Minimum de l'énergie en fonction des composantes ψ_0 et $\psi_+ = \psi_-$ du paramètre d'ordre pour le rapport $U_2/U_0 = -0.1$. De (a) vers (d): évolution de l'énergie lors de la transition de la phase de MI [(a) et (b)] vers la phase superfluide [(c) et (d)] pour la densité $\rho = 2$ ($\mu/U_0 = 1.30$). En (a), $t/U_0 = 0.010$: l'énergie est *minimale* pour $\psi = 0$, signature de la phase MI. En (b), $t/U_0 = 0.020$: le système est encore dans la phase MI et approche la transition vers la phase superfluide. En (c), $t/U_0 = 0.026$: le système vient juste de passer dans la phase superfluide. Le minimum situé précédemment en $\psi = 0$ s'est transformé continûment en quatre *minima* dégénérés situés en $|\psi_0| = \sqrt{2}|\psi_+| \neq 0$. Cette évolution continue est la signature d'une transition du second ordre. En (d), $t/U_0 = 0.040$: le système est superfluide.

À la différence du cas $U_2/U_0 = 0$, les phases isolantes de Mott $\rho > 1$, d'énergie $E(\rho) = \rho(\rho - 1)(U_0 + U_2)/2$, sont donc exclusivement composées d'états « ferromagnétiques » maximisant le moment magnétique local tel que $F^2(0) = \rho(\rho + 1)$.

Phase superfluide

La surface de l'énergie dans la phase superfluide est représentée sur la Figure 7.5 (c) et (d). Cette surface adopte une forme très différente de celle du cas $U_2/U_0 = 0$ (cf. Figure 7.1). Elle présente quatre *minima* dégénérés d'énergie \mathcal{E}_g situés en $|\psi_0| = \sqrt{2}|\psi_{\pm}| \neq 0$, soit en $\theta = \pi k \pm \pi \arctan(1/\sqrt{2})$ où $k \in \mathbb{Z}$ avec la convention $\psi_{\pm} = 0$ en $\theta = 0$ (cf. Figure 7.2). Pour $\theta \in [0, 2\pi]$, ces quatre *minima* sont localisés pour les angles $\theta \simeq \{35.3^\circ, 144.7^\circ, 215.3^\circ, 324.7^\circ\}$. Ces quatre états de même densité ρ et de même densité superfluide $\rho_s = \psi_-^2 + \psi_0^2 + \psi_+^2$, soit $\rho_s = \psi_0^2 + 2\psi_+^2 = 4\psi_+^2$, sont tels que $(\rho_{s-}, \rho_{s0}, \rho_{s+}) = (\rho_s/4, \rho_s/2, \rho_s/4)$ et $(\rho_-, \rho_0, \rho_+) = (\rho/4, \rho_s/2, \rho/4)$ (cf. Figure 7.2 en bas à gauche). Le moment magnétique local $F^2(0)$ prend sa valeur *maximale* en favorisant un ordre « ferromagnétique » sur site (cf. Figure 7.2 en bas à droite).

Transitions de phases

La Figure 7.6 correspond à la coupe verticale du diagramme de phase (Figure 7.4) représentée par la ligne bleue en trait discontinu. Nous traçons sur cette figure la densité et la densité superfluide en fonction du potentiel chimique μ/U_0 . Cette coupe traverse les quatre lobes MI du diagramme de phase, représentés par les plateaux de la densité, ainsi que la région superfluide qui les sépare. Tout le long de cette coupe, le moment magnétique local prend sa valeur *maximale* telle que $F^2(0) = \rho(\rho + 1)$, favorisant un ordre ferromagnétique sur site. Par ailleurs, le module du paramètre d'ordre $\psi = \sqrt{\rho_s}$ varie continûment: les transitions sont du second ordre.

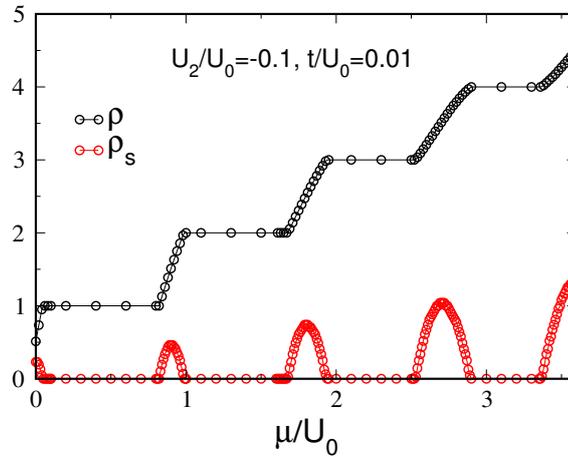


FIGURE 7.6 – Coupe verticale du diagramme de phase (ligne verticale bleue Figure 7.4) avec $t/U_0 = 0.01$ et $U_2/U_0 = -0.1$. Cette coupe traverse les quatre lobes MI du diagramme de phase, ainsi que la région superfluide qui les sépare. Nous précisons que les valeurs des densités ρ_0 , ρ_- et ρ_+ ne sont pas uniques dans les phases MI à cause de leur dégénérescence. *A contrario*, ces valeurs sont fixées dans la phase superfluide et sont telles que $\rho_0 = 2\rho_{\pm} = \rho/2$ et $\rho_{s0} = 2\rho_{s\pm} = \rho_s/2$.

Là encore, il est intéressant de montrer l'évolution de la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour une densité constante (cf. Figure 7.7). Les graphes de la Figure 7.5 correspondent au profil de l'énergie de la courbe orange avec $\rho = 2$ et $t/U_0 = \{0.010, 0.020, 0.026, 0.040\}$. L'évolution continue de ρ_s est la signature de transitions du second ordre et nous pouvons voir que le système est entièrement superfluide lorsque $t/U_0 \rightarrow \infty$, car $\rho_s \rightarrow \rho$. Le comportement

qualitatif de ces courbes est le même que le cas sans conversion du spin $U_2/U_0 = 0$: toutes les transitions sont du second ordre, seule la valeur de t/U_0 à la transition change.

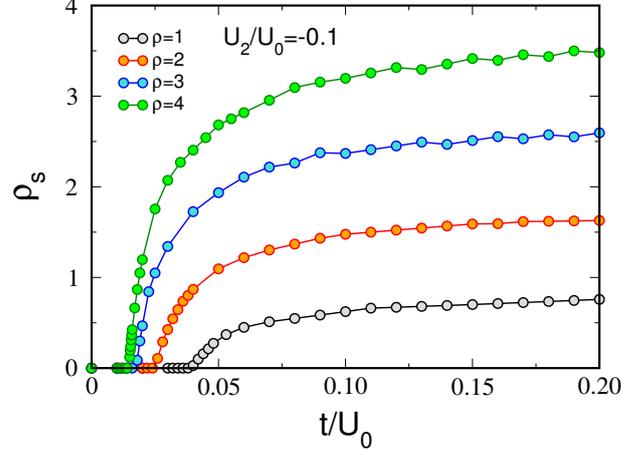


FIGURE 7.7 – Densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = -0.1$. Ces courbes correspondent à des coupes horizontales des lobes MI en adaptant le potentiel chimique afin de maintenir la densité constante. L'évolution continue de ρ_s est la signature de transitions du second ordre.

7.4 Interaction antiferromagnétique: $U_2/U_0 > 0$

Le signe positif de U_2 , en facteur devant les interactions spin-spin sur site du hamiltonien \mathcal{H}_{spin1}^r [Eq. (3.30)], va anti-aligner les spins sur chaque site, soit minimiser le moment magnétique local $F^2(0)$. Ceci est à l'origine de l'appellation « antiferromagnétique » dans la bibliographie [4, 36]. Nous montrons dans cette section que le choix de la valeur $U_2/U_0 = 0.1$ ¹ est particulièrement intéressant. Le diagramme de phase de ce système avec $U_2/U_0 = 0.1$ est représenté sur la Figure 7.8.

Phases de Mott

Les Figures 7.10 (a) et (b) représentent la surface de l'énergie dans la phase de Mott avec $U_2/U_0 = 0.05$. Comme le cas $U_2/U_0 < 0$, le terme de conversion a une influence sur la forme de la surface de l'énergie. Cette surface est très différente de celle des cas précédents, surtout au voisinage de la transition [Figure 7.10 (b)]. En (a): l'énergie est minimum pour $\psi = 0$, signature standard de la phase isolante de Mott. En (b): l'énergie présente quatre *minima* locaux dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_{\pm} et un minimum global en $\psi = 0$. Ceci indique que la phase de Mott est stable et que la phase superfluide est métastable. Le système est donc encore dans la phase de Mott, mais approche la transition vers la phase superfluide. Cette métastabilité est aussi observée avec $U_2/U_0 = 0.1$, mais est exacerbée pour des rapports U_2/U_0 plus petits, ce qui permet de mieux représenter cet effet graphiquement, d'où notre choix de $U_2/U_0 = 0.05$.

1. $U_2/U_0 < 0.2$, plus généralement.

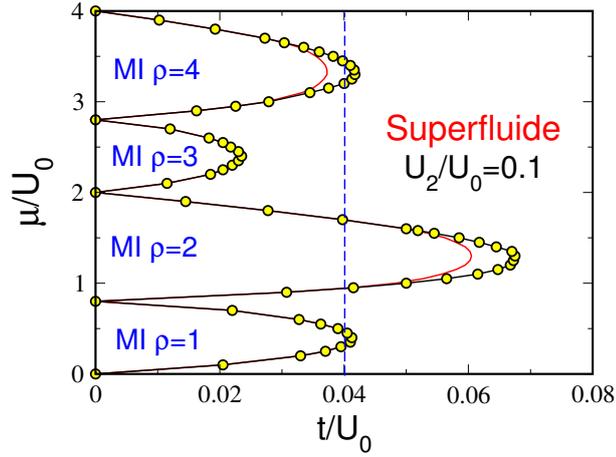


FIGURE 7.8 – Diagramme de phase en champ moyen avec conversions du spin $U_2/U_0 = 0.1$. La phase superfluide présente un déséquilibre des populations de spin 0 et ± 1 : soit $\rho_{s0} = 0$ et $\rho_s = \rho_{s-} + \rho_{s+}$, soit l'opposé $\rho_{s0} = \rho_s$ et $\rho_{s-} = \rho_{s+} = 0$. La phase superfluide est donc polarisée. Les transitions de phases sont toutes du second ordre, excepté aux extrémités des lobes MI de densités paires, zones métastables situées entre la ligne rouge et la ligne noire pour lesquelles les transitions sont du premier ordre. La ligne bleue en trait discontinu correspond à la coupe de la Figure 7.11.

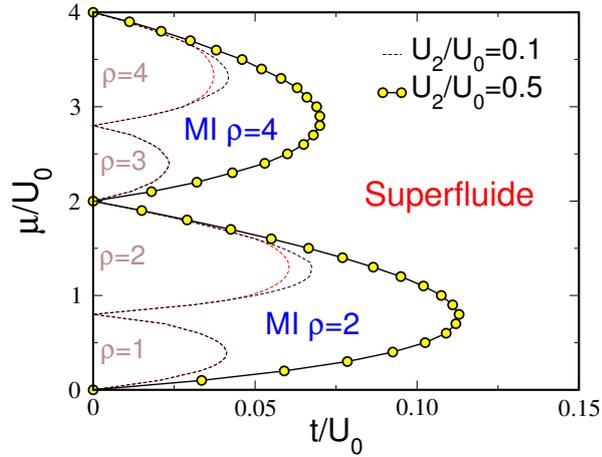


FIGURE 7.9 – Superposition des diagrammes de phase en champ moyen avec les rapports $U_2/U_0 = 0.1$ et $U_2/U_0 = 0.5$. Le diagramme de phase avec $U_2/U_0 = 0.5$ n'est composé que de lobes de densités paires largement étendus et toutes les transitions de phase de ce diagramme sont du second ordre.

Lorsque $t/U_0 = 0$, le système adopte une phase de Mott avec ρ bosons par site lorsque le potentiel chimique μ satisfait la condition $\rho - 1 < \mu/U_0 < \rho - 2U_2/U_0$ pour des densités impaires et $\rho - 1 - 2U_2/U_0 < \mu/U_0 < \rho$ pour des densités paires. La base des lobes MI vaut donc $\Delta\mu/U_0 = 1 - 2U_2/U_0$ pour les densités impaires et vaut $\Delta\mu/U_0 = 1 + 2U_2/U_0$ pour les densités paires. Ceci implique que la base des lobes MI de densités impaires décroît linéairement avec U_2/U_0 et croît linéairement avec U_2/U_0 pour les densités paires. À la différence du cas

$U_2/U_0 < 0$, pour lequel toutes les phases de Mott disparaissent lorsque $U_2/U_0 = 0.5$, les lobes pairs persistent pour ce rapport. La Figure 7.9 permet une comparaison directe des diagrammes de phase avec $U_2/U_0 = 0.1$ et $U_2/U_0 = 0.5$. La surface délimitant les phases MI et superfluide en fonction de U_2/U_0 est qualitativement similaire à celle du système de bosons de spin-1/2 (cf. Figure 5.13).

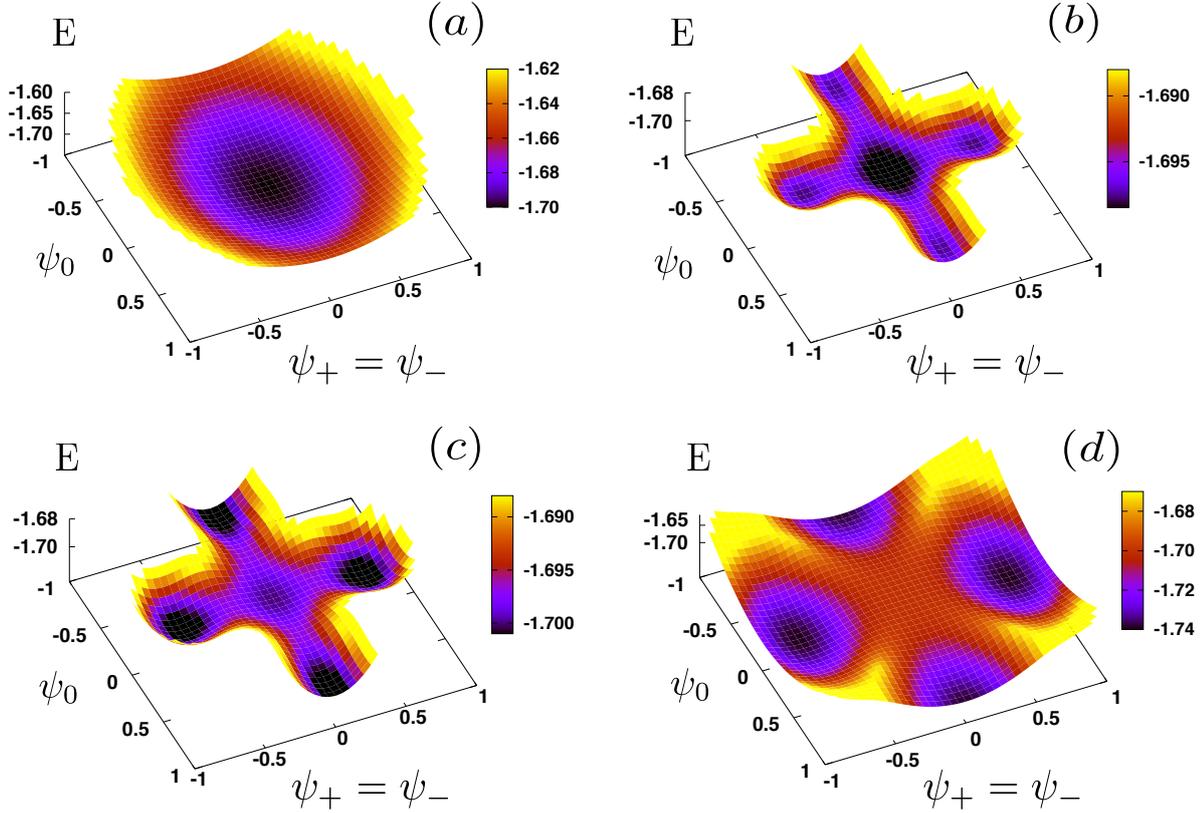


FIGURE 7.10 – Minimum de l'énergie en fonction des composantes ψ_0 et $\psi_+ = \psi_-$ du paramètre d'ordre pour le rapport $U_2/U_0 = 0.05$. De (a) vers (d): évolution de l'énergie lors de la transition de la phase de MI [(a) et (b)] vers la phase superfluide [(c) et (d)] pour la densité $\rho = 2$ ($\mu/U_0 = 1.30$). En (a), $t/U_0 = 0.020$: l'énergie est *minimale* pour $\psi = 0$, signature standard de la phase isolante de Mott. En (b), $t/U_0 = 0.049$: l'énergie présente quatre *minima* locaux dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_{\pm} et un minimum global en $\psi = 0$. Ceci indique que la phase MI est stable et que la phase superfluide est métastable. Le système est donc encore dans la phase de Mott, mais approche la transition vers la phase superfluide. En (c), $t/U_0 = 0.051$: l'énergie présente quatre *minima* globaux dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_{\pm} et un minimum local en $\psi = 0$. La phase MI est maintenant métastable et la phase superfluide est stable, le système vient juste de passer dans la phase superfluide. La discontinuité du paramètre d'ordre est la signature d'une transition du premier ordre. En (d), $t/U_0 = 0.060$: l'énergie présente quatre *minima* globaux dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_{\pm} , le système est superfluide.

Le Tableau 7.3 indique les états (dégénérés pour ρ impair), d'énergie \mathcal{E}_g , des phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. Nous explicitons, dans ce tableau, la densité des états, ainsi que leurs propriétés magnétiques. La phase de Mott $\rho = 1$, identique à celle des cas $U_2/U_0 = 0$ et $U_2/U_0 = -0.1$ (cf. Tableaux 7.1 et 7.2), n'est pas affectée par le terme de conversion.

- Concernant les phases de Mott de densité paire: les états forment une superposition linéaire afin de minimiser le moment magnétique local, tel que $F^2(0) = 0$. Ces phases, non dégénérées, présentent un équilibre des populations $\rho_- = \rho_0 = \rho_+$ et l'état est singulet.
- Concernant la phase de Mott $\rho = 3$: cette phase est dégénérée et les états forment une superposition linéaire afin de minimiser le moment magnétique local, tel que $F^2(0) = 2$. En effet, il n'est pas possible de former une superposition linéaire telle que $F^2(0) = 0$ lorsque la densité est impaire.

À la différence du cas $U_2/U_0 < 0$, l'état fondamental des phases de Mott est principalement « antiferromagnétique », *i.e.* le moment magnétique local est minimisé. De façon générale, l'énergie sur site de l'état fondamental vaut $\mathcal{E}(\rho) = (U_0\rho/2 - U_2)(\rho - 1)$ pour les densités impaires et vaut $\mathcal{E}(\rho) = U_0\rho(\rho - 1)/2 - \rho U_2$ pour les densités paires.

	État $ n_-, n_0, n_+\rangle$	(ρ_-, ρ_0, ρ_+)	$F_{xx}(0)$	$F_{zz}(0)$	$F^2(0)$	Q_{zz}
Mott $\rho = 1$ $\mathcal{E}_g = 0$	$ 100\rangle$	(1,0,0)	0.5	1	2	1/3
	$ 010\rangle$	(0,1,0)	1	0	2	-2/3
	$ 001\rangle$	(0,0,1)	0.5	1	2	1/3
Mott $\rho = 2$ $\mathcal{E}_g = U_0 - 2U_2$	$\frac{1}{\sqrt{3}}(\sqrt{2} 101\rangle - 020\rangle)$	(2/3, 2/3, 2/3)	0	0	0	0
Mott $\rho = 3$ $\mathcal{E}_g = 3U_0 - 2U_2$	$\frac{1}{\sqrt{5}}(021\rangle) - 2 102\rangle)$	(0.8,0.4,1.8)	0.5	1	2	1/3
	$\frac{1}{\sqrt{5}}(\sqrt{3} 030\rangle - \sqrt{2} 111\rangle)$	(0.4,2.2,0.4)	1	0	2	-2/3
	$\frac{1}{\sqrt{5}}(2 201\rangle - 120\rangle)$	(1.8,0.4,0.8)	0.5	1	2	1/3
Mott $\rho = 4$ $\mathcal{E}_g = 6U_0 - 4U_2$	$\frac{1}{\sqrt{5}}(040\rangle + \frac{2}{\sqrt{3}} 121\rangle + \sqrt{\frac{8}{3}} 202\rangle)$	(4/3, 4/3, 4/3)	0	0	0	0

TABLE 7.3 – Densités, corrélations spin-spin sur site $F_{xx}(0) = F_{yy}(0)$ et $F_{zz}(0)$ et composante $Q_{zz} = -2Q_{xx} = -2Q_{yy}$ du paramètre d'ordre nématique [Eq. (7.4)] pour les états d'énergie \mathcal{E}_g des phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. Pour $\rho > 1$, le terme de conversion déséquilibre (équilibre) les populations des phases de Mott dégénérées (non dégénérées) de densité impaire (paire). Le code couleur permet d'identifier les états de propriétés magnétiques identiques. Ce tableau est à comparer avec les Tableaux 7.1 et 7.2.

Phase superfluide

La surface de l'énergie dans la phase superfluide est montrée sur la Figure 7.10 en (c) et (d) avec le rapport $U_2/U_0 = 0.05$. En (c), l'énergie présente quatre *minima* globaux dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_{\pm} , soit en $\theta = \frac{\pi}{2}k$ où $k \in \mathbb{Z}$, et un minimum local en $\psi = 0$ avec la convention $\psi_{\pm} = 0$ en $\theta = 0$ (*cf.* Figure 7.2). Sur ce graphe, la phase MI est métastable et la phase superfluide est stable, le système vient juste de passer dans la phase superfluide. Cette métastabilité est aussi observée pour $U_2/U_0 = 0.1$. En (d), l'énergie présente quatre *minima* dégénérés situés sur les axes ψ_0 et ψ_{\pm} , le système est superfluide. À la différence du cas $U_2/U_0 = -0.1$, ces quatre états de densité ρ et de densité superfluide $\rho_s = \psi_0^2 + 2\psi_{\pm}^2$ présentent un déséquilibre des populations

de spin 0 et ± 1 : soit $(\rho_{s-}, \rho_{s0}, \rho_{s+}) = (0, \rho_s, 0)$ avec $(\rho_-, \rho_0, \rho_+) = (0, \rho, 0)$ lorsque k est pair, soit l'opposé $(\rho_{s-}, \rho_{s0}, \rho_{s+}) = (\rho_s/2, 0, \rho_s/2)$ avec $(\rho_-, \rho_0, \rho_+) = (\rho/2, 0, \rho/2)$ lorsque k est impair (cf. Figure 7.2 en bas à gauche). La phase superfluide est donc polarisée. Le moment magnétique local $F^2(0)$ prend sa valeur *minimale* en favorisant un ordre « antiferromagnétique » sur site (cf. Figure 7.2 en bas à droite).

Transitions de phases

La coupe verticale Figure 7.11 correspond à la ligne bleue en trait discontinu du diagramme de phase (cf. Figure 7.8). Nous traçons sur cette figure l'évolution des densités et des densités superfluides en fonction du potentiel chimique μ/U_0 . Cette coupe passe très proche de l'extrémité du lobe MI $\rho = 1$ et traverse les lobes MI $\rho = \{2, 4\}$ non dégénérés du diagramme de phase, ainsi que la région superfluide qui les sépare. Ces deux phases de Mott sont représentées par les plateaux de densité $\rho = \{2, 4\}$ avec une densité superfluide nulle $\rho_s = 0$. Cette phase est polarisée avec $\rho_s = \rho_{s0}$ sur la Figure 7.11. Tout le long de cette coupe, le moment magnétique local $F^2(0)$ prend sa valeur *minimale* en favorisant un ordre « antiferromagnétique » sur site. Nous voyons sur la Figure 7.11 que les densités évoluent continûment lors de la transition Mott-superfluide $\rho = 2$, ce qui indique que cette transition est du second ordre. *A contrario*, les densités présentent une discontinuité lors de la transition Mott-superfluide $\rho = 4$, signature d'une transition de phase du premier ordre. Le saut des densités est observé lorsque l'on pénètre dans la zone de métastabilité.

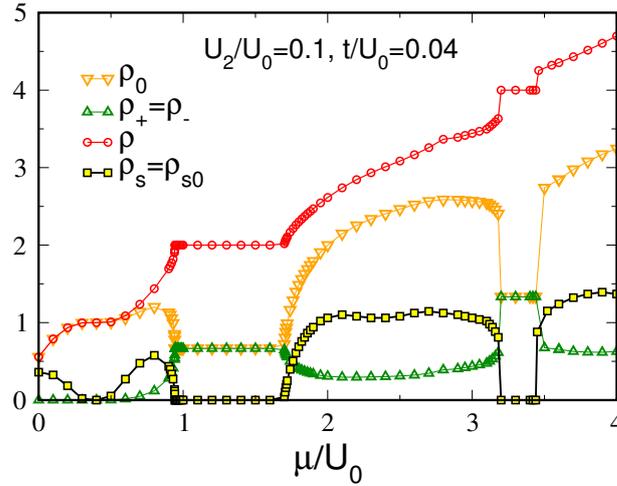


FIGURE 7.11 – Coupe verticale du diagramme de phase (ligne verticale discontinu en bleu Figure 7.8) avec $U_2/U_0 = 0.1$. Cette coupe traverse les lobes MI $\rho = \{2, 4\}$ du diagramme de phase, ainsi que la région superfluide qui les sépare. La transition Mott-superfluide est du second (premier) ordre pour $\rho = 2$ ($\rho = 4$).

Il existe cependant une zone métastable à l'extrémité du lobe $\rho = 2$ et, par conséquent, une transition du premier ordre. Afin de montrer cet effet, nous traçons la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ sur la Figure 7.12. L'évolution continue (discontinue) de la densité superfluide pour $\rho = \{1, 3\}$ ($\rho = \{2, 4\}$) est la signature de transitions du second (premier) ordre. De telles transitions du premier ordre n'ont pas été observées pour les cas $U_2/U_0 = 0$ et $U_2/U_0 < 0$. Le comportement qualitatif de ces courbes est similaire à celui du système de bosons de spin-1/2 (cf. Figure 5.17).

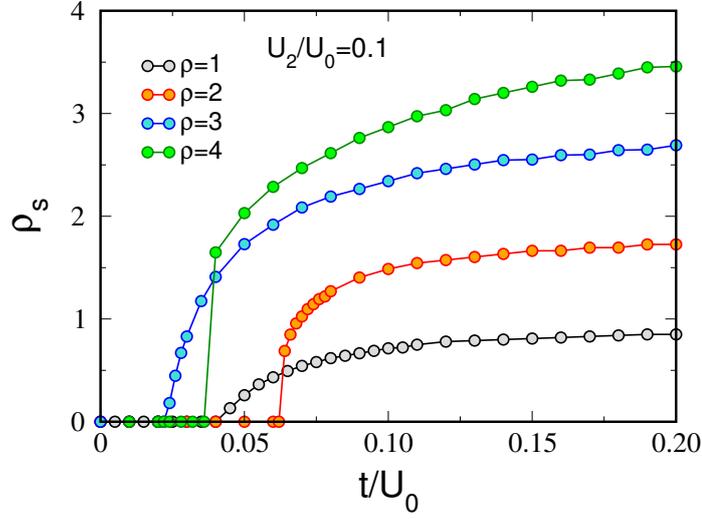


FIGURE 7.12 – Évolution de la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = \{1, 2, 3, 4\}$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. Ces courbes correspondent à des coupes horizontales des lobes MI en passant par leur extrémité. L'évolution continue de ρ_s pour les densités $\rho = 1$ et $\rho = 3$ est la signature de transitions du second ordre. La discontinuité dans l'évolution de ρ_s pour les densités $\rho = \{2, 4\}$ est la signature de transitions du premier ordre.

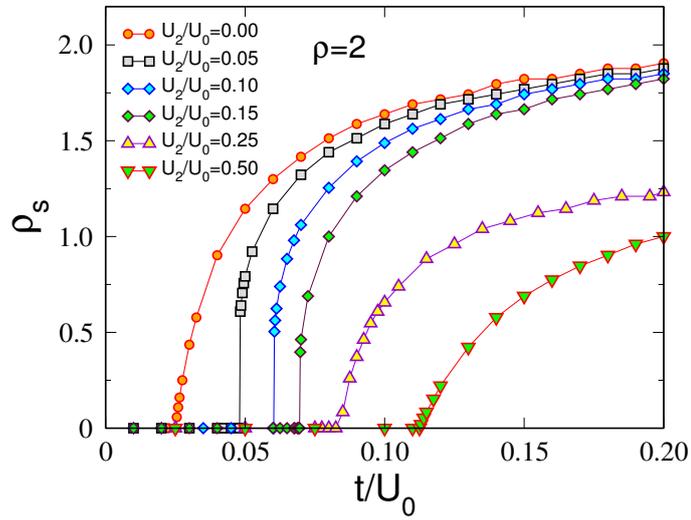


FIGURE 7.13 – Évolution de la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 avec une densité constante $\rho = 2$ pour les valeurs $U_2/U_0 = \{0.00, 0.05, 0.10, 0.15, 0.25, 0.50\}$. L'évolution continue de ρ_s pour $U_2/U_0 = \{0.00, 0.25, 0.50\}$ indique que ces transitions sont du second ordre. Sur cette figure, seuls les rapports $U_2/U_0 = \{0.05, 0.10, 0.15\}$ présentent une discontinuité dans l'évolution de ρ_s , signature d'une transition du premier ordre. Le même comportement est observé pour $\rho = 4$.

Nous venons de montrer que la transition Mott-superfluide est du premier ordre pour des densités paires avec $U_2/U_0 = 0.1$. Nous avons effectué une étude approfondie du saut de ρ_s à la transition en fonction de U_2/U_0 pour les densités $\rho = \{2, 4\}$. Le saut, nul en $U_2/U_0 = 0$ augmente vers sa valeur *maximale* en $U_2/U_0 \simeq 0.05$, puis décroît jusqu'à zéro en $U_2/U_0 \sim 0.2$. Ce comportement est visible sur la Figure 7.13 pour $\rho = 2$. Ce comportement est similaire à celui observé pour le système de bosons de spin-1/2 (cf. Figure 5.18).

7.5 Conclusion du Chapitre 7: étude des bosons de spin-1 en champ moyen

Nous venons d'étudier le hamiltonien \mathcal{H}_{spin1} [Eq. (3.10)] *via* une approximation qui suppose le système uniforme et qui découple les sites du système (cf. Section 3.3). Cette approximation simplifie le hamiltonien \mathcal{H}_{spin1} et conduit au hamiltonien sur site \mathcal{H}_{spin1}^s [Eq. (3.30)] que nous pouvons diagonaliser numériquement. En contrepartie, cette méthode nous restreint à une analyse sur site.

Nous avons détaillé les trois cas suivants: sans conversion du spin $U_2/U_0 = 0$ et avec des conversions du spin telles que $U_2/U_0 < 0$ et $U_2/U_0 > 0$. Pour ces trois cas, le diagramme de phase est composé de phases isolantes de Mott et d'une phase superfluide. De façon générale:

- le cas $U_2/U_0 < 0$ favorise des états sur site « ferromagnétiques » tels que le moment magnétique local $F^2(0)$ prend sa valeur *maximale* telle que $F^2(0) = \rho(\rho + 1)$. Les transitions de phases sont toutes du second ordre et toutes les phases de Mott disparaissent lorsque $|U_2|/U_0 = 0.5$.
- le cas $U_2/U_0 > 0$ favorise des états sur site « antiferromagnétiques » tels que le moment magnétique local $F^2(0)$ prend sa valeur *minimale*. Les transitions sont du second ordre, à l'exception des transitions localisées aux extrémités des lobes des phases de Mott de densités paires qui sont du premier ordre pour $U_2/U_0 \in]0, 0.2]$. Lorsque $U_2/U_0 = 0.5$, seules les phases de Mott de densités impaires disparaissent.

À l'exception du détail des densités et des propriétés magnétiques, la physique de ce système est très similaire à celle du système de bosons de spin-1/2 avec la correspondance $\Lambda \leftrightarrow \{(-1)\&(+1)\}$, soit $\rho_- = \rho_+ = \rho_\Lambda/2$. Nous allons maintenant poursuivre l'étude 2D du système de bosons de spin-1 avec la méthode de Monte Carlo quantique.

Chapitre 8

Étude en Monte Carlo quantique

Dans cette section, nous poursuivons l'étude 2D à température nulle du système de bosons de spin-1, décrit par le hamiltonien \mathcal{H}_{spin1} [Eq. (3.10)], avec la méthode de Monte Carlo quantique et l'algorithme des Fonctions de Green Stochastiques [95, 96]. Selon la théorie, de nouvelles phases magnétiques sont prédites, notamment l'ordre nématique et l'ordre dimérisé [4, 5]. La méthode du champ moyen, limitée au calcul de quantités sur site, ne permet pas de confirmer l'existence de telles phases. Bien que le champ moyen donne une première description des propriétés du système, il est nécessaire d'approfondir cette étude avec une méthode exacte, donnant accès au calcul des fonctions de corrélations.

Nous présentons dans ce chapitre nos résultats préliminaires, obtenus dans le sous-ensemble $F_z^{total} = 0$ de l'ensemble canonique. L'ordre magnétique, lorsqu'il existe, sera donc contraint dans le plan xy . Ce choix nous permettra de comparer nos résultats avec ceux d'autres groupes et nous permettra de compléter l'étude 1D précédemment effectuée par G. G. Batrouni *et al.* [22]. De plus, l'isotropie du spin du hamiltonien \mathcal{H}_{spin1} [terme (3.3)] nous permet de supposer que ce choix ne soustrait pas l'information physique essentielle du système. Nous effectuons actuellement une étude dans l'ensemble grand canonique afin d'approfondir ce point. Dans ce chapitre, le cas $U_2/U_0 = 0$ ne sera pas présenté. Nous présenterons directement les propriétés des phases des cas $U_2/U_0 < 0$ et $U_2/U_0 > 0$. Les transitions de phases sont aussi étudiées et nous discutons les différences entre la méthode de Monte Carlo quantique et celle du champ moyen.

8.1 Diagramme de phase et quantités physiques mesurées

Nous précisons ici les quantités mesurées avec la méthode de Monte Carlo quantique pour ce système. Afin d'alléger le contenu de ce chapitre, certains détails déjà présentés lors de l'étude du système de bosons de spin-1/2 ne seront pas mentionnés. Nous renvoyons donc le lecteur vers la [sous-section 5.2.1](#) pour plus de précisions sur les quantités discutées ci-dessous.

Le diagramme de phase est caractérisé par la mobilité des particules (isolant de Mott ou superfluide), par la distribution des densités des espèces (polarisée ou centrée), ainsi que par les propriétés magnétiques. Les informations principales pour déterminer le diagramme de phase sont données par les quantités suivantes:

- la densité $\rho_\sigma = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{n}_{\sigma\mathbf{r}} \rangle / L^2$ de l'espèce de spin $\sigma = \{-1, 0, +1\}$ avec $\mathbf{r} = (x, y)$ et L^2 le nombre de sites du réseau carré. La densité totale est $\rho = \rho_- + \rho_0 + \rho_+$;
- l'histogramme $P(\rho_\sigma)$ de la densité ρ_σ ;
- la densité superfluide ρ_s , détaillée ci-dessous.

Dans l'ensemble canonique, le nombre total de particules $N = N_- + N_0 + N_+$ est fixé et est relié au potentiel chimique par $\mu(N) = E(N+1) - E(N)$ à $T = 0$. Dans ce cas, l'énergie interne moyenne E est égale à l'énergie libre de l'état fondamental. Bien que N soit fixé, le nombre de particules de chaque espèce fluctue lorsque les conversions sont non nulles. L'expression générale de la densité superfluide [cf. Eq. (4.10)] devient dans ce cas

$$\rho_s = \frac{\langle (W_- + W_0 + W_+)^2 \rangle}{2dt\beta L^{d-2}}, \quad (8.1)$$

où $W = W_- + W_0 + W_+$ est le *winding number* [101, 102], $d = 2$ est la dimension, t est le paramètre de sauts du hamiltonien et $\beta = 1/k_B T$.

Les fonctions de corrélations, définies à partir d'opérateurs agissant simultanément sur au moins deux sites différents du système, nous apporterons des précisions importantes sur le détail des phases. Ces quantités sont:

- les corrélations spatiales densité-densité définies par $C_{\sigma\sigma'}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{n}_{\sigma\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{n}_{\sigma'\mathbf{r}} \rangle / L^2 = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\sigma\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\sigma\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\sigma'\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\sigma'\mathbf{r}} \rangle / L^2$ avec les spins σ et σ' égaux à $\{-1, 0, +1\}$;
- les fonctions de Green individuelles, définies par $G_\sigma(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\sigma\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\sigma\mathbf{r}} + \hat{a}_{\sigma\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\sigma\mathbf{r}+\mathbf{R}} \rangle / 2L^2$;
- la transformée de Fourier des fonctions de Green individuelles de chaque espèce:

$$\rho_\sigma(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R}} G_\sigma(\mathbf{R}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} / L^2, \quad (8.2)$$

avec \mathbf{q} le vecteur d'onde. En $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, cette quantité donne la fraction condensée de chaque espèce, la fraction condensée totale étant $\rho(\mathbf{q} = \mathbf{0}) = \sum_\sigma \rho_\sigma(\mathbf{q} = \mathbf{0})$;

- les fonctions de Green à deux corps de même espèce telles que

$$\begin{cases} G_-^{(2)}(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}} \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}} + h.c. \rangle / 2L^2 \\ G_0^{(2)}(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{0\mathbf{r}} \hat{a}_{0\mathbf{r}} + h.c. \rangle / 2L^2 \\ G_+^{(2)}(\mathbf{R}) &= \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}} \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}} + h.c. \rangle / 2L^2 \end{cases} \quad (8.3)$$

La fonction de Green $G_\sigma^{(2)}(\mathbf{R})$ est la valeur moyenne de l'opérateur qui détruit deux particules de même spin $\sigma = \{-1, 0, +1\}$ pour les récréer toutes les deux \mathbf{R} sites plus loin. Ces fonctions renseignent donc sur les déplacements corrélés de paires de particules de même espèce (cf. Figure 8.1). En l'absence de corrélation: $G_\sigma^{(2)}(\mathbf{R}) = G_\sigma(\mathbf{R})G_\sigma(\mathbf{R})$ et donc $G_\sigma^{(2)}(\mathbf{R}) \leq \rho_\sigma^2$;

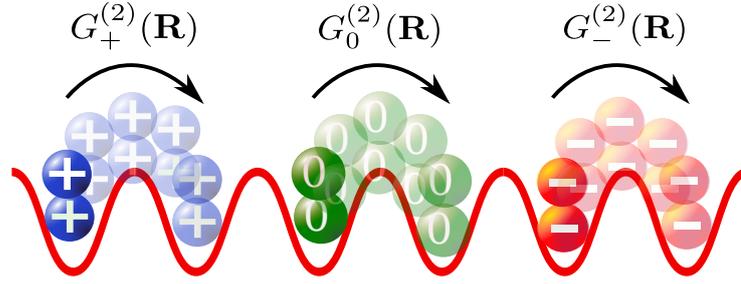


FIGURE 8.1 – Représentation de l'action des fonctions de Green à deux corps de même espèce.

- les fonctions de Green corrélées et anticorrélées de paires de particules de spin différent telles que

$$\begin{cases} G_c(+-, \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}} \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}} + h.c. \rangle / 2L^2 \\ G_a(+-, \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}} + h.c. \rangle / 2L^2 \\ G_a(+0, \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}} \hat{a}_{0\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} + h.c. \rangle / 2L^2 \\ G_a(0-, \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}} \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}+\mathbf{R}} + h.c. \rangle / 2L^2 \end{cases} \quad (8.4)$$

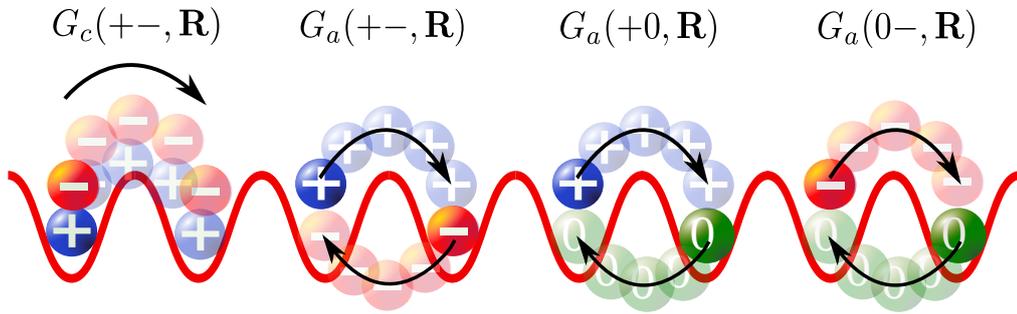


FIGURE 8.2 – Actions des fonctions de Green de paire de particules de spin différent.

La fonction de Green $G_c(+-, \mathbf{R})$ est la valeur moyenne de l'opérateur qui détruit un couple de particules de spin $+1$ et -1 situées sur le même site pour le récréer \mathbf{R} sites plus loin. En l'absence de corrélation: $G_c(+-, \mathbf{R}) = G_+(\mathbf{R})G_-(\mathbf{R})$ et donc $G_c(+-, \mathbf{R}) \leq \rho_+\rho_-$.

Les fonctions de Green anticorrélées $G_a(+-, \mathbf{R})$, $G_a(+0, \mathbf{R})$ et $G_a(0-, \mathbf{R})$ représentent la valeur moyenne de l'opérateur qui déplace simultanément une particule de spin σ du site A vers le site B et une particule de spin $\sigma' \neq \sigma$ du site B vers le site A, les sites A et B étant deux sites quelconques du système distants de \mathbf{R} sites. Ceci représente un mouvement anticorrélé de deux particules de spin différent (*cf.* Figure 8.2). Dans la phase superfluide, lorsque les particules présentent individuellement une cohérence de phase et qu'aucune corrélation n'existe entre elles, les fonctions de Green anticorrélées valent le produit des fonctions de Green individuelles;

- les fonctions de Green corrélées et anticorrélées de paires de particules avec conversions du spin:

$$\left\{ \begin{array}{l} G_c(+ - 00, \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}} \hat{a}_{0\mathbf{r}} \rangle / L^2 \\ G_c(00 - +, \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}} \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}} \rangle / L^2 \\ G_a(+ - 00, \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{0\mathbf{r}} \rangle / L^2 \\ G_a(00 - +, \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{a}_{0\mathbf{r}+\mathbf{R}}^\dagger \hat{a}_{0\mathbf{r}}^\dagger \hat{a}_{\downarrow\mathbf{r}+\mathbf{R}} \hat{a}_{\uparrow\mathbf{r}} \rangle / L^2 \end{array} \right. \quad (8.5)$$

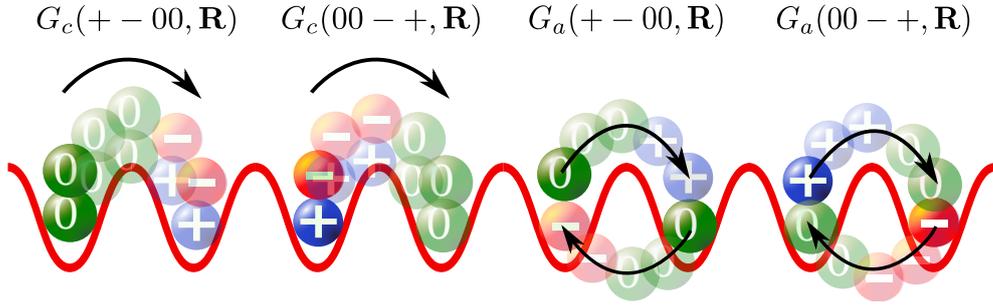


FIGURE 8.3 – Actions des fonctions de Green de paires avec conversions du spin.

La fonction de Green $G_c(+ - 00, \mathbf{R})$ détruit deux particules de spin 0 et crée un couple de particule de spin ± 1 \mathbf{R} sites plus loin. Lors de ce déplacement, il s'est opéré une conversion du spin des particules initiales. La fonctions de Green $G_c(00 - +, \mathbf{R})$ effectue l'action inverse. La fonction de Green anticorrélée $G_a(+ - 00, \mathbf{R})$ transforme simultanément une particule de spin 0 sur le site A en une particule de spin +1 sur le site B et une particule de spin 0 du site B en une particule de spin -1 sur le site A, les sites A et B étant deux sites quelconques du système distants de \mathbf{R} sites (*cf.* Figure 8.3). La fonction de Green $G_a(00 - +, \mathbf{R})$ effectue l'action inverse ;

- les corrélations spin-spin définies par

$$\left\{ \begin{array}{l} F_{xx}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{F}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^x \hat{F}_{\mathbf{r}}^x \rangle / L^2 \\ F_{yy}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{F}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^y \hat{F}_{\mathbf{r}}^y \rangle / L^2 \\ F_{zz}(\mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{r}} \langle \hat{F}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^z \hat{F}_{\mathbf{r}}^z \rangle / L^2 \end{array} \right. \quad (8.6)$$

où $\hat{F}_{\mathbf{r}}^x$, $\hat{F}_{\mathbf{r}}^y$ et $\hat{F}_{\mathbf{r}}^z$ sont les opérateurs de spins précédemment définis par l'Eq. (7.2). La symétrie des opérateurs $\hat{F}_{\mathbf{r}}^x$ et $\hat{F}_{\mathbf{r}}^y$ implique que les valeurs moyennes $\langle \hat{F}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^x \hat{F}_{\mathbf{r}}^x \rangle$ et $\langle \hat{F}_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}^y \hat{F}_{\mathbf{r}}^y \rangle$ sont égales $\forall \mathbf{R}$, soit $F_{xx}(\mathbf{R}) = F_{yy}(\mathbf{R})$, $\forall \mathbf{R}$. D'autre part, $F_{zz}(\mathbf{R})$ peut s'écrire en fonction des corrélations densité-densité:

$$F_{zz}(\mathbf{R}) = C_{++}(\mathbf{R}) + C_{--}(\mathbf{R}) - 2C_{+-}(\mathbf{R}); \quad (8.7)$$

- le moment magnétique local: $F^2(0) = F_{xx}(0) + F_{yy}(0) + F_{zz}(0)$;
- le facteur de structure magnétique, transformée de Fourier des corrélations spin-spin ren-
seignant sur l'ordre magnétique:

$$\begin{cases} S_{xx}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} F_{xx}(\mathbf{R}) \\ S_{yy}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} F_{yy}(\mathbf{R}) \\ S_{zz}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} F_{zz}(\mathbf{R}) \end{cases} \quad (8.8)$$

L'égalité $F_{xx}(\mathbf{R}) = F_{yy}(\mathbf{R}), \forall \mathbf{R}$, implique que $S_{xx}(\mathbf{q}) = S_{yy}(\mathbf{q}), \forall \mathbf{q}$. La signature d'un ordre ferromagnétique est $S_{\alpha\alpha}(\mathbf{q} = \mathbf{0}) \neq 0$ lorsque $L \rightarrow \infty$. Lorsque les spins sont désordonnés, cette quantité est nulle $\forall \mathbf{q}$. Cette quantité est aussi nulle dans la phase nématique discutée ci-dessous ;

- le paramètre d'ordre nématique, tenseur \mathcal{Q} de trace nulle dont les composantes diagonales sont:

$$\begin{cases} Q_{xx} = F_{xx}(0) - \frac{1}{3}F^2(0) \\ Q_{yy} = F_{yy}(0) - \frac{1}{3}F^2(0) \\ Q_{zz} = F_{zz}(0) - \frac{1}{3}F^2(0) \end{cases} \quad (8.9)$$

Ces quantités, telles que $Q_{xx} + Q_{yy} + Q_{zz} = 0$, sont nulles lorsque les spins sont isotropes et sont non-nulles lorsqu'une direction magnétique est privilégiée. Dans notre cas, l'égalité $F_{xx}(\mathbf{R}) = F_{yy}(\mathbf{R}), \forall \mathbf{R}$ implique que $Q_{zz} = -2Q_{xx} = -2Q_{yy}$, ce qui restreint cette quantité à l'unique paramètre Q_{zz} . Selon les références [4, 5, 22], deux types d'ordre magnétique privilégiant un axe magnétique sont attendus: l'ordre nématique, pour lequel l'aimantation est nulle, et l'ordre ferromagnétique. Ces ordres sont illustrés ci-dessous.

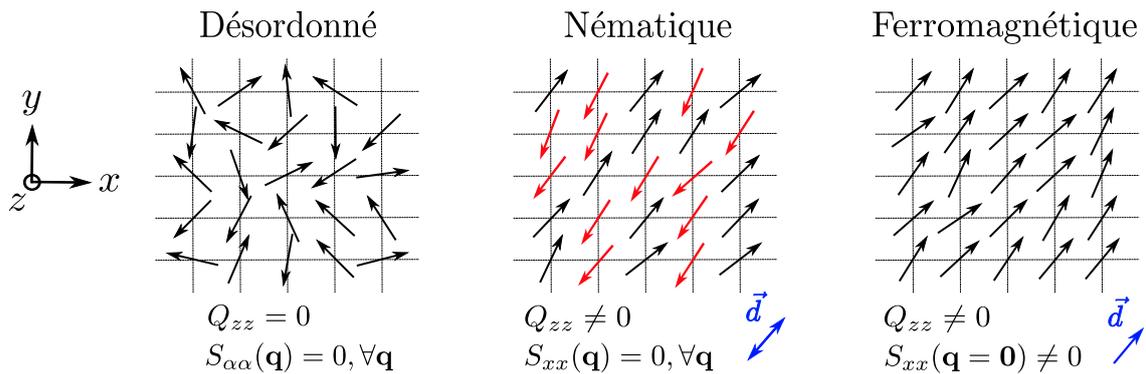


FIGURE 8.4 – Lorsque le système est désordonné magnétiquement, les spins sont isotropes ($Q_{zz} = 0$) et aucune aimantation n'existe ($S_{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) = 0, \forall \mathbf{q}$). Dans la phase nématique et ferromagnétique, un axe magnétique \vec{d} est privilégié ($Q_{zz} \neq 0$). Cependant, l'aimantation est nulle dans la phase nématique ($S_{xx}(\mathbf{q}) = 0, \forall \mathbf{q}$) à l'inverse de la phase ferromagnétique qui privilégie, en moyenne, un sens commun aux spins ($S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0}) \neq 0$).

Il est possible de discriminer la phase superfluide d'une phase désordonnée incompressible (Mott) en traçant simplement ρ et ρ_s en fonction de μ/U_0 pour différentes valeurs de t/U_0 . Ceci représente une coupe verticale du diagramme de phase pour une valeur de t/U_0 fixée (cf. Figure 8.13, par exemple). Dans l'ensemble canonique, une telle coupe est obtenue en augmentant le nombre total de particules d'une unité simulation par simulation.

8.2 Interaction ferromagnétique: $U_2/U_0 < 0$

Pour $|U_2|/U_0 < 0.5$, le diagramme de phase est composé de phases isolantes de Mott et d'une phase condensée de Bose-Einstein superfluide. Toutes les phases de Mott disparaissent lorsque $|U_2|/U_0 = 0.5$. La Figure 8.5 représente le diagramme de phase obtenu avec $U_2/U_0 = -0.1$ pour différentes tailles. Dans tout le diagramme de phase, il n'existe aucun ordre de densité, les valeurs asymptotiques des corrélations densité-densité sont égales aux produits des densités: $C_{\sigma\sigma'}(\mathbf{L}/2) \simeq \rho_\sigma \rho_{\sigma'}$. D'après l'Eq. (8.7), ceci implique que $F_{zz}(\mathbf{L}/2) \simeq 0$ et, par conséquent, $S_{zz}(\mathbf{q}) \simeq 0, \forall \mathbf{q}$. Les quantités Q_{zz} et $S_{xx}(\mathbf{q})$ permettent donc de décrire complètement l'ordre magnétique, contraint dans le plan xy .

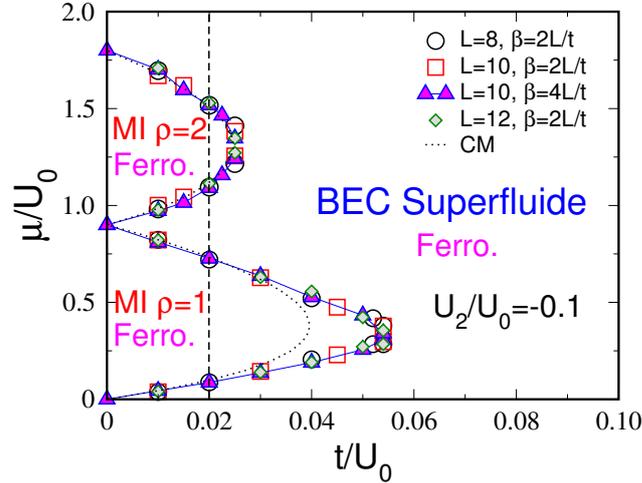


FIGURE 8.5 – Diagramme de phase en Monte Carlo quantique avec $U_2/U_0 = -0.1$ et diagramme de phase en champ moyen en pointillés (cf. Figure 7.4). La superfluidité est une propriété d'une phase condensée de Bose-Einstein (BEC). Dans toutes les phases de ce diagramme $\rho_0 = 2\rho_- = 2\rho_+ = \rho/2$ et un ordre ferromagnétique existe. Selon les deux méthodes, les transitions de phases sont toutes du second ordre. La ligne verticale en trait discontinu correspond à la coupe de la Figure 8.13 à gauche.

Sur la Figure 8.5, les lobes des phases de Mott se sont arrondis par rapport à ceux du cas 1D [22]. La décroissance en loi de puissance des lobes indique que les transitions au bout des lobes sont du second ordre. Par ailleurs, la théorie précise que ces transitions sont de la classe d'universalité du modèle XY 3D, à l'inverse du cas 1D pour lequel ces transitions sont de la classe d'universalité de Kosterlitz-Thouless du modèle XY bidimensionnel [66]. De plus, un ordre ferromagnétique existe dans le plan xy dans toutes les phases de ce diagramme. Le diagramme de phase en champ moyen, tracé en pointillés, permet de constater que l'accord qualitatif et quantitatif des deux méthodes est assez satisfaisant, surtout pour la densité $\rho = 2$ pour laquelle les lobes MI sont pratiquement confondus.

Phases de Mott $\rho = 1$ et $\rho = 2$

Pour ces deux phases de Mott:

- les densités valent $\rho_0 = 2\rho_- = 2\rho_+ \simeq \rho/2$. Les histogrammes des particules de spin ± 1 sont égaux et centrés en $\rho_{\pm} = \rho/4$, alors que l’histogramme des particules de spin 0 est centré en $\rho_0 = \rho/2$ (cf. Figure 8.6) ;
- le Tableau 8.1 indique les densités, les valeurs des corrélations spin-spin sur site et le paramètre d’ordre nématique Q_{zz} des états équiprobables des phases de Mott $\rho = \{1, 2\}$ obtenus en champ moyen (CM) et mesurés en Monte Carlo quantique (MCQ) dans tout le lobe. La comparaison des valeurs moyennes associées aux états du CM, en bleu, avec celles du MCQ, en rouge, montre que les simulations en MCQ ne visitent pas ces états avec la même probabilité, bien que $F^2(0) \simeq \rho(\rho + 1)$ soit cohérente avec les deux méthodes. En effet, selon la méthode de Monte Carlo quantique, le moment magnétique local moyen est favorisé dans le plan xy et le paramètre d’ordre nématique est non nul. Il est possible que la contrainte $F_z^{total} = 0$ imposée dans nos simulations favorise les états minimisant $F_{zz}(0)$ en changeant le poids statistique des états dégénérés sur site. L’analyse du système dans l’ensemble grand canonique, actuellement en cours, devrait nous permettre de mieux comprendre ces résultats (origine physique ou artefact numérique). Pour la phase de Mott $\rho = 1$, les mêmes résultats ont été trouvés par Toga *et al.* en utilisant une méthode de Monte Carlo variationnelle avec $F_z^{total} = 0$ [126].

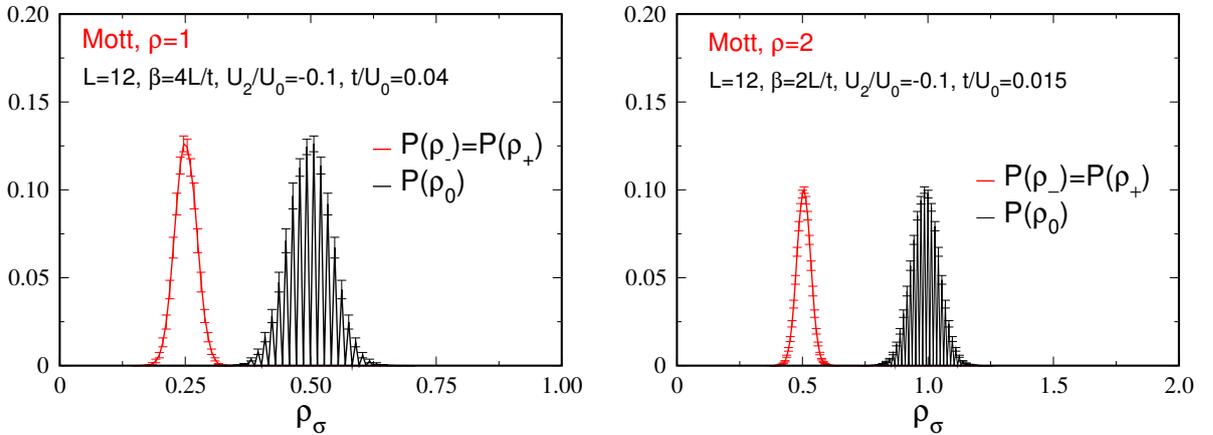


FIGURE 8.6 – Histogrammes des densités $P(\rho_-)$, $P(\rho_+)$ et $P(\rho_0)$ dans les phases de Mott de densités $\rho = \{1, 2\}$ avec $U_2/U_0 = -0.1$. Les valeurs nulles de $P(\rho_0)$ pour des densités $\rho_0 = N_0/L^2$ avec N_0 impair montrent que le nombre de particules de spin 0 fluctue par paires à cause du terme de conversion du spin: partant d’un état initial avec N_0 pair, la probabilité d’avoir un nombre impair de bosons de spin 0 est nulle.

Concernant les fonctions de corrélations des deux phases de Mott:

- les fonctions de Green individuelles $G_\sigma(\mathbf{R})$ avec $\sigma = \{-1, 0, +1\}$ décroissent exponentiellement alors que les fonctions $G_a(+-, \mathbf{R})$ et $G_a(\pm 0, \mathbf{R})$ saturent vers leurs valeurs asymptotiques.

tiques *maximales* telles que $G_a(+-, \mathbf{L}/2) \simeq \rho_+\rho_-$ et $G_a(-0, \mathbf{L}/2) = G_a(+0, \mathbf{L}/2) \simeq \rho_-\rho_0$ (cf. Figure 8.7). Ceci indique qu'il existe des mouvements parfaitement cohérents anticorrélés de paires de particules de spins différents $+-, +0$ et -0 . De plus, le plateau de $G_a(+ - 00, \mathbf{R})$ en $G_a(+ - 00, \mathbf{R} = \mathbf{L}/2) \simeq \rho_-\rho_0$ indique qu'il existe aussi des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules de spins différents avec conversions. Ces types de mouvements permettent de lever la dégénérescence de cette phase présente lorsque $t/U_0 = 0$;

- il existe des corrélations spin-spin à longue portée dans le plan xy telles que $F_{xx}(\mathbf{L}/2) = F_{yy}(\mathbf{L}/2) \simeq 0.5$ pour $\rho = 1$ et $F_{xx}(\mathbf{L}/2) = F_{yy}(\mathbf{L}/2) \simeq 2$ pour $\rho = 2$ (cf. Figure 8.8).

	État $ n_-, n_0, n_+\rangle$	ρ_-	ρ_0	ρ_+	$F_{xx}(0)$	$F_{zz}(0)$	$F^2(0)$	Q_{zz}
Mott $\rho = 1$	CM $ 100\rangle$	1	0	0	0.5	1	2	1/3
	CM $ 010\rangle$	0	1	0	1	0	2	-2/3
	CM $ 001\rangle$	0	0	1	0.5	1	2	1/3
	CM moyenne	1/3	1/3	1/3	2/3	2/3	2	0
	MCQ	$\sim 1/4$	$\sim 1/2$	$\sim 1/4$	$\sim 3/4$	$\sim 1/2$	~ 2	$\sim -1/6$
Mott $\rho = 2$	CM $ 200\rangle$	2	0	0	1	4	6	2
	CM $ 002\rangle$	0	0	2	1	4	6	2
	CM $ 110\rangle$	1	1	0	5/2	1	6	-1
	CM $ 011\rangle$	0	1	1	5/2	1	6	-1
	CM $(\sqrt{2} 020\rangle + 101\rangle)/\sqrt{3}$	1/3	4/3	1/3	3	0	6	-2
	CM moyenne	2/3	2/3	2/3	2	2	6	0
	MCQ	$\sim 1/2$	~ 1	$\sim 1/2$	$\sim 5/2$	~ 1	~ 6	~ -1

TABLE 8.1 – Densités, corrélations spin-spin sur site [Eq. (8.6)] et paramètre d'ordre nématique Q_{zz} [Eq. (7.4)] des états des phases de Mott $\rho = \{1, 2\}$ obtenus en champ moyen (CM) et mesurés en Monte Carlo quantique (MCQ) avec $U_2/U_0 = -0.1$. Les valeurs en bleu correspondent aux valeurs moyennes des quantités obtenues en CM. Les quantités mesurées avec la méthode de MCQ, en rouge, ne correspondent pas aux valeurs moyennes du CM.

Nous traçons sur la Figure 8.8 à droite le facteur de structure magnétique $S_{xx}(\mathbf{q})$ en fonction de q_x et q_y . La coupe de $S_{xx}(\mathbf{q})$ en $q_y = 0$ est représentée sur la Figure 8.8 en bas à gauche avec $L = \{8, 10, 12\}$. Le pic du facteur de structure magnétique $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2 \simeq 0.5$ pour $\rho = 1$ ($S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2 \simeq 2$ pour $\rho = 2$) persiste lorsque la taille augmente: un ordre ferromagnétique existe.

Pour la phase de Mott $\rho = 1$, A. Imambekov *et al.* [4, 5] montrent que, dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$, le hamiltonien \mathcal{H}_{spin1} [Eq. (3.10)] peut s'écrire sous la forme d'un hamiltonien effectif de Heisenberg tel que

$$\mathcal{H}_{eff} = -J_0 - J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{\mathbf{F}}_i \cdot \hat{\mathbf{F}}_j - J_2 \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{\mathbf{F}}_i \cdot \hat{\mathbf{F}}_j)^2, \quad (8.10)$$

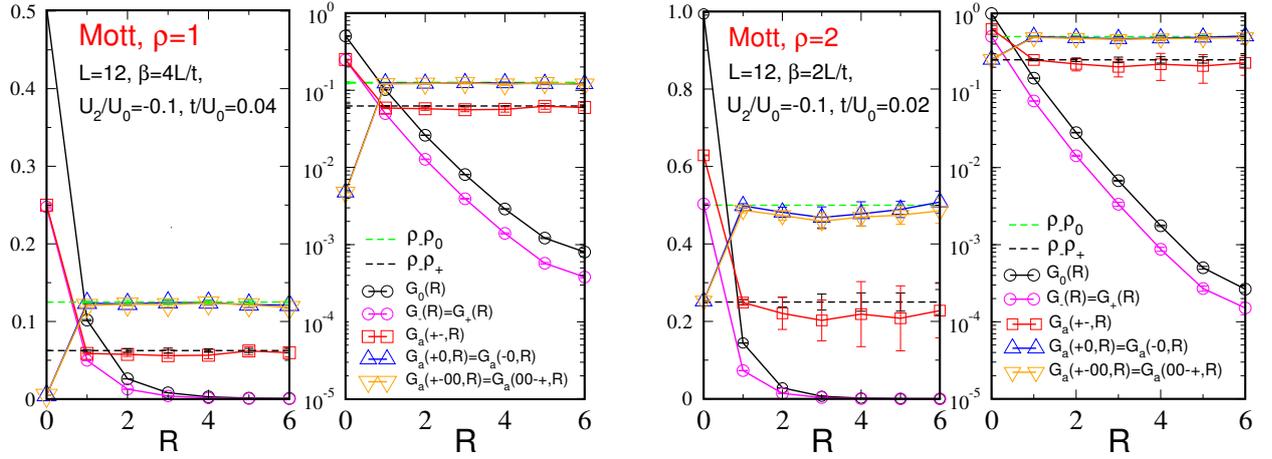


FIGURE 8.7 – Fonctions de Green en échelle linéaire et semi-log pour les phases de Mott $\rho = 1$ et $\rho = 2$ avec $U_2/U_0 = -0.1$.

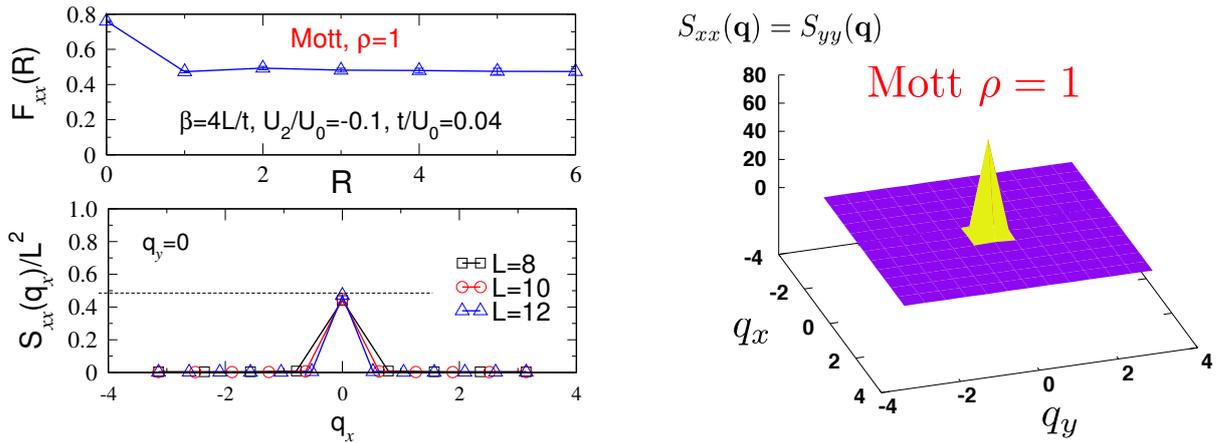
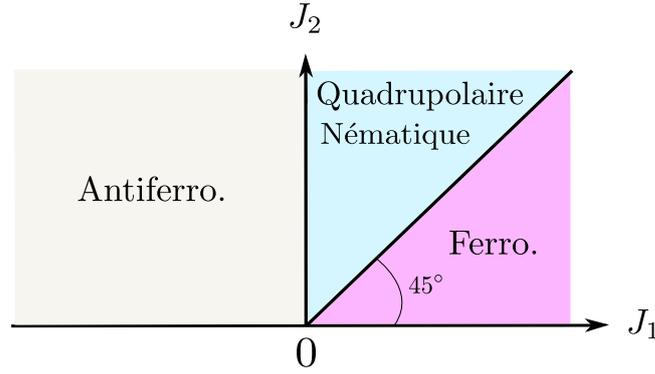


FIGURE 8.8 – Pour la phase de Mott $\rho = 1$ avec $\beta = 4L/t$, $U_2/U_0 = -0.1$ et $t/U_0 = 0.04$. À droite: facteur de structure magnétique [Eq. (8.8)] en fonction de $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ pour $L = 12$. À gauche en haut: il existe des corrélations spin-spin à longue portée telles que $F_{xx}(\mathbf{L}/2) = F_{yy}(\mathbf{L}/2) \simeq 0.5$. À gauche en bas: coupe du graphe de droite en $q_y = 0$ pour trois systèmes de taille $L \times L$ avec $L = \{8, 10, 12\}$ normalisé par L^2 . Les mêmes comportements sont observés pour la phase de Mott $\rho = 2$.

où $\hat{\mathbf{F}}_i$ est l'opérateur de spin au site i défini par l'Eq. (7.2). Nous montrons sur la Figure 8.9 le diagramme de phase de ce hamiltonien, établi en 2D à température nulle par K. Harada et N. Kawashima avec $J_2 > 0$ [127, 128]. Lorsque $J_1 < 0$, le système est antiferromagnétique $\forall J_2$. Lorsque $J_1 > 0$, le système est ferromagnétique lorsque $J_1 > J_2$ et est quadrupolaire, ou nématique, lorsque $J_1 < J_2$.


 FIGURE 8.9 – Diagramme de phase du hamiltonien effectif \mathcal{H}_{eff} [Eq. (8.10)] à température nulle.

Selon A. Imambekov, les couplages des spins du hamiltonien \mathcal{H}_{eff} valent

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{2t^2}{U_0 + U_2} \\ J_2 &= \frac{2t^2 U_0}{(U_0 + U_2)(U_0 - 2U_2)} \end{aligned} \quad (8.11)$$

Avec $U_2 < 0$, nous obtenons donc $J_1/J_2 = 1 + 2|U_2/U_0|$, soit $0 < J_2 < J_1$. Le système est donc ferromagnétique, conformément à nos mesures en Monte Carlo quantique.

Phase superfluide $\rho = 1$ et $\rho = 2$

- les densités des espèces sont telles que $\rho_0 = 2\rho_- = 2\rho_+ \simeq \rho/2$ et les histogrammes sont similaires à ceux des phases de Mott $\rho = \{1, 2\}$ (cf. Figure 8.6). Ces distributions sont cohérentes avec l'analyse en champ moyen. De plus, le champ moyen prédit que les densités superfluides suivent aussi ces distributions: $\rho_{s0} = 2\rho_{s-} = 2\rho_{s+} = \rho_s/2$. Cependant, il n'est pas possible de vérifier cette prédiction car les densités superfluides ne peuvent pas être calculées indépendamment lorsqu'il existe des conversions entre les espèces [117].
- le moment magnétique local est favorisé dans le plan xy . Avec $t/U_0 = 0.15$, nous mesurons :
 - pour $\rho = 1$, $F_{xx}(0) = F_{yy}(0) \simeq 1$, $F_{zz}(0) \simeq 0.5$, soit $F^2(0) \simeq 2.5$;
 - pour $\rho = 2$, $F_{xx}(0) = F_{yy}(0) \simeq 3$, $F_{zz}(0) \simeq 1$, soit $F^2(0) \simeq 7$.

À l'inverse des phases de Mott dans lesquelles nous mesurons $F^2(0) \simeq \rho(\rho + 1)$, le moment magnétique local fluctue à cause des mouvements cohérents individuels des particules, d'où $F^2(0) > \rho(\rho + 1)$.

Concernant les fonctions de corrélations pour les deux densités:

- les fonctions de Green individuelles saturent ($G_\sigma(\mathbf{L}/2) \simeq \rho_\sigma$ pour $\rho = 2$): des mouvements cohérents de particules individuelles existent (cf. Figure 8.10). Le plateau des fonctions de Green individuelles, indiquant un ordre de phase à longue portée et le théorème de

Mermin-Wagner-Hohenberg [67, 68, 69] nous permettent de conclure qu'un condensat de Bose-Einstein existe ;

- il existe des mouvements anticorrélés de paires de particules de spins $+-$, $+0$ et -0 . En effet, en l'absence de corrélation nous devrions mesurer $G_a(+-, \mathbf{L}/2) = G_+(\mathbf{L}/2)G_-(\mathbf{L}/2)$ et $G_a(\pm 0, \mathbf{L}/2) = G_{\pm}(\mathbf{L}/2)G_0(\mathbf{L}/2)$. Il est clairement montré sur la Figure 8.10 que ces fonctions atteignent des plateaux supérieurs à ces limites ;
- le plateau de $G_a(+ - 00, \mathbf{L}/2) > G_c(+ - 00, \mathbf{L}/2)$ indique que les mouvements anticorrélés de paires de particules de spin différent avec conversion sont favorisés par rapport aux mouvements corrélés (cf. Figure 8.10) ;
- il existe des corrélations spin-spin à longue portée dans le plan xy telles que $F_{xx}(\mathbf{L}/2) = F_{yy}(\mathbf{L}/2) \simeq 0.5$ pour $\rho = 1$ et $F_{xx}(\mathbf{L}/2) = F_{yy}(\mathbf{L}/2) \simeq 2$ pour $\rho = 2$ (similaire aux phases de Mott, cf. Figure 8.8).

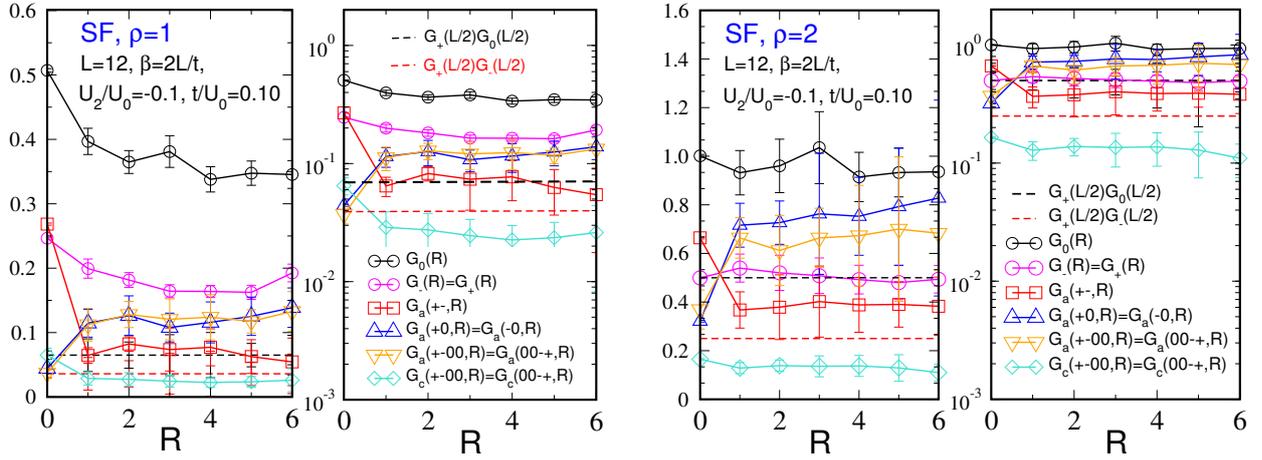


FIGURE 8.10 – Fonctions de Green en échelle linéaire et semi-log pour la phase superfluide avec $\rho = 1$ et $\rho = 2$ et $U_2/U_0 = -0.1$. Les mouvements corrélés sont défavorisés par rapport aux mouvements anticorrélés.

Enfin, comme dans les phases de Mott, le facteur de structure magnétique présente un pic en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ tel que $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2 \simeq 0.5$ ($\simeq 2$) pour $\rho = 1$ ($\rho = 2$). Ce pic persiste lorsque la taille augmente: un ordre ferromagnétique existe.

Transitions de phases

La Figure 8.11 montre l'évolution de ρ_s en fonction de t/U_0 pour $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec $U_2/U_0 = -0.1$ pour trois tailles. Pour les deux densités, les effets de taille finie sont négligeables et il n'y a aucun signe visible de discontinuité lorsque la taille augmente: les transitions sont du second ordre. Selon des argument théoriques de *scaling* [66], ces transitions sont de la classe d'universalité du modèle XY 3D. L'ordre des transitions est en accord avec le champ moyen.

D'autre part, la Figure 8.12 montre la valeur du pic du facteur de structure magnétique normalisée $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$ lors de ces transitions. Les effets de taille finie sont faibles pour les deux tailles étudiées. La valeur de $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$ reste quasi constante durant toute la transition: $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2 \simeq 0.5$ ($\simeq 2$) pour $\rho = 1$ ($\rho = 2$). Ces résultats montrent que, à l'inverse du moment magnétique local qui varie d'une phase à l'autre, l'aimantation ferromagnétique globale, présente dans le plan xy , est fixée par la densité et dépend peu du paramètre t/U_0 .

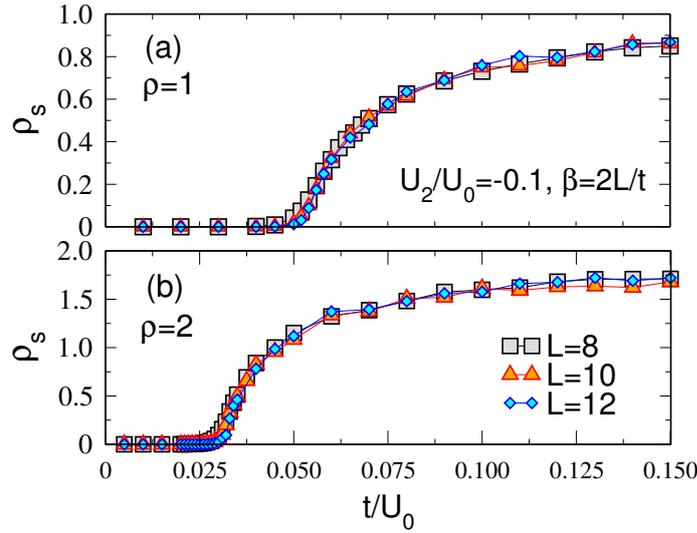


FIGURE 8.11 – Densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 lors de la transition Mott-superfluide pour les densités constantes $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec $U_2/U_0 = -0.1$. Ces transitions, du second ordre, sont de la classe d'universalité du modèle XY 3D.

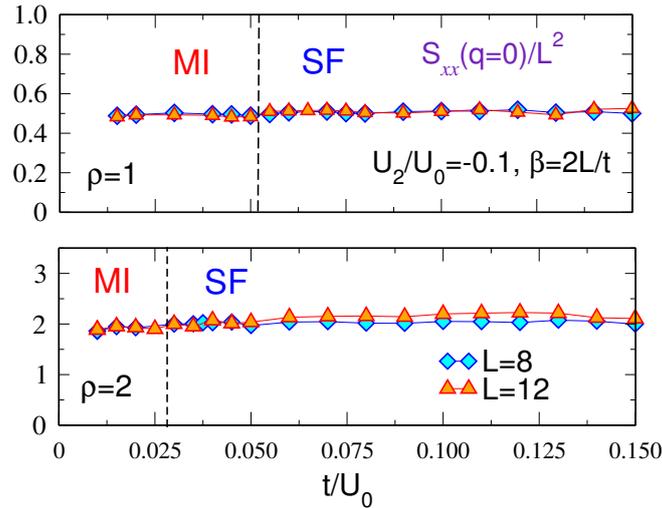


FIGURE 8.12 – Évolution du pic du facteur de structure magnétique normalisé $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$ pour $L = \{8, 12\}$ avec $U_2/U_0 = -0.1$ et $\rho = 1$ ($\rho = 2$) en haut (en bas). Cette valeur est quasi constante lors de cette transition pour les deux densités.

Nous présentons sur la Figure 8.13 de gauche l'évolution de la densité totale ρ et de la densité superfluide ρ_s en fonction de μ/U_0 associée à la coupe verticale du diagramme de phase (cf. Figure 8.5) en trait discontinu situé en $t/U_0 = 0.02$. Cette coupe traverse les phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3\}$ et la phase superfluide. Les densités ρ et ρ_s évoluent continûment, signe que toutes les transitions sont du second ordre.

La Figure 8.13 de droite montre le comportement du pic du facteur de structure magnétique normalisé $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$, du moment magnétique local $F^2(0)$ et de la densité superfluide ρ_s en fonction de ρ associé à cette coupe. Le moment magnétique local $F^2(0)$ augmente linéairement par paliers en fonction de ρ :

- $\partial F^2(0)/\partial \rho = 2$ sur l'intervalle $\rho \in]0, 1[$: sur cet intervalle, le spin de chaque nouvelle particule ajoutée contribue à ajouter au système un spin tel que $F^2(0) = 2$;
- $\partial F^2(0)/\partial \rho = 4$ sur l'intervalle $\rho \in]1, 2[$: sur cet intervalle, il existe plus d'une particule par site. Chaque nouvelle particule ajoutée va donc rencontrer une autre particule déjà présente. Le spin de la paire contribue à ajouter au système un spin tel que $F^2(0) = 6$;
- $\partial F^2(0)/\partial \rho = 6$ sur l'intervalle $\rho \in]2, 3[$: sur cet intervalle, il existe plus de deux particules par site. Chaque nouvelle particule ajoutée va donc rencontrer deux autres particules déjà présentes. Le spin du trio contribue à ajouter au système un spin tel que $F^2(0) = 12$. Ainsi de suite ...

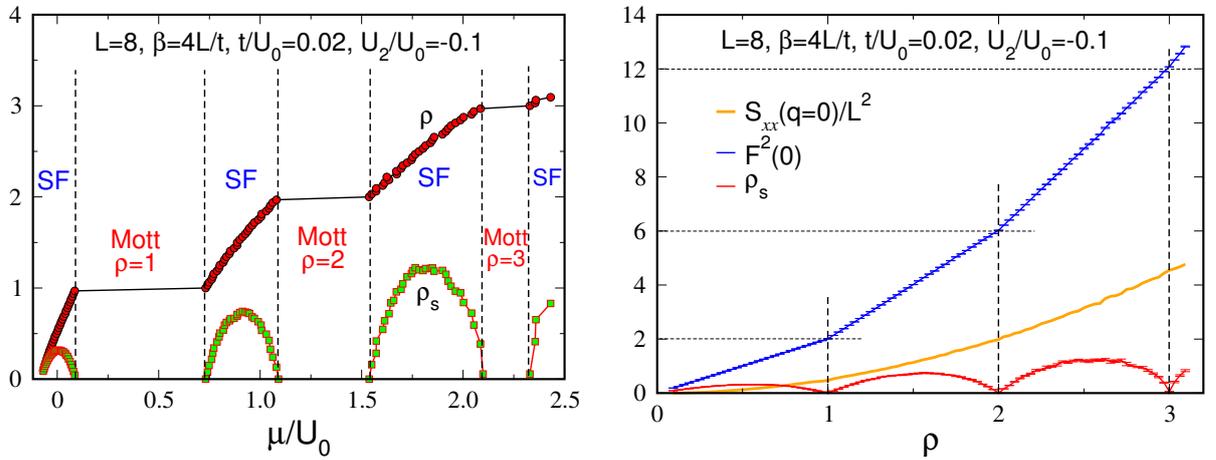


FIGURE 8.13 – À gauche: évolution de la densité totale ρ et de la densité superfluide ρ_s en fonction de μ/U_0 lors de la coupe verticale du diagramme de phase (cf. Figure 8.5) en trait discontinu situé en $t/U_0 = 0.02$. Cette coupe traverse les phases de Mott $\rho = \{1, 2, 3\}$. Les densités ρ et ρ_s évoluent continûment, signature de transitions du second ordre. À droite: évolution du pic du facteur de structure magnétique normalisé $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$, du moment magnétique local $F^2(0)$ et de la densité superfluide ρ_s en fonction de la densité ρ associée à la coupe de gauche.

8.3 Interaction antiferromagnétique: $U_2/U_0 > 0$

Lorsque $U_2/U_0 \leq 0.5$, le diagramme de phase est composé de phases isolantes de Mott et d'une phase condensée de Bose-Einstein superfluide. Seules les phases de Mott de densités impaires disparaissent lorsque $U_2/U_0 = 0.5$. Ceci est cohérent avec l'analyse en champ moyen (*cf.* Figure 7.9).

La Figure 8.14 représente le diagramme de phase obtenu avec $U_2/U_0 = 0.1$ pour les tailles $L = \{8, 10, 12\}$. Les trois tailles donnent les mêmes résultats: les effets de taille finie sur l'énergie sont négligeables. De même, les points pour $L = 10$ avec $\beta = 2L/t$ et $\beta = 4L/t$ se superposent, ce qui signifie que la limite de température nulle est raisonnablement atteinte pour ces valeurs. Afin de comparer les deux méthodes, le diagramme en champ moyen est tracé en pointillés. La zone métastable existant au bout du lobe MI $\rho = 2$ est délimitée par les traits en pointillés noirs et rouges. L'accord qualitatif des deux méthodes est assez satisfaisant en ce qui concerne la délimitation des deux phases. Comme pour le cas précédent $U_2/U_0 < 0$, dans tout le diagramme de phase, les valeurs asymptotiques des corrélations densité-densité sont égales aux produits des densités: $C_{\sigma\sigma'}(\mathbf{L}/2) \simeq \rho_\sigma \rho_{\sigma'}$. D'après l'Eq. (8.7), ceci implique que $F_{zz}(\mathbf{L}/2) \simeq 0$ et, par conséquent, $S_{zz}(\mathbf{q}) \simeq 0, \forall \mathbf{q}$. Les quantités Q_{zz} et $S_{xx}(\mathbf{q})$ permettent donc, ici aussi, de décrire complètement l'ordre magnétique contraint dans le plan xy , lorsque celui-ci existe. Nous montrerons que, dans ce diagramme excepté dans la phase de Mott $\rho = 2$, il existe une aimantation ferromagnétique dans le plan xy .

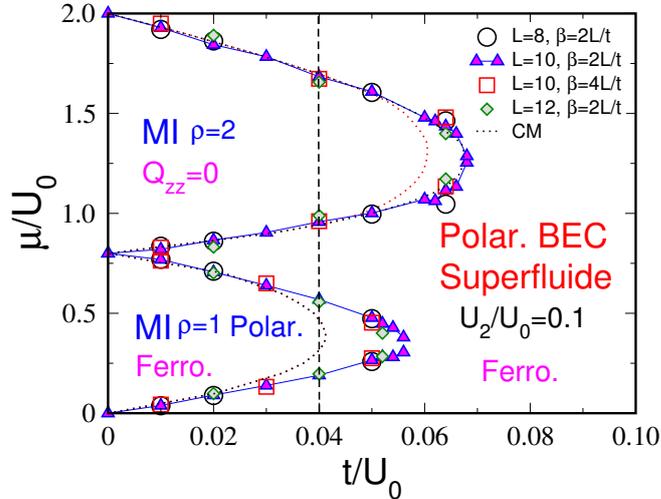


FIGURE 8.14 – Diagramme de phase en Monte Carlo quantique avec $U_2/U_0 = 0.1$ et diagramme de phase en champ moyen en pointillés (*cf.* Figure 7.8). La fraction condensée et la densité superfluide, simultanément non nulles, indiquent que la superfluidité est une propriété d'une phase condensée de Bose-Einstein (BEC). Dans la phase MI $\rho = 2$, les trois populations sont équilibrées. Cette phase, décrite par un état singulet sur site tel que $F^2(0) \simeq 0$, ne présente aucun ordre magnétique ($Q_{zz} \simeq 0$). Dans la phase MI $\rho = 1$ et dans toute la phase BEC superfluide, les histogrammes des densités sont polarisés et il existe un ordre ferromagnétique dans le plan xy . Les transitions de phase sont du second ordre, excepté au bout du lobe MI $\rho = 2$ où les transitions sont du premier ordre, en accord avec le champ moyen. La ligne verticale en trait discontinu correspond à la coupe de la Figure 8.27 à gauche.

Phase de Mott $\rho = 1$

Les histogrammes $P(\rho_-) = P(\rho_+)$ et $P(\rho_0)$ sont tracés sur la Figure 8.15 pour quatre tailles et pour différents états initiaux avec $U_2/U_0 = 0.1$. L'histogramme $P(\rho_0)$ [$P(\rho_{\pm})$] se concentre en un pic situé proche de $\rho_0 \simeq 0$ [$\rho_{\pm} \simeq 0.5$] au fur et à mesure que la taille augmente: les histogrammes sont polarisés. Cette polarisation est observée pour différents états initiaux. Pour de grandes tailles, le système à l'équilibre est donc essentiellement composé de bosons de spins ± 1 et les particules de spin 0 sont minoritaires. L'étude en champ moyen a montré que cette phase est décrite par les trois états équiprobables $|100\rangle$, $|010\rangle$ et $|001\rangle$. Il est évident que ces états ne sont pas visités de façon équiprobable dans nos simulations en Monte Carlo quantique.

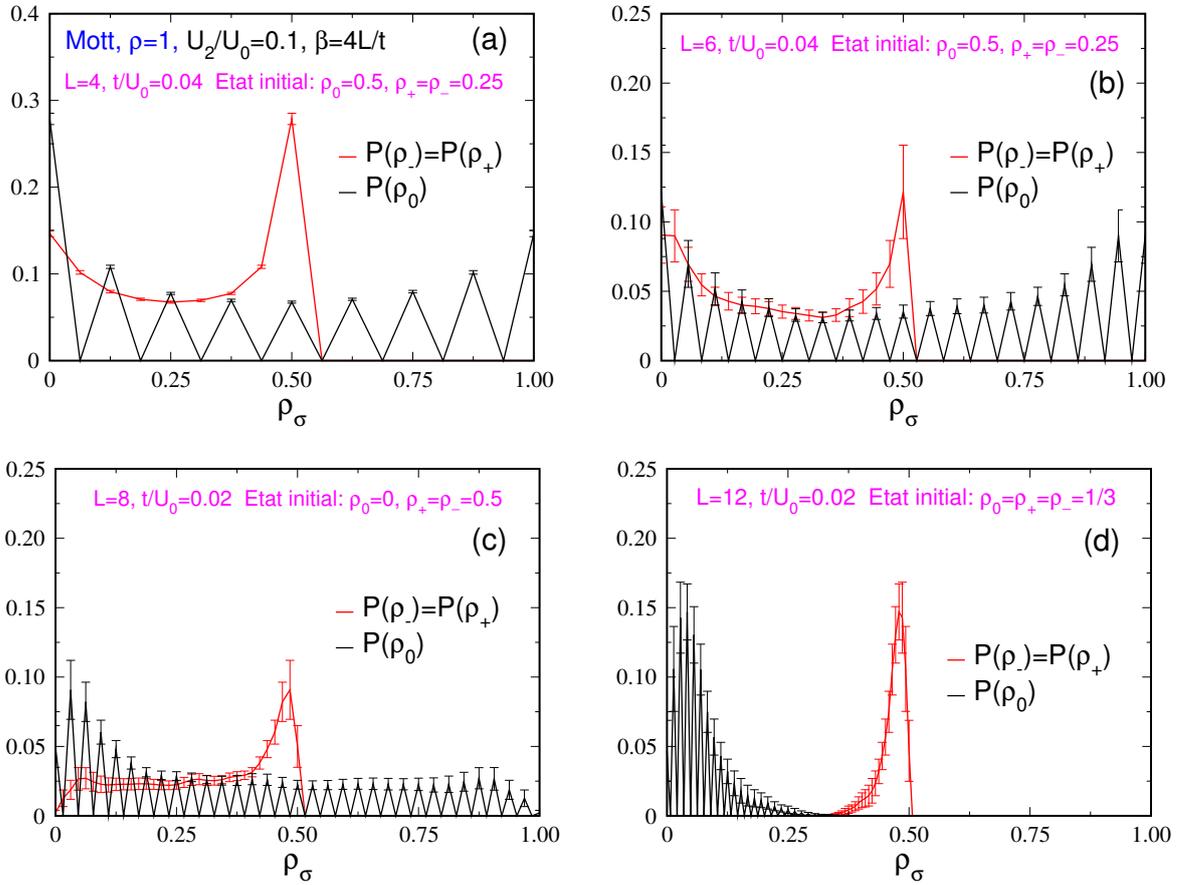


FIGURE 8.15 – Histogrammes $P(\rho_-) = P(\rho_+)$ et $P(\rho_0)$ pour quatre tailles $L = \{4, 6, 8, 12\}$, respectivement en (a), (b), (c) et (d) dans la phase de Mott $\rho = 1$ avec $U_2/U_0 = 0.1$ et $\beta = 4L/t$. Pour de grandes tailles, les histogrammes sont polarisés: $\max(P(\rho_{\pm}))$ en $\rho_{\pm} \simeq 0.5$ et $\max(P(\rho_0))$ en $\rho_0 \simeq 0$.

Bien que le mécanisme assurant cette polarisation ne soit pas clair, il est nécessairement lié au terme de conversion U_2 , ainsi qu'au terme cinétique t qui lève la dégénérescence de cette phase trouvée lorsque $t/U_0 = 0$. Les excitations de paires de bosons ± 1 , de coût énergétique *minimal* $U_0 - U_2$, sont favorisées. La cohérence des résultats des deux ensembles montre que la

contrainte $F_z^{total} = 0$ dans l'ensemble canonique ne semble pas avoir d'impact particulier sur cette polarisation. De plus, la référence [126] prédit aussi cette polarisation et montre qu'à l'équilibre thermodynamique $\rho_+ = \rho_- = 0.5$ et $\rho_0 = 0$ (Fig. 3 (b) de la Réf. [126]).

Les corrélations spin-spin sur site valent $F_{xx}(0) = F_{yy}(0) \simeq 0.5$ et $F_{zz}(0) \simeq 1$, d'où le moment magnétique local tel que $F^2(0) = \rho(\rho + 1) \simeq 2$. Ceci implique que $Q_{xx} = Q_{yy} \simeq -1/6$ et $Q_{zz} \simeq 1/3$. Ces résultats, correspondant à la moyenne des quantités des états $|100\rangle$ et $|001\rangle$ (cf. Tableau 8.1), sont aussi trouvés par Y. Toga *et al.* [126]. De plus, nous pouvons remarquer, qu'à l'inverse du cas $U_2/U_0 < 0$, la composante Q_{zz} est positive.

Concernant les fonctions de corrélations:

- les fonctions de Green individuelles $G_\sigma(\mathbf{R})$ décroissent exponentiellement (cf. Figure 8.16);
- la fonction de Green $G_a(+-, \mathbf{R})$ sature vers la valeur $G_a(+-, \mathbf{L}/2) \simeq 0.20$, indiquant que des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules de spin $+ -$ existent. Ce type de mouvement lève la dégénérescence de cette phase. Bien que les particules de spin 0 soient très minoritaires, nous pouvons noter que des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules de spin $+0$ et -0 existent car $G_a(+0, \mathbf{R}) = G_a(-0, \mathbf{R})$ saturent. De même, des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules de spin différent avec conversions du spin existent: $G_a(+ - 00, \mathbf{L}/2) = G_a(00 - +, \mathbf{L}/2) \simeq 0.02$ (cf. Figure 8.16);
- il existe des corrélations spin-spin à longue portée dans le plan xy , telles que $F_{xx}(\mathbf{L}/2) = F_{yy}(\mathbf{L}/2) \simeq cste < 0.50$ (cf. Figure 8.17 en haut à gauche).

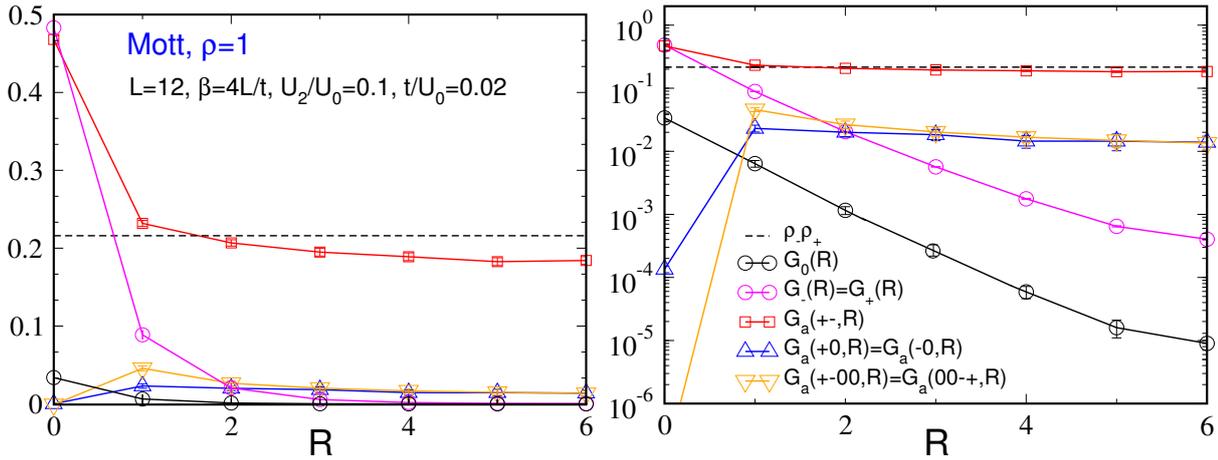


FIGURE 8.16 – Fonctions de Green en échelle linéaire (à gauche) et semi-log (à droite) pour la phase de Mott $\rho = 1$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. Il n'existe pas de mouvements cohérents individuels. *Contrairement*, des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules de spin $+ -$ existent: $G_a(+-, \mathbf{L}/2) \simeq 0.20$.

Le hamiltonien effectif de Heisenberg \mathcal{H}_{eff} [Eq. (8.10)], précédemment discuté pour le cas $U_2/U_0 < 0$, apporte quelques précisions. Lorsque $U_2/U_0 \in]0, 0.5[$, les couplages des spins sont tels que $J_1/J_2 = 1 - 2U_2/U_0$, soit $0 < J_1 < J_2$. À température nulle, l'énergie libre sera minimisée lorsque le terme $\sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{F}_i \cdot \mathbf{F}_j)^2$ du hamiltonien sera maximisé, *i.e.* lorsque les spins s'orientent suivant un axe privilégiée sans qu'un sens préférentiel soit imposé. Selon les références [127, 128], le système adopte dans ce cas l'ordre nématique (*cf.* Figures 8.9 et 8.4). Le paramètre d'ordre Q_{zz} non nul est une signature nécessaire mais non suffisante pour conclure que le système adopte la phase nématique. En effet, dans la phase nématique, le facteur de structure magnétique $S_{xx}(\mathbf{q})$ prend une valeur nulle, $\forall \mathbf{q}$, dans la limite thermodynamique.

Le facteur de structure magnétique $S_{xx}(\mathbf{q})$ est tracé en fonction de q_x et q_y sur la Figure 8.17 à droite. La coupe de $S_{xx}(\mathbf{q})$ en $q_y = 0$ est représentée sur la Figure 8.17 en bas à gauche. Le pic de $S_{xx}(\mathbf{q})$ en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ observé pour différentes tailles semble indiquer qu'un ordre ferromagnétique existe. Dans ce cas, nous pouvons conclure que $Q_{zz} \simeq 1/3$ n'est pas la signature d'un ordre nématique, le système étant ferromagnétique. Ces résultats préliminaires contredisent les prédictions des références [4, 5, 126].

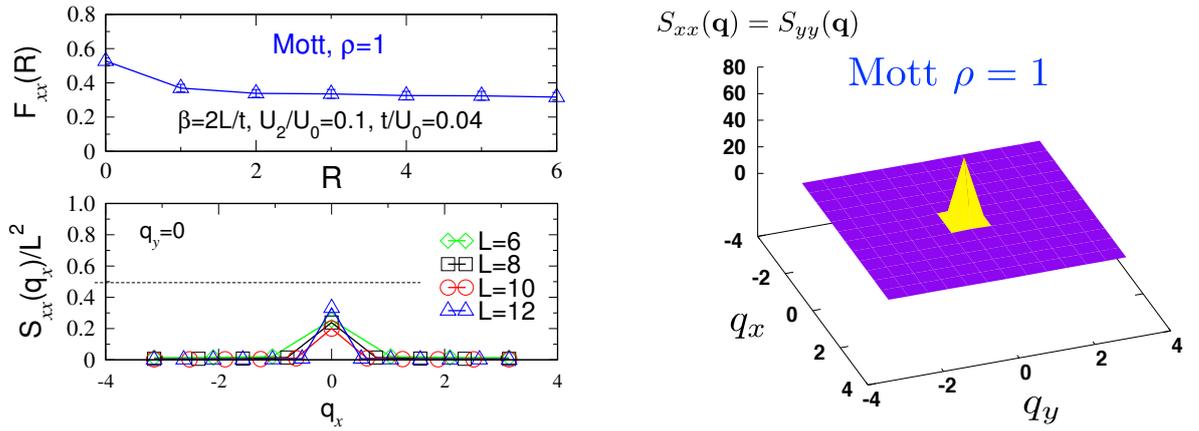


FIGURE 8.17 – Pour la phase de Mott $\rho = 1$ avec $\beta = 2L/t$, $U_2/U_0 = 0.1$ et $t/U_0 = 0.04$. À droite: facteur de structure magnétique [Eq. (8.8)] en fonction de $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$ pour $L = 12$. À gauche en haut: il existe des corrélations spin-spin à longue portée telles que $F_{xx}(L/2) = F_{yy}(L/2) \simeq 0.3$ pour $L = 12$. À gauche en bas: coupe du graphe de droite en $q_y = 0$ pour quatre systèmes de taille $L \times L$ avec $L = \{6, 8, 10, 12\}$ normalisé par L^2 . Le pic en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, plus faible que celui observé pour $U_2 < 0$ (*cf.* Figure 8.8), existe pour ces quatre tailles: un ordre ferromagnétique existe.

Nous effectuons actuellement une analyse du facteur de structure magnétique dans l'ensemble grand canonique avec le même rapport $U_2/U_0 = 0.1$ afin de confirmer ce résultat. D'autre part, nous effectuons des simulations avec $U_2/U_0 = \{0.2, 0.3, 0.4\}$ afin d'avoir un rapport $J_1/J_2 = 1 - 2U_2/U_0$ plus petit, soit $J_1 \ll J_2$. Ces rapports devraient améliorer la convergence de l'algorithme et devraient donc nous permettre d'observer la signature de la phase nématique prédite par A. Imambekov [4, 5]. Cependant, lorsque U_2/U_0 augmente, le lobe de Mott $\rho = 1$ rétrécit progressivement pour totalement disparaître lorsque $U_2/U_0 = 0.5$. Pour $U_2/U_0 = \{0.2, 0.3, 0.4\}$, nous effectuons donc des simulations avec de grandes valeurs de U_0 pour lesquelles la limite de température nulle $k_B T \ll t^2/U_0$ devient difficile à assurer avec notre algorithme.

Phase de Mott $\rho = 2$

Lorsque $t/U_0 = 0$, cette phase non dégénérée est décrite par l'état sur site $|\Phi\rangle = \sqrt{2/3}|101\rangle - \sqrt{1/3}|020\rangle$, dans la base $|n_-, n_0, n_+\rangle$. Cet état a pour propriétés $F_{xx}(0) = F_{yy}(0) = F_{zz}(0) = 0$, soit $F^2(0) = 0$: cet état est un état singulet. Ceci implique que $Q_{xx} = Q_{yy} = Q_{zz} = 0$. Par ailleurs, $\rho_- = \rho_0 = \rho_+ = 2/3$ et les corrélations densité-densité sur site valent $C_{00}(0) = 4/3$, $C_{++}(0) = C_{--}(0) = C_{+-}(0) = 2/3$ et $C_{+0}(0) = C_{-0}(0) = 0$.

Nos simulations en Monte Carlo quantique, avec le rapport $U_2/U_0 = 0.1$, confirment ces résultats dans toute la phase de Mott. Les histogrammes $P(\rho_{\pm})$ et $P(\rho_0)$, de forme gaussienne, sont centrés en $\rho_{\sigma} = 2/3$ (cf. Figure 8.18 à gauche). D'autre part, il est possible de mesurer la densité des paires de singulets ρ_{sg} définie par

$$\rho_{sg} = \langle \hat{A}_{sg}^{\dagger} \hat{A}_{sg} \rangle, \quad (8.12)$$

avec $\hat{A}_{sg}^{\dagger} = (\sqrt{2}\hat{a}_{\uparrow}^{\dagger}\hat{a}_{\downarrow}^{\dagger} - \hat{a}_0^{\dagger}\hat{a}_0^{\dagger})/\sqrt{3}$. Nous mesurons dans cette phase $\rho_{sg} \simeq 1$ (cf. Figure 8.26). Chaque site du système est donc composé d'une paire de particules formant un état singulet.

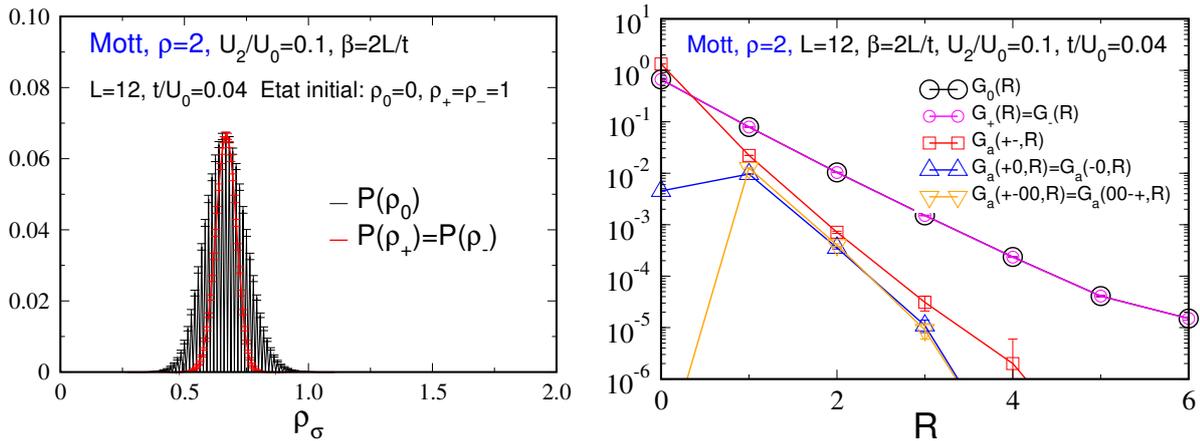


FIGURE 8.18 – Phase de Mott $\rho = 2$ avec $U_2/U_0 = 0.1$. À gauche: les histogrammes $P(\rho_-) = P(\rho_+)$ et $P(\rho_0)$ sont tous de forme gaussienne et sont centrés en $\rho_{\sigma} = 2/3$. À droite: fonctions de Green en échelle semi-log. Toutes les fonctions de Green décroissent exponentiellement.

Concernant les fonctions de corrélations, aucun mouvement cohérent n'existe (Figure 8.18 à droite). L'absence de mouvement cohérent s'explique par l'unicité de l'état $|\Phi\rangle_{tot}$ décrivant cette phase lorsque $t/U_0 = 0$: il n'y a aucune dégénérescence à lever par le biais du terme cinétique. Dans la limite $t/U_0 = 0$, la fonction d'onde décrivant le système dans cette phase est :

$$|\Phi\rangle_{tot} = \otimes_{i=1}^{L^2} |\Phi\rangle_i = \otimes_{i=1}^{L^2} \left[\sqrt{2/3}|101\rangle - \sqrt{1/3}|020\rangle \right]_i.$$

Concernant l'aspect magnétique de cette phase, les simulations montrent qu'il n'existe aucun ordre magnétique dans le système (cf. discussions sur les transitions de phases Figures 8.25 et 8.26). Les propriétés de cette phase sont donc essentiellement locales et sont données par des quantités sur site. Cette phase est donc la phase la mieux décrite par le champ moyen.

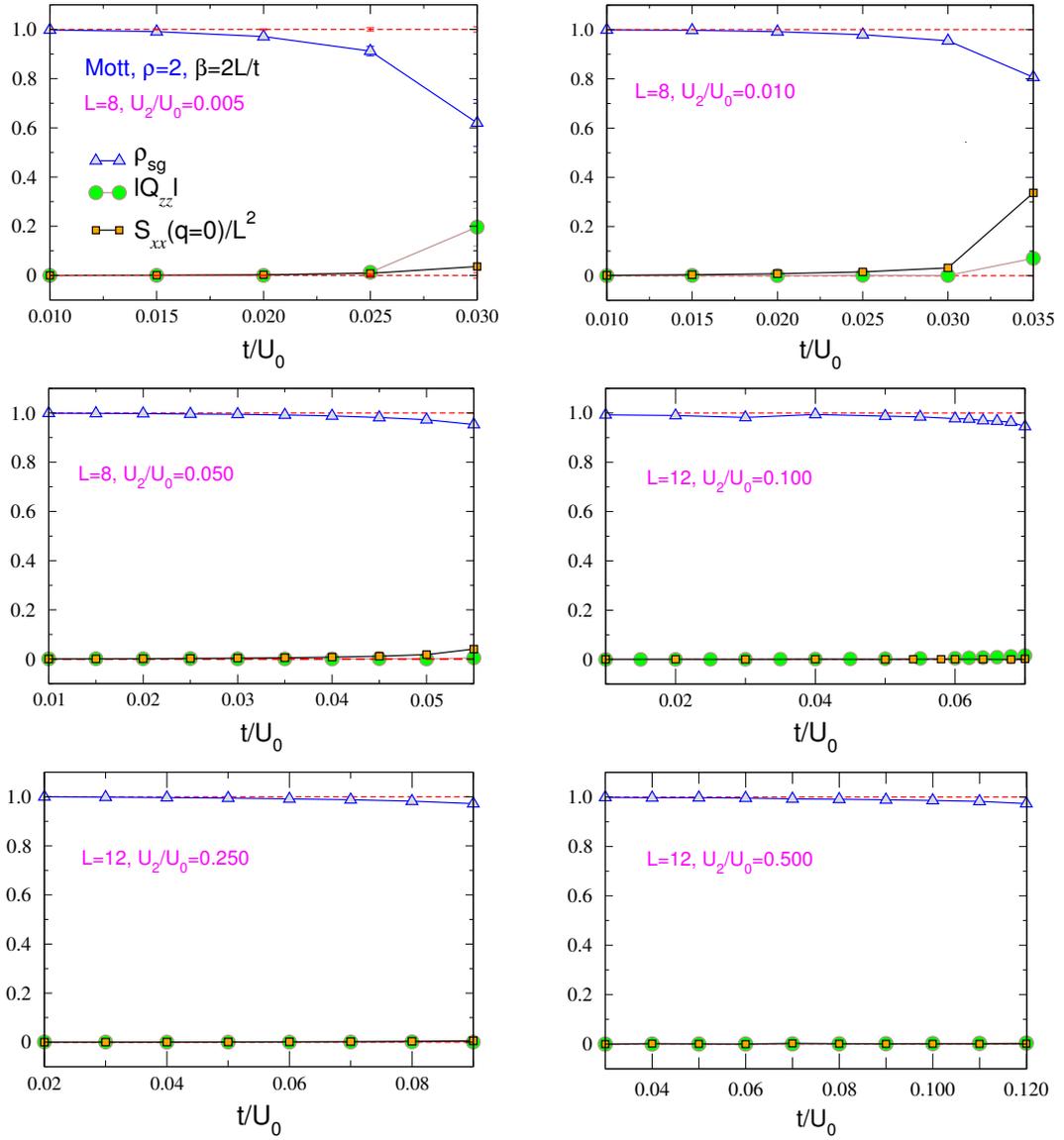


FIGURE 8.19 – Densité des paires singlets ρ_{sg} , valeur absolue du paramètre d'ordre nématique $|Q_{zz}|$ et valeur du facteur de structure normalisé $S_{xx}(q=0)/L^2$ dans la phase de Mott $\rho = 2$ avec $\beta = 2L/t$ pour les rapports $U_2/U_0 = \{0.005, 0.010, 0.050, 0.100, 0.250, 0.500\}$. La longueur du lobe MI $\rho = 2$ croît en fonction de U_2/U_0 et la dernière valeur de t/U_0 de ces graphes correspond à la valeur de la transition Mott-superfluide. Dans tous ces graphes, loin de la transition, nous mesurons $|Q_{zz}| \simeq 0$, $S_{xx}(q=0)/L^2 \simeq 0$ et $\rho_{sg} \simeq 1$. L'ordre nématique n'est pas observé et cette phase est composée d'états singlets.

Dans les références [4, 5], il est théoriquement prédit qu'il existe une transition de phase magnétique du premier ordre dans la phase de Mott $\rho = 2$. Cette transition concerne la phase singlet et la phase nématique. Plus précisément, il est prédit que cette phase est entièrement formée d'états singlets lorsque $U_2/U_0 > 0.025$, ce que nous confirmons. Cependant, il est aussi prédit qu'un ordre nématique se développe dans la partie droite du lobe et que la transition singlet-nématique est du premier ordre lorsque $U_2/U_0 < 0.025$.

Nous avons donc effectué une analyse précise pour les tailles $L = \{4, 6, 8, 10, 12\}$ avec les rapports $U_2/U_0 = \{0.005, 0.010, 0.050, 0.100, 0.150, 0.250, 0.500\}$. Nous montrons certains de ces résultats sur la Figure 8.19. Dans toutes nos simulations, nous mesurons $F_{xx}(0) \simeq F_{yy}(0) \simeq F_{zz}(0)$, soit $Q_{zz} \simeq 0$ avec simultanément $S_{xx}(q=0)/L^2 \simeq 0$ et $\rho_{sg} \simeq 1$. Nous n'observons donc pas d'ordre nématique, ni de transition magnétique dans cette phase. Il est possible que le modèle développé dans les références [4, 5], seulement valide dans la limite $t/U_0 \rightarrow 0$ mais extrapolé dans toute la phase de Mott, ne soit simplement plus valide hors de cette limite.

Phase superfluide $\rho = 1$ et $\rho = 2$

Comme dans la phase de Mott $\rho = 1$, les histogrammes des populations sont polarisés: l'histogramme $P(\rho_0)$ [$P(\rho_{\pm})$] se concentre en un pic situé proche de $\rho_0 \simeq 0$ [$\rho_{\pm} \simeq \rho/2$] au fur et à mesure que la taille augmente (*cf.* Figure 8.20). Cette polarisation est observée pour différents états initiaux. Pour de grandes tailles, le système à l'équilibre est donc essentiellement composé de bosons de spins ± 1 et les particules de spin 0 sont minoritaires.

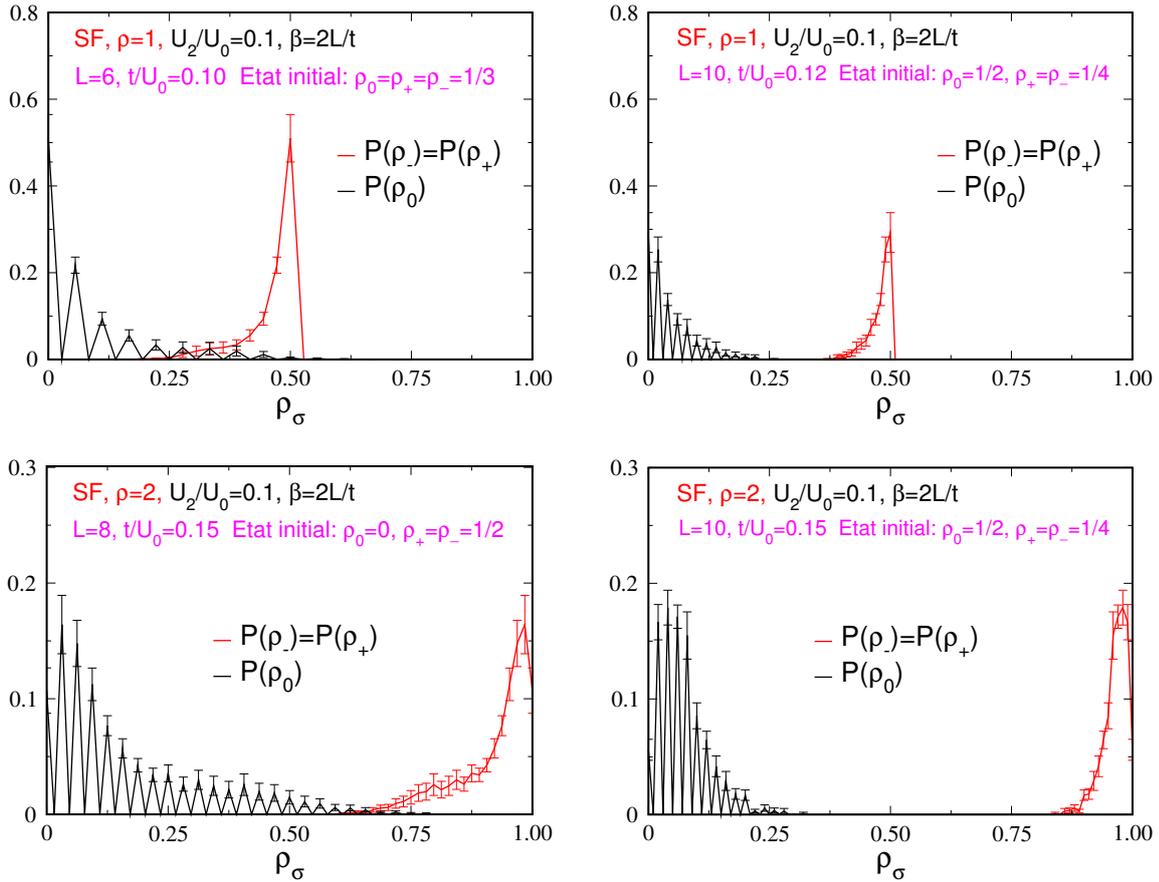


FIGURE 8.20 – Histogrammes $P(\rho_{\pm})$ et $P(\rho_0)$ pour trois tailles $L = \{6, 8, 10\}$ dans la phase superfluide $\rho = 1$ ($\rho = 2$) en haut (bas) avec $U_2/U_0 = 0.1$ et $\beta = 2L/t$. Les histogrammes sont polarisés.

Nous avons montré que, selon le champ moyen (*cf.* Section 7.4), chaque site du système est soit composé de particules de spin 0, soit composé d'un mélange équilibré de particules de spin ± 1 . Or, seule l'équirépartition des particules de spin ± 1 est observée avec la méthode de Monte Carlo quantique. Le système n'est jamais principalement composé de bosons de spin 0 comme le suggère le champ moyen. L'origine de ce choix particulier de polarisation n'est pas claire. En effet, pour un système de "grande taille" (*e.g.* $L = 10$), les bosons de spin 0 sont très peu présents et l'ensemble du système est composé d'autant de bosons de spin $+1$ que de bosons de spin -1 (*cf.* Figure 8.20).

Les corrélations densité-densité sur site sont telles que $C_{--}(0) = C_{++}(0) > 0$, $C_{00}(0) = C_{+0}(0) = C_{-0}(0) \simeq 0$ et $C_{+-}(0) > 0$. Pour $\rho = 2$, $C_{+-}(0) > C_{--}(0) = C_{++}(0)$ signifie que les paires de particules de spins $+-$ sont favorisées. De plus, les corrélations spin-spin sur site satisfont la relation $F_{xx}(0) = F_{yy}(0) < F_{zz}(0)$ pour les deux densités. Le moment magnétique local est favorisé suivant l'axe z .

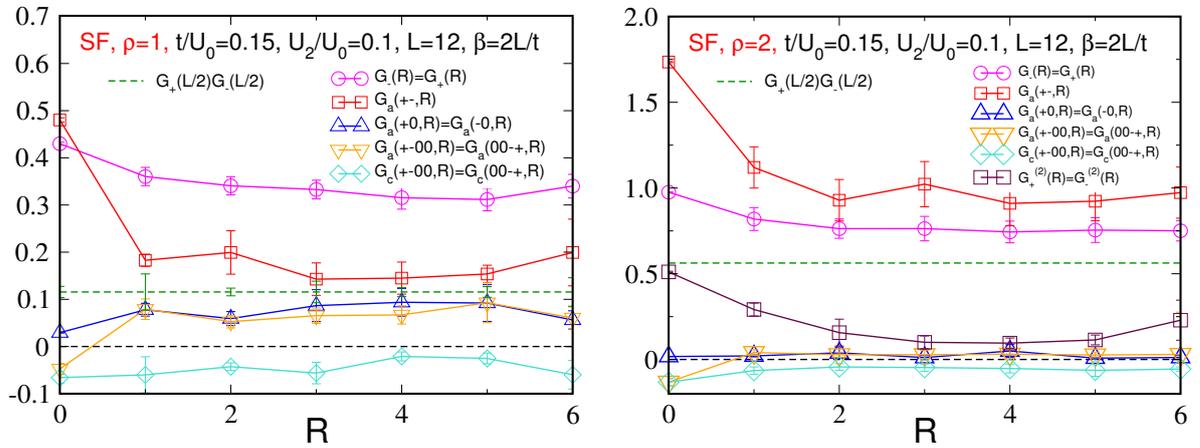


FIGURE 8.21 – Fonctions de Green en échelle linéaire pour la phase superfluide de densité $\rho = 1$ à gauche et $\rho = 2$ à droite avec $t/U_0 = 0.15$ et $U_2/U_0 = 0.1$.

La Figure 8.21 montre que:

- les fonctions de Green individuelles saturent: des mouvements cohérents de particules individuelles existent. Le plateau des fonctions de Green individuelles, indiquant un ordre de phase à longue portée et le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg [67, 68, 69] nous permettent de conclure qu'un condensat de Bose-Einstein existe;
- la fonction $G_a(+-, \mathbf{R})$ sature vers une valeur asymptotique telle que $G_a(+-, \mathbf{L}/2) > G_+(\mathbf{L}/2)G_-(\mathbf{L}/2)$. Il existe donc des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules de spin $+-$ dans la phase superfluide. Bien que les particules de spin 0 soient très minoritaires, nous pouvons observer sur la Figure 8.21 que les fonctions de Green $G_a(\pm 0, \mathbf{R})$ et $G_a(+ - 00, \mathbf{R})$ saturent vers la même valeur. Cependant, cette valeur asymptotique est faible à cause de la polarisation. Les mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules de spin $+0$ et -0 sont faibles;
- pour $\rho = 2$, les fonctions de Green à deux corps de même espèce $G_{\pm}^{(2)}(\mathbf{R})$ sont non nulles.

D'autre part, il existe des corrélations spin-spin à longue portée dans le plan xy telles que $F_{xx}(\mathbf{L}/2) = F_{yy}(\mathbf{L}/2) \simeq cste < 0.5$ pour $\rho = 1$ et $F_{xx}(\mathbf{L}/2) = F_{yy}(\mathbf{L}/2) \simeq cste < 2$ pour $\rho = 2$. Ces corrélations impliquent que le facteur de structure magnétique présente un pic en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. Ce pic persiste lorsque la taille augmente: un ordre ferromagnétique existe.

De plus, il est possible que des mouvements cohérents de paires de particules singulets existent dans cette phase. La précision actuelle de nos mesures ne nous permet pas, pour le moment, d'observer clairement la signature de tels mouvements.

Transitions de phases

A. Transitions Mott-superfluide $\rho = 1$ et $\rho = 2$

Nous discutons maintenant l'évolution de la densité superfluide lors de la transition Mott-superfluide. La Figure 8.22 montre l'évolution de ρ_s en fonction de t/U_0 pour les densités constantes $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec $U_2/U_0 = 0.1$. Fixer la densité correspond à effectuer une coupe horizontale des lobes MI du diagramme de phase en passant par leur extrémité.

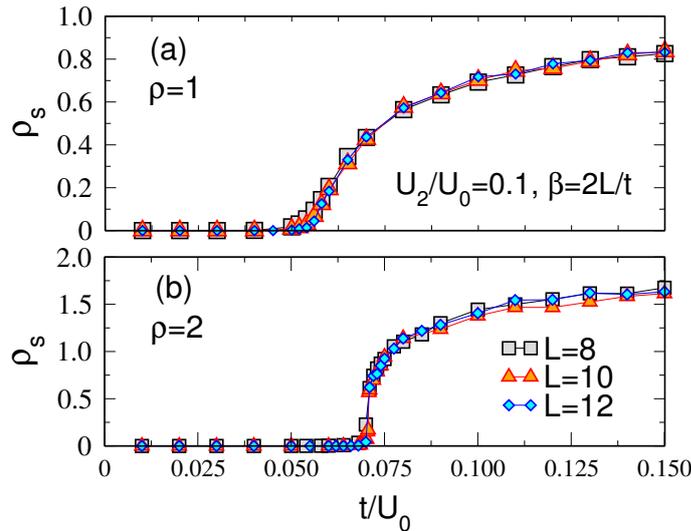


FIGURE 8.22 – Densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 lors de la transition MI-superfluide pour les densités constantes $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec $U_2/U_0 = 0.1$ pour trois tailles. Pour $\rho = 1$, la transition, de la classe d'universalité du modèle XY classique 3D, est du second ordre. Pour $\rho = 2$, la transition est du premier ordre, en accord avec le champ moyen.

Il n'y a aucun signe visible de discontinuité lorsque la taille augmente pour $\rho = 1$, signe que cette transition est du second ordre. Des arguments de loi d'échelle précisent que cette transition est de la classe d'universalité du modèle XY classique 3D [66]. *A contrario*, une discontinuité est nettement visible dans l'évolution de ρ_s pour la densité $\rho = 2$. Comme nous l'avons vu pour le système de bosons de spin-1/2 à la sous-section 6.1.2 (Figures 6.11 et 6.12), la discontinuité du paramètre d'ordre de la phase superfluide indique que la transition est du premier ordre. Ce résultat est en accord avec le champ moyen selon lequel il existe une zone métastable à l'extrémité des lobes des phases de Mott de densité paire pour $U_2/U_0 \in]0, 0.20]$ (cf. Figure 7.13).

Afin de confirmer ce résultat, nous effectuons une coupe verticale du diagramme de phase passant par l'extrémité du lobe MI $\rho = 2$. Nous traçons sur la Figure 8.23 la densité totale ρ en fonction de μ/U_0 dans l'ensemble canonique (en rouge) et dans l'ensemble grand canonique (en bleu). En effet, un autre indicateur d'une transition du premier ordre est l'observation d'une compressibilité négative $\kappa = \partial\rho/\partial\mu$ dans l'ensemble canonique et d'une discontinuité de ρ en fonction de μ/U_0 dans l'ensemble grand canonique [122].

La signature d'une transition du premier ordre est très claire pour les deux ensembles. Nous avons choisi le rapport $U_2/U_0 = 0.05$ car la zone métastable est plus étendue qu'avec $U_2/U_0 = 0.10$. Ce rapport permet donc une représentation graphique plus explicite de cette signature bien que celle-ci soit aussi observée pour le rapport $U_2/U_0 = 0.1$ dans ces deux ensembles. Cette signature s'accompagne d'un saut de la densité superfluïde. Ce type de transition a été précédemment discuté en détail lors de l'étude du système de bosons de spin-1/2 (cf. sous-section 6.1.2).

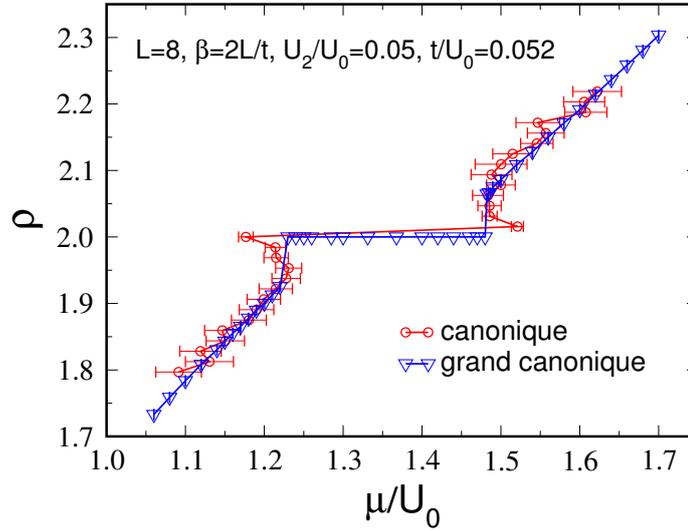


FIGURE 8.23 – Densité totale ρ en fonction de μ/U_0 dans l'ensemble canonique (en rouge) et dans l'ensemble grand canonique (en bleu) pour $L = 8$ avec $U_2/U_0 = 0.05$. Ces courbes correspondent à des coupes verticales du lobe MI $\rho = 2$ passant par son extrémité. La pente négative (compressibilité négative) de ρ observée dans l'ensemble canonique est le signe qu'une métastabilité existe. De même pour la discontinuité de ρ observée dans l'ensemble grand canonique. Pour ces deux courbes, la densité superfluïde (non tracée ici) présente une discontinuité et la transition est du premier ordre, en accord avec les prédictions du champ moyen.

B. Influence de U_2/U_0 sur la transition Mott-superfluïde $\rho = 2$

Nous venons de voir que le champ moyen et la méthode de Monte Carlo quantique sont en accord concernant l'ordre des transitions. Ces méthodes prédisent une transition Mott-superfluïde du premier ordre pour $\rho = 2$ avec $U_2/U_0 = 0.05$ et $U_2/U_0 = 0.1$. Qu'en est-il des autres valeurs de U_2/U_0 ? Le champ moyen prédit que cette transition est du premier ordre lorsque $U_2/U_0 \in]0, 0.2]$ et est du second ordre sinon (cf. Figure 7.13).

La Figure 8.24 montre la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 avec $\rho = 2$ pour différents rapports U_2/U_0 avec la méthode de Monte Carlo quantique (à gauche) et avec la méthode du champ moyen (à droite). La figure de droite correspond à la Figure 7.13.

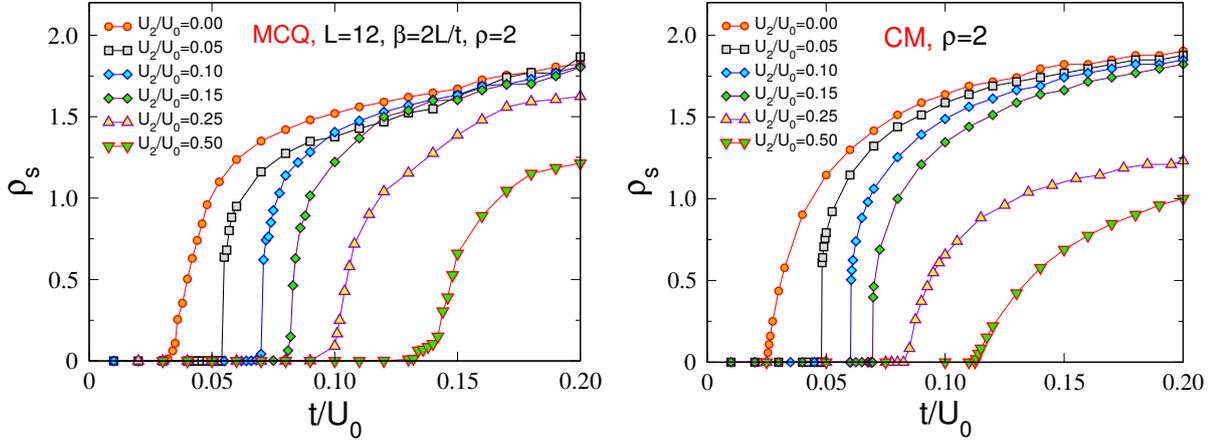


FIGURE 8.24 – Densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 avec une densité constante $\rho = 2$ pour $U_2/U_0 = \{0.00, 0.05, 0.10, 0.15, 0.25, 0.50\}$ avec la méthode de Monte Carlo quantique (à gauche) et avec la méthode du champ moyen (à droite).

Les deux méthodes sont en bon accord qualitatif et quantitatif, sauf pour $U_2/U_0 = 0.15$. En effet, le champ moyen prédit une transition du premier ordre pour $U_2/U_0 \in]0, 0.20]$, alors que selon la méthode de Monte Carlo quantique, seuls les rapports $U_2/U_0 = \{0.05, 0.10\}$ présentent une discontinuité dans l'évolution de ρ_s sur cette figure. Nous pouvons donc conclure que la transition est du premier ordre pour $U_2/U_0 \in]0, 0.15[$. De plus, le saut de ρ_s , nul pour $U_2/U_0 = 0$, croît avec U_2/U_0 et atteint sa valeur *maximale* en $U_2/U_0 \simeq 0.05$, puis décroît et devient nul lorsque $U_2/U_0 \simeq 0.15$. L'influence du rapport U_2/U_0 concernant l'ordre de cette transition a été étudiée par T. Kimura *et al.* par une approche variationnelle [15]. Cette étude prédit que cette transition est du premier ordre lorsque $U_2/U_0 \in]0, 0.32]$. Leur gamme de valeurs de U_2/U_0 est donc environ deux fois plus large que la nôtre.

Enfin, la densité superfluide ρ_s et la fraction condensée $\rho(\mathbf{q} = \mathbf{0})$, non tracée, évoluent de façon similaire. Cependant, nous observons quantitativement que $\rho(\mathbf{q} = \mathbf{0})$ est légèrement inférieure à ρ_s . Ceci est en accord avec le fait que certaines particules d'impulsion non nulle contribuent à la superfluidité. (*cf.* Figure 6.14)

C. Corrélations spin-spin lors des transitions Mott-superfluide $\rho = 1$ et $\rho = 2$

L'étude détaillée des phases de Mott et de la phase superfluide avec $U_2/U_0 = 0.1$ a montré qu'il existe des corrélations spin-spin dans tout le diagramme de phase excepté dans la phase de Mott $\rho = 2$ composée d'états singulets. Nous traçons sur la Figure 8.25 les corrélations spin-spin $F_{xx}(R) = F_{yy}(R)$ pour différentes valeurs de t/U_0 pour $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) avec $U_2/U_0 = 0.1$.

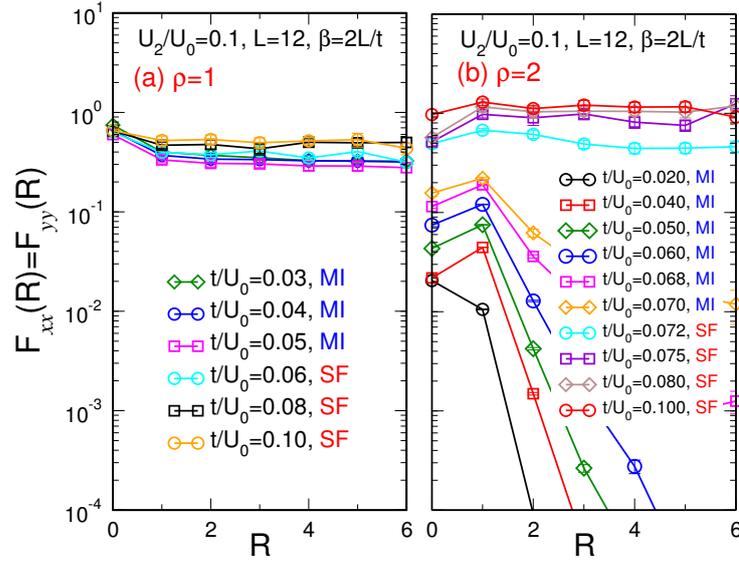


FIGURE 8.25 – Corrélations spin-spin $F_{xx}(R) = F_{yy}(R)$ dans l'ensemble canonique pour différentes valeurs de t/U_0 faisant passer le système de la phase de Mott vers la phase superfluide avec $\rho = 1$ (a) et $\rho = 2$ (b) pour $U_2/U_0 = 0.1$.

- Figure 8.25 (a): $F_{xx}(R)$ tend vers un plateau $\forall t/U_0$, soit dans la phase de Mott et dans la phase superfluide, la transition ayant lieu à $t_c/U_0 \simeq 0.050$. Un ordre magnétique à longue portée existe tout le long de la transition.
- Figure 8.25 (b): la transition MI-superfluide a lieu à $t_c/U_0 \simeq 0.070$. Dans toute la phase superfluide, les corrélations spin-spin tendent vers un plateau, signe qu'un ordre magnétique à longue portée existe. *A contrario*, dans toute la phase de Mott ($t/U_0 < 0.070$), les corrélations spin-spin décroissent exponentiellement, signe qu'aucun ordre magnétique n'existe dans cette phase.

Intéressons-nous maintenant plus particulièrement à la transition MI-superfluide pour la densité $\rho = 2$. Nous traçons sur la Figure 8.26, en haut à gauche, le moment magnétique local $F^2(0)$, la densité de paires de particules singulets ρ_{sg} [Eq. (8.12)], ainsi que la densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 . Cette figure montre que:

- profondément dans la phase de Mott, la densité superfluide ρ_s est strictement nulle et la densité des paires de particules singulets vaut $\rho_{sg} = (1.00 \pm 0.02)$ indiquant que les deux particules situées sur chaque site forment un état singulet, d'où $F^2(0) \simeq 0$. Près de la transition, la densité des paires singulets décroît légèrement à cause des mouvements dus à l'effet tunnel laissant ainsi la possibilité à certaines particules de contribuer à un moment magnétique local non nul. Ceci explique que $F^2(0)$ n'est plus strictement nul près de la transition ;
- à la transition ($t_c/U_0 \simeq 0.070$), les trois quantités présentent une discontinuité ;
- dans la phase superfluide ($t/U_0 > 0.070$), des paires de particules singulets sont toujours

présentes, mais $\rho_{sg} < 1$ et le moment magnétique local est non nul. Il nous est difficile d'analyser proprement la cohérence des paires de particules singulets, mais il est envisageable que celles-ci contribuent à la superfluidité.

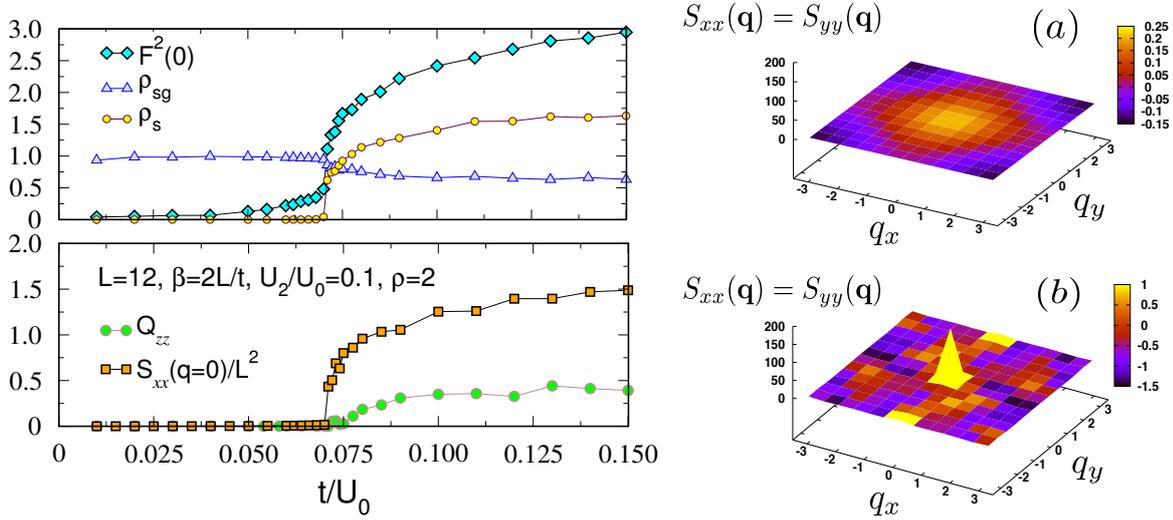


FIGURE 8.26 – Transition Mott-superfluide $\rho = 2$ avec $L = 12$, $\beta = 2L/t$ et $U_2/U_0 = 0.1$. À gauche, en haut: moment magnétique local $F^2(0)$, densité des paires de particules singulets ρ_{sg} et densité superfluide ρ_s en fonction de t/U_0 . À gauche, en bas: paramètre d'ordre nématique Q_{zz} et valeur du pic du facteur de structure magnétique normalisé $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$. À droite: facteur de structure magnétique $S_{xx}(\mathbf{q})$ dans la phase de Mott en (a) avec $t/U_0 = 0.06$ et dans la phase superfluide en (b) juste après la transition avec $t/U_0 = 0.08$.

La Figure 8.26 en bas à gauche montre le paramètre d'ordre nématique Q_{zz} , ainsi que le pic du facteur de structure magnétique normalisé $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$ en fonction de t/U_0 . De plus, la Figure 8.26 à droite montre le facteur de structure magnétique $S_{xx}(\mathbf{q})$ dans la phase de Mott en (a) et dans la phase superfluide en (b) juste après la transition avec $U_2/U_0 = 0.1$. Sur cette figure:

- le paramètre d'ordre nématique Q_{zz} , nul dans toute la phase de Mott, montre que l'ordre magnétique sur site est isotrope $F_{xx}(0) = F_{yy}(0) = F_{zz}(0)$ lorsque $F^2(0) \neq 0$ près de la transition: il n'existe donc pas d'ordre nématique. Le facteur de structure magnétique $S_{xx}(\mathbf{q})$ admet un maximum en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ dont la valeur est proche de zéro dans cette phase. Ces valeurs sont à comparer avec celles du cas $U_2/U_0 < 0$ de la Figure 8.12 en bas, pour lequel $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2 \simeq 2$;
- les deux quantités présentent une discontinuité à la transition ($t_c/U_0 \simeq 0.070$);
- le paramètre d'ordre nématique tend vers $Q_{zz} \simeq 0.44$ pour $t/U_0 = 0.15$ dans la phase superfluide: l'ordre de spin sur site n'est pas isotrope et $F_{zz}(0) > F_{xx}(0) = F_{yy}(0)$. Le facteur de structure magnétique présente un pic significatif en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ qui indique qu'un ordre ferromagnétique existe.

D. Coupe verticale du diagramme de phase en $t/U_0 = 0.04$

La Figure 8.27 à gauche montre l'évolution de la densité totale ρ et de la densité superfluide ρ_s en fonction de μ/U_0 associées à la coupe verticale du diagramme de phase (cf. Figure 8.14) en trait discontinu. Lors de cette coupe, qui traverse les phases de Mott $\rho = \{1, 2\}$, les densités ρ et ρ_s évoluent continûment, signe de transitions du second ordre. Il est intéressant de remarquer que la pente de la densité ρ augmente et devient presque verticale lorsque le système passe de la phase superfluide à la phase de Mott $\rho = 2$. La compressibilité $\kappa = \partial\rho/\partial\mu$ tend donc à diverger lors de cette transition. Ceci semble être l'indicateur qu'une transition du premier ordre, située au bout du lobe, est proche. Ce fait n'est pas observé pour cette transition pour le cas $U_2/U_0 = -0.1$ (cf. Figure 8.13).

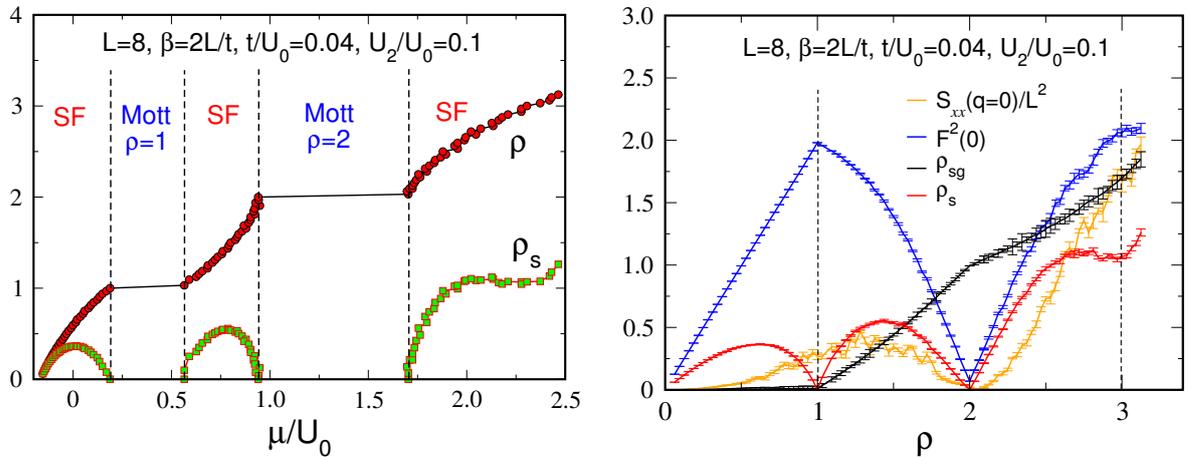


FIGURE 8.27 – À gauche: densité totale ρ et densité superfluide ρ_s en fonction de μ/U_0 lors de la coupe verticale du diagramme de phase en trait discontinu (cf. Figure 8.14) avec $U_2/U_0 = 0.1$. Cette coupe traverse les phases de Mott $\rho = 1$ et $\rho = 2$ indiquées par les plateaux de la densité. Les densités ρ et ρ_s évoluent continûment, signe de transitions du second ordre. À droite: évolution du pic du facteur de structure magnétique normalisé $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$, du moment magnétique local $F^2(0)$, de la densité des paires singulets ρ_{sg} et de la densité superfluide ρ_s en fonction de ρ associée à la coupe de gauche.

D'autre part, nous traçons sur la Figure 8.27 à droite l'évolution des quantités $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$, $F^2(0)$, ρ_{sg} et ρ_s en fonction de la densité ρ associée au graphe de gauche.

- Pour $\rho \in [0, 1]$, le moment magnétique local $F^2(0)$ croît linéairement: $F^2(0) = 2\rho$. Chaque nouvelle particule injectée dans le système ajoute la quantité $F^2(0) = 2$ au moment magnétique local total. La valeur du pic du facteur de structure magnétique $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$ croît sur cet intervalle: chaque nouvelle particule contribue à un ordre ferromagnétique. Ce comportement qualitatif est similaire à celui observé avec $U_2/U_0 = -0.1$ sur la Figure 8.13, bien que, quantitativement, la valeur de $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$ soit plus faible ($S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2 < 0.5$ en $\rho = 1$, par exemple). Cette similarité est due au fait que le terme U_2 joue un rôle mineur pour une densité inférieure à 1. De plus, il n'existe aucune paire de singulet par site car la densité est inférieure à une particule par site, aucune paire n'existe donc, soit $\rho_{sg} \simeq 0$.

– Lorsque $\rho > 1$, il existe en moyenne plus d'une particule par site et il est possible de former des paires de singulets. Dans ce cas, le terme U_2 joue un rôle déterminant dans la statistique:

- sur l'intervalle $\rho \in]1, 2]$, les paires de singulets se forment et ρ_{sg} augmente quasi linéairement de 0 en $\rho = 1$ jusqu'à 1 en $\rho = 2$. La formation de paires singulets fait décroître le moment magnétique local $F^2(0)$ jusqu'à $F^2(0) = 0$ en $\rho = 2$ car le système est alors entièrement composé de telles paires pour cette densité. La valeur du pic du facteur de structure magnétique $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$ décroît lorsque la densité approche $\rho = 2$;

- enfin, pour $\rho \in]2, 3.3]$, les quantités $S_{xx}(\mathbf{q} = \mathbf{0})/L^2$, $F^2(0)$ et ρ_{sg} augmentent de façon monotone: le moment magnétique local et l'aimantation globale augmentent bien que des paires de singulets se forment. La densité superfluide décroît faiblement lors du passage près du lobe MI $\rho = 3$. Il est intéressant de noter le comportement linéaire de $F^2(0)$ et de ρ_s sur l'intervalle $\rho \in [1.8, 2.2]$.

8.4 Conclusion du Chapitre 8: étude des bosons de spin-1 en Monte Carlo quantique

Dans ce chapitre, nous avons présenté nos résultats préliminaires du système de bosons de spin-1 avec la méthode de Monte Carlo quantique dans le sous-ensemble $F_z^{total} = 0$ de l'ensemble canonique. Cette méthode nous a permis de mener une étude approfondie de ce système et de comparer nos résultats avec ceux obtenus en champ moyen. Nous avons détaillé deux cas: le cas « ferromagnétique », tel que $U_2/U_0 < 0$ et le cas « antiferromagnétique », tel que $U_2/U_0 > 0$. Bien que, pour ces deux cas, le diagramme de phase soit composé de phases isolantes de Mott et d'une phase condensée de Bose-Einstein superfluide, les propriétés de ces phases sont très différentes en fonction du signe de U_2 . D'autre part, la délimitation des phases est en assez bon accord avec les deux méthodes, surtout pour la densité $\rho = 2$ avec $U_2/U_0 < 0$.

De façon générale, le cas $U_2/U_0 < 0$ favorise des états maximisant le moment magnétique local tel que $F^2(0) = \rho(\rho+1)$. Dans tout le diagramme de phase, les histogrammes des particules de spin +1 et -1 sont égaux et centrés en $\rho_\sigma = \rho/4$, alors que l'histogramme des particules de spin 0 est centré en $\rho_0 = \rho/2$. Les densités valent $\rho_0 = 2\rho_- = 2\rho_+ = \rho/2$. Ces particularités sont bien en accord avec les prédictions du champ moyen en ce qui concerne la phase superfluide. Selon le champ moyen, toutes les phases de Mott sont dégénérées. La méthode de Monte Carlo quantique permet de constater que la dégénérescence de ces phases est levée par des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules de spin $+-$, $+0$ et -0 , mouvements aussi présents dans la phase superfluide. D'autre part, il existe dans tout le diagramme de phase des corrélations spin-spin dans le plan xy et le facteur de structure magnétique admet un pic en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ indiquant qu'un ordre ferromagnétique existe. Les transitions de phases sont toutes du second ordre et toutes les phases de Mott disparaissent lorsque $U_2/U_0 = -0.5$. Lorsque la densité est fixée, les transitions sont de la classe d'universalité du modèle XY classique 3D.

A *contrario*, le cas $U_2/U_0 > 0$ favorise des états minimisant le moment magnétique local. Lorsque $U_2/U_0 = 0.5$, toutes les phases de Mott de densité impaire disparaissent. La phase de Mott $\rho = 2$, non dégénérée lorsque $t/U_0 = 0$, est composée de paires de particules singulets telles que $F^2(0) = 0$ et est la phase la mieux décrite par le champ moyen. Aucune dégénérescence ne peut être levée, il n'existe donc pas de mouvements cohérents particuliers dans cette phase qui présente seulement des propriétés sur site.

Dans tout le reste du diagramme de phase, *i.e.* dans la phase de Mott $\rho = 1$ et dans la phase superfluide, les histogrammes sont polarisés: $\max(P(\rho_{\pm}))$ en $\rho_{\pm} \simeq \rho/2$ et $\max(P(\rho_0))$ en $\rho_0 \simeq 0$. Ces phases sont donc très majoritairement composées de particules de spin ± 1 . Pour la phase superfluide, cette polarisation diffère de celle du champ moyen qui prédit que cette phase est soit majoritairement composée de particules de spin 0, soit majoritairement composée de particules de spin ± 1 avec $\rho_+ = \rho_-$. Par ailleurs, des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules de spin $+-$, $+0$ et -0 sont présents dans ces phases et assurent la levée de la dégénérescence de la phase de Mott $\rho = 1$ observée en $t/U_0 = 0$. De plus, une aimantation globale ferromagnétique existe dans ces phases.

Les transitions sont du second ordre, à l'exception des transitions localisées au bout du lobe MI $\rho = 2$ qui sont du premier ordre lorsque $U_2/U_0 \in]0, 0.15[$. L'ordre des transitions est partiellement en accord avec le champ moyen qui prédit des transitions du premier ordre sur une gamme plus large ($U_2/U_0 \in]0, 0.2]$). De plus, les transitions du second ordre à densité constante sont de la classe d'universalité du modèle XY classique 3D.

Ces résultats préliminaires sont similaires à ceux du système de bosons de spin-1/2 avec la correspondance $\Lambda \leftrightarrow \{(-1) \& (+1)\}$, soit $\rho_- = \rho_+ = \rho_{\Lambda}/2$. Enfin, contrairement aux prédictions théoriques des références [4, 5], la phase nématique n'a pas été observée. Nous effectuons actuellement une recherche minutieuse de la signature de cette phase dans l'ensemble canonique et grand canonique.

Conclusion

Le but de cette thèse est d’approfondir nos connaissances dans le domaine du magnétisme quantique spontanément adopté par des phases quantiques, telles que la phase superfluide ou les phases isolantes de Mott. Ce travail numérique, complémentaire aux études expérimentales menées par d’autres groupes, a montré l’existence de nouvelles phases quantiques magnétiques. Plus précisément, l’étude de deux systèmes de bosons fortement corrélés sur réseaux optiques a montré que les interactions entre les spins des atomes apportent une grande richesse à ces phases.

Bien que l’étude de tels systèmes soit envisageable par diverses méthodes, l’approche du champ moyen est très souvent utilisée. Dans notre cas, cette approche conduit à un hamiltonien simplifié que nous diagonalisons numériquement. Malgré le fait que cette méthode soit approximative, elle présente l’avantage d’être facile à implémenter et rapide à utiliser. De son utilisation parfois abusive naît la nécessité de tester les limites de cette méthode [3, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16]. La méthode de Monte Carlo quantique, méthode exacte, nous a permis de comparer, avec celle-ci, une méthode de champ moyen précédemment utilisée pour étudier les mêmes systèmes [7, 8, 9]. La conclusion de cette comparaison est que, à température nulle, cette méthode n’est pas qualitativement correcte à une dimension, comme attendu, bien qu’elle se montre satisfaisante à deux dimensions. Cependant, cette méthode échoue dès lors que les effets thermiques interviennent. Ce constat invalide donc une partie des études menées dans les références [9, 12, 16], notamment en ce qui concerne les transitions de phase à température finie.

Deux modèles, présentés au [Chapitre 3](#), ont été étudiés: le modèle de bosons de spin-1/2 et le modèle de bosons de spin-1. Ces deux modèles mettent en jeu des conversions du spin des différentes espèces de bosons. Nous avons présenté l’étude de ces deux modèles avec une méthode en champ moyen « sur site » et avec la méthode de Monte Carlo quantique. L’algorithme utilisé avec la méthode de Monte Carlo quantique, l’algorithme des « [Fonctions de Green Stochastiques](#) » [95, 96], est une extension de l’algorithme de *Worm* canonique qui permet d’effectuer des conversions entre les espèces et donne accès aux fonctions de Green à N -corps. Les propriétés générales de cet algorithme ont été discutées au [Chapitre 4](#).

Le système de bosons de spin-1/2 a été étudié à la [troisième partie](#) de cette thèse. Ce système a tout d’abord été étudié à température nulle à une dimension au [Chapitre 5](#). Le diagramme de phase est composé de phases isolantes de Mott et d’une phase superfluide. Bien que le champ moyen apporte quelques renseignements, l’accord quantitatif des deux méthodes est peu satisfaisant.

L'étude en champ moyen a montré que la dégénérescence des phases de Mott, observée lorsque $U_2 = 0$, est partiellement ou totalement levée lorsque $U_2/U_0 \neq 0$. De plus,

- pour $U_2/U_0 < 0$: les populations sont équilibrées dans tout le diagramme de phase et le moment magnétique s'aligne suivant l'axe x . Toutes les transitions sont du second ordre et toutes les phases de Mott disparaissent lorsque $|U_2|/U_0 = 1$;
- pour $U_2/U_0 > 0$: les phases de Mott de densité impaire sont deux fois dégénérées et les populations sont déséquilibrées. À l'inverse, les phases de Mott de densité paire ne sont pas dégénérées et les populations sont équilibrées. Le moment magnétique s'oriente dans le plan yz dans tout le diagramme de phase. Par ailleurs, la phase superfluide n'est composée que d'une seule espèce: elle est polarisée. Cette polarisation, en accord avec la méthode de Monte Carlo quantique, n'a pas été observée lors des études antérieures effectuées en champ moyen par Krutitsky *et al.* [7, 8]. Le choix du hamiltonien étudié ici permet donc une meilleure description du système que celui des références [7, 8]. Pour des densités paires fixées, la transition Mott-superfluide est du premier ordre pour $U_2/U_0 \in]0, 0.2]$. De plus, lorsque $U_2/U_0 = 1$, toutes les phases de Mott de densité impaire disparaissent.

La méthode de Monte Carlo quantique confirme certaines propriétés locales des phases et montre que l'influence des effets thermiques devient considérable pour la phase de Mott $\rho = 1$ dans la limite de forte interaction entre particules $U_0 \gg t$. Un modèle effectif de spin basé sur le modèle de Heisenberg nous a permis de comprendre cet effet. La méthode de Monte Carlo quantique précise que:

- pour $U_2/U_0 = 0$: il existe dans les phases de Mott des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules de spin différent, mouvements de permutation d'une particule 0 et d'une particule Λ situées sur deux sites voisins. Ces mouvements assurent la levée de la dégénérescence de ces phases, dégénérescence observée lorsque $t/U_0 = 0$, et correspondent à un quasi-ordre magnétique à longue portée (QLRO) dans le plan xy . Nous avons montré que ces mouvements induisent une superfluidité anticorrélée ;
- pour $U_2/U_0 < 0$: les deux populations sont équilibrées et des mouvements anticorrélés cohérents sont présents dans toutes les phases. Un ordre ferromagnétique à longue portée (LRO) de symétrie discrète, de type Ising, existe suivant l'axe x dans les phases de Mott. Nous supposons que cet ordre existe aussi dans la phase superfluide ;
- pour $U_2/U_0 > 0$: pour les systèmes de taille finie étudiés, les phases de Mott de densité impaire, ainsi que la phase superfluide sont principalement composées d'une seule espèce: ces phases sont quasi-polarisées. En plus de ce résultat surprenant, des mouvements anticorrélés sont aussi présents dans ces phases et un quasi-ordre ferromagnétique à longue portée existe dans le plan yz . *A contrario*, les phases de Mott de densité paire ne sont pas dégénérées lorsque $t/U_0 = 0$ et les populations sont équilibrées. Aucun mouvement cohérent n'existe et ces phases ne présentent aucun ordre ou quasi-ordre magnétique.

Enfin, quel que soit le rapport U_2/U_0 , toutes les transitions étudiées avec la méthode de Monte Carlo quantique sont du second ordre, excepté les transitions à densité fixée qui sont de la classe d'universalité de Kosterlitz-Thouless du modèle XY classique 2D, ce qui contredit les prédictions du champ moyen. Cette étude a abouti à une publication dans la revue *Physical Review A* [17].

L'étude de ce système a été poursuivie à deux dimensions au [Chapitre 6](#). La [Section 6.1](#) montre qu'à température nulle, la méthode du champ moyen et la méthode de Monte Carlo quantique sont en assez bon accord qualitatif. D'autre part, les propriétés locales des phases sont identiques au cas 1D. Les principales différences observées dues à la dimensionnalité concernent l'ordre à longue portée des fonctions de Green, la forme des diagrammes de phases, ainsi que la nature des transitions de phases. À l'inverse du cas 1D, le système peut adopter, en 2D à température nulle, une phase ordonnée de symétrie continue, telle que la phase condensée de Bose-Einstein. Nos mesures montrent que la phase superfluide est condensée de Bose-Einstein. Pour $U_2/U_0 > 0$, les phases de Mott de densité impaire et la phase superfluide sont polarisées et présentent un ordre ferromagnétique à longue portée dans le plan yz .

Enfin, l'importance majeure de la dimensionnalité apparaît dans l'ordre des transitions: des transitions du premier ordre existent désormais pour le cas $U_2/U_0 > 0$ au bout du lobe de Mott $\rho = 2$. Plus précisément, ces transitions sont du premier ordre lorsque $U_2/U_0 \in]0, 0.2]$, comme le prédit le champ moyen. Dans tous les autres cas, les transitions sont du second ordre et les transitions à densité constante sont de la classe d'universalité du modèle XY classique 3D. Les principaux résultats présentés ont été publiés dans la revue *Physical Review B* [[18](#)].

La [Section 6.2](#) montre que le champ moyen échoue lorsque la température est non nulle. En effet, une nouvelle phase désordonnée, de même symétrie que la phase de Mott, mais compressible avec une densité non entière apparaît: cette phase est un liquide de Bose normal (NBL). Cette méthode, ne prenant pas en compte le terme cinétique dans les phases désordonnées, est incapable de discerner correctement la région de Mott de la région NBL. Nous avons donc poursuivi cette étude avec la méthode de Monte Carlo quantique.

Nous montrons que les effets thermiques détruisent immédiatement le condensat de Bose-Einstein. De plus, quel que soit le signe de U_2/U_0 , les effets thermiques détruisent très rapidement l'ordre magnétique des phases de Mott, ainsi que les mouvements cohérents anticorrélés présents dans ces phases à température nulle. Pour $U_2/U_0 > 0$, nous observons une quasi-polarisation de la phase superfluide. Pour $U_2/U_0 < 0$, il existe dans la phase superfluide des mouvements cohérents anticorrélés et l'ordre magnétique à longue portée de type Ising, observé dans cette phase à température nulle, persiste à température finie.

Par ailleurs, la transition superfluide-NBL est de la classe d'universalité de Kosterlitz-Thouless et la température de transition est déterminée à la fois par le critère du saut universel et par le maximum de la chaleur spécifique. Enfin, aucune transition du premier ordre n'a été observée. Les particularités liées aux effets de conversions du spin, avec $|U_2|/U_0 = 0.1$, semblent très fragiles face aux effets thermiques. Il risque donc d'être très difficile de les observer dans les systèmes expérimentaux pour lesquels les effets thermiques ont toujours une influence. Ces résultats ont été publiés dans la revue *The European Physical Journal B* [[19](#)].

Enfin, dans la [quatrième partie](#) de cette thèse, nous présentons nos résultats préliminaires du système de bosons de spin-1. À la différence du système précédent, nous nous sommes restreints au cas 2D à température nulle pour lequel le champ moyen et la méthode de Monte Carlo quantique sont en assez bon accord. Le [Chapitre 7](#) correspond à l'étude du système en champ moyen et le [Chapitre 8](#) présente les résultats en Monte Carlo quantique dans le sous-ensemble $F_z^{total} = 0$ de l'ensemble canonique. L'intérêt de l'étude de ce modèle, comparé à celui des bosons

de spin-1/2, est que de nouvelles phases magnétiques, telles que la « phase nématique », sont prédites par la théorie [4, 5]. De plus, cette étude complète l'analyse 1D précédemment effectuée par G. G. Batrouni *et al.* [22]. Nous montrons que:

- le cas $U_2/U_0 < 0$ favorise des états maximisant le moment magnétique local et un ordre ferromagnétique à longue portée existe dans le plan xy dans tout le diagramme de phase. La méthode de Monte Carlo quantique permet de constater que la dégénérescence de ces phases, présente en $t/U_0 = 0$, est levée par des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules, mouvements aussi présents dans la phase superfluide. De plus, toutes les phases de Mott disparaissent lorsque $U_2/U_0 = -0.5$;
- le cas $U_2/U_0 > 0$ favorise des états minimisant le moment magnétique local. Les phases de Mott de densité paire, phases non dégénérées lorsque $t/U_0 = 0$, sont composées d'états singulets et sont les phases les mieux décrites par le champ moyen. Aucune aimantation n'existe dans ces phases. Dans tout le reste du diagramme de phase, les histogrammes sont polarisés et les phases sont très majoritairement composées de particules de spin ± 1 . Pour la phase superfluide, cette polarisation diffère de celle prédite par le champ moyen. Par ailleurs, des mouvements cohérents anticorrélés de paires de particules sont présents et une aimantation globale ferromagnétique existe dans ces phases. Les transitions sont du second ordre, à l'exception des transitions localisées au bout du lobe de Mott $\rho = 2$ qui sont du premier ordre lorsque $U_2/U_0 \in]0, 0.15[$. L'ordre des transitions est partiellement en accord avec le champ moyen qui prédit une transition du premier ordre sur une gamme plus large ($U_2/U_0 \in]0, 0.2[$) ;

Ces résultats préliminaires sont similaires à ceux du système de bosons de spin-1/2 avec la correspondance $\Lambda \leftrightarrow \{(-1) \& (+1)\}$. Enfin, l'ordre nématique prédit par les références [4, 5] n'a pas été observé. Nous effectuons actuellement une recherche minutieuse de la signature de la phase nématique dans l'ensemble canonique et grand canonique.

Pour conclure ce rapport, il est envisageable de poursuivre l'étude de ces systèmes en considérant l'inhomogénéité du piège optique et en incluant une interaction de répulsion entre plus proches voisins. Cette interaction permettrait une analyse plus réaliste et introduirait une compétition supplémentaire entre les différents termes du hamiltonien. Il serait très surprenant que les mouvements cohérents anticorrélés observés persistent lorsqu'un ordre en échiquier se développe. Une interaction spin-spin entre plus proches voisins conduirait sans doute à de nouvelles propriétés magnétiques étonnantes.

Bibliographie

- [1] FEYNMAN, R. P. *Int. J. Theor. Phys.*, **21**: 467, 1982.
- [2] BLOCH, I., J. DALIBARD, and W. ZWERGER. *Rev. Mod. Phys.*, **80**: 885, 2008.
- [3] SACHDEV, S. *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 1999.
- [4] IMAMBEKOV, A., M. LUKIN, and E. DEMLER. *Phys. Rev. A*, **68**: 063602, 2003.
- [5] IMAMBEKOV, A., M. LUKIN, and E. DEMLER. *Phys. Rev. Lett.*, **93**: 120405, 2004.
- [6] HUBBARD, J. *Proc. Roy. Soc.*, **A276**: 238, 1963.
- [7] KRUTITSKY, K. V. and R. GRAHAM. *Phys. Rev. A*, **70**: 063610, 2004.
- [8] KRUTITSKY, K. V., M. TIMMER, and R. GRAHAM. *Phys. Rev. A*, **71**: 033623, 2005.
- [9] PAI, V., K. SHESHADRI, and R. PANDIT. *Phys. Rev. B*, **77**: 014503, 2008.
- [10] VAN OOSTEN, D., P. VAN DER STRATEN, and H. T. C. STOOF. *Phys. Rev. A*, **63**: 053601, 2001.
- [11] FOSS-FEIG, M. and A. M. REY. *Phys. Rev. A*, **84**: 053619, 2011.
- [12] ŁAČKI, M., S. PAGANELLI, V. AHUFINGER, A. SANPERA, and J. ZAKRZEWSKI. *Phys. Rev. A*, **83**: 013605, 2011.
- [13] SVIDZINSKY, A. A. and S. T. CHUI. *Phys. Rev. A*, **68**: 043612, 2003.
- [14] TSUCHIYA, S., S. KURIHARA, and T. KIMURA. *Phys. Rev. A*, **70**: 043628, 2004.
- [15] KIMURA, T., S. TSUCHIYA, and S. KURIHARA. *Phys. Rev. Lett.*, **94**: 110403, 2005.
- [16] KRUTITSKY, K. V., A. PELSTER, and R. GRAHAM. *New J. Phys.*, **8**: 187, 2006.
- [17] DE FORGES DE PARNY, L., M. TRAYNARD, F. HÉBERT, V. G. ROUSSEAU, R. T. SCALETTAR, and G. G. BATROUNI. *Phys. Rev. A*, **82**: 063602, 2010.
- [18] DE FORGES DE PARNY, L., F. HÉBERT, V. G. ROUSSEAU, R. T. SCALETTAR, and G. G. BATROUNI. *Phys. Rev. B*, **84**: 064529, 2011.
- [19] DE FORGES DE PARNY, L., F. HÉBERT, V. G. ROUSSEAU, and G. G. BATROUNI. *Eur. Phys. J. B*, **85**: 169, 2012.
- [20] STAMPER-KURN, D. M. and M. UEDA. [cond-mat/1205.1888](https://arxiv.org/abs/cond-mat/1205.1888).

- [21] KAWAGUCHI, Y., H. SAITO, K. KUDO, and M. UEDA. *Phys. Rev. A*, **82**: 043627, 2010.
- [22] BATROUNI, G. G., V. G. ROUSSEAU, and R. T. SCALETTAR. *Phys. Rev. Lett.*, **102**: 140402, 2009.
- [23] DEMLER, E. and F. ZHOU. *Phys. Rev. Lett.*, **88**: 163001, 2002.
- [24] SNOEK, M. and F. ZHOU. *Phys. Rev. B*, **69**: 094410, 2004.
- [25] VENGALATTORE, M., S. R. LESLIE, J. GUZMAN, and D. M. STAMPER-KURN. *Phys. Rev. Lett.*, **100**: 170403, 2008.
- [26] STENGER, J., S. INOUE, D. M. STAMPER-KURN, H. J. MIESNER, A. P. CHIKKATUR, and W. KETTERLE. *Nature*, **396**: 345, 1998.
- [27] WIDERA, A., O. MANDEL, M. GREINER, S. KREIM, T. W. HÄNSCH, and I. BLOCH. *Phys. Rev. Lett.*, **92**: 160406, 2004.
- [28] WIDERA, A., F. GERBIER, S. FÖLLING, T. GERICKE, O. MANDEL, and I. BLOCH. *New J. Phys.*, **8**: 152, 2006.
- [29] CHANG, M. S., C. D. HAMLEY, M. D. BARRETT, J. A. SAUER, K. M. FORTIER, W. ZHANG, L. YOU, and M. S. CHAPMAN. *Phys. Rev. Lett.*, **92**: 140403, 2004.
- [30] LEANHARDT, A. E., Y. SHIN, D. KIELPINSKI, D. E. PRITCHARD, and W. KETTERLE. *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 140403, 2003.
- [31] SCHMALJOHANN, H., M. ERHARD, J. KRONJAGER, M. KOTTKE, S. VAN STAA, L. CACCIAPUOTI, J. J. ARLT, K. BONGS, and K. SENGSTOCK. *Phys. Rev. Lett.*, **92**: 040402, 2004.
- [32] STAMPER-KURN, D. M. and W. KETTERLE. *Coherent Atomic Matter Waves*. Edited by R. Kaiser, C. Westbrook, and F. David, Springer, p. 137, 2001.
- [33] VENGALATTORE, M., J. GUZMAN, S. R. LESLIE, F. SERWANE, and D. M. STAMPER-KURN. [cond-mat/0901.3800](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0901.3800).
- [34] SAU, J. D., S. R. LESLIE, D. M. STAMPER-KURN, and M. L. COHEN. *Phys. Rev. A*, **80**: 023622, 2009.
- [35] JAKSCH, D., C. BRUDER, J. I. CIRAC, C. W. GARDINER, and P. ZOLLER. *Phys. Rev. Lett.*, **81**: 3108, 1998.
- [36] HO, T. L. *Phys. Rev. Lett.*, **81**: 742, 1998.
- [37] MAZZA, L., M. RIZZI, M. LEWENSTEIN, and J. I. CIRAC. *Phys. Rev. A*, **82**: 043629, 2010.
- [38] ASHHAB, S. *J. Low Temp. Phys.*, **140**: 51, 2005.
- [39] APAJA, V. and O. F. SYLJUÅSEN. *Phys. Rev. A*, **74**: 035601, 2006.
- [40] BERGKVIST, S., I. MCCULLOCH, and A. ROSENGREN. *Phys. Rev. A*, **74**: 053419, 2006.

-
- [41] KAWAGUCHI, Y., N. T. PHUC, and P. B. BLAKIE. [cond-mat/1202.0094](#).
- [42] LAW, C. K, H. PU, and N. P. BIGELOW. *Phys. Rev. Lett.*, **81**: 5257, 1998.
- [43] OHMI, T. and K. MACHIDA. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **67**: 1822, 1998.
- [44] PU, H., C. K. LAW, S. RAGHAVAN, J. H. EBERLY, and N. P. BIGELOW. *Phys. Rev. A*, **60**: 1463, 1999.
- [45] RIZZI, M., D. ROSSINI, G. DE CHIARA, S. MONTANGERO, and R. FAZIO. *Phys. Rev. Lett.*, **95**: 240404, 2005.
- [46] DALIBARD, J. and C. SALOMON. *Expériences avec des Atomes Froids*. Séminaire Poincaré 1, 39-62, 2003.
- [47] ANDERSON, M. H., J. ENSHER, M. MATTHEWS, C. WIEMAN, and E. CORNELL. *Science*, **269**: 198, 1995.
- [48] DAVIS, K. B., M. O. MEWES, M. R. ANDREWS, N. J. VAN DRUTEN, D. S. DURFEE, D. M. KURN, and W. KETTERLE. *Phys. Rev. Lett.*, **75**: 3969, 1995.
- [49] YUKALOV, V. I. [cond-mat/0901.0636](#).
- [50] KLAERS, J., J. SCHMITT, F. VEWINGER, and M. WEITZ. *Nature*, **468**: 545, 2010.
- [51] KAPITZA, P. *Nature*, **141**: 74, 1938.
- [52] ALLEN, J. F. and A. D. MISENER. *Nature*, **141**: 75, 1938.
- [53] PR. REMPE. www.mpg.de/cms/mpq/en/departments/quanten/homepage_cms/index.html.
- [54] GREINER, M. and S. FÖLLING. *Nature*, **453**: 736, 2008.
- [55] GREINER, M., O. MANDEL, T. ESSLINGER, T. W. HÄNSCH, and I. BLOCH. *Nature*, **415**: 39, 2002.
- [56] SHIN, Y. I., A. SCHIROTZEK, C. H. SCHUNCK, and W. KETTERLE. *Phys. Rev. Lett.*, **101**: 070404, 2008.
- [57] SHIN, Y. I., C. H. SCHUNCK, A. SCHIROTZEK, and W. KETTERLE. *Nature*, **451**: 689, 2008.
- [58] TREFZGER, C., C. MENOTTI, B. CAPOGROSSO-SANSONE, and M. LEWENSTEIN. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **44**: 193001, 2011.
- [59] MANDEL, O., M. GREINER, A. WIDERA, T. ROM, T. W. HÄNSCH, and I. BLOCH. *Nature*, **425**: 937, 2003.
- [60] SADLER, L. E., J. M. HIGBIE, S. R. LESLIE, M. VENGALATTORE, and D. M. STAMPER-KURN. *Nature*, **443**: 312, 2006.
- [61] LESLIE, S. R., J. GUZMAN, M. VENGALATTORE, J. D. SAU, M. L. COHEN, and D. M. STAMPER-KURN. *Phys. Rev. A*, **79**: 043631, 2009.

- [62] INOUE, S., M. R. ANDREWS, J. STENGER, H. J. MIESNER, D. M. STAMPER-KURN, and W. KETTERLE. *Nature*, **392**: 151, 1998.
- [63] THEIS, M., G. THALHAMMER, K. WINKLER, M. HELLWIG, G. RUFF, R. GRIMM, and J. H. DENSCHLAG. *Phys. Rev. Lett.*, **93**: 123001, 2004.
- [64] THALHAMMER, G., M. THEIS, K. WINKLER, R. GRIMM, and J. H. DENSCHLAG. *Phys. Rev. A*, **71**: 033403, 2005.
- [65] GREINER, M. *Dissertation in the Physics department of the Ludwig-Maximilians-Universität München*. 2003.
- [66] FISHER, M. P. A., P. B. WEICHMAN, G. GRINSTEIN, and D. S. FISHER. *Phys. Rev. B*, **40**: 546, 1989.
- [67] HOHENBERG, P. C. *Phys. Rev.*, **158**: 383, 1967.
- [68] MERMIN, N. D. *Phys. Rev.*, **176**: 250, 1968.
- [69] MERMIN, N. D. and H. WAGNER. *Phys. Rev. Lett.*, **17**: 1133, 1967.
- [70] BURNETT, K., P. S. JULIENNE, P. D. LETT, E. TIESINGA, and C. J. WILLIAMS. *Nature*, **416**: 225, 2002.
- [71] SØRENSEN, O. S. and N. NYGAARD. *Phys. Rev. A*, **79**: 053601, 2009.
- [72] TIESINGA, E., C. J. WILLIAMS, P. S. JULIENNE, K. M. JONES, P. D. LETT, and W. D. PHILLIPS. *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.*, **101**: 505, 1996.
- [73] MANDEL, O., M. GREINER, A. WIDERA, T. ROM, T. W. HÄNSCH, and I. BLOCH. *Phys. Rev. Lett.*, **91**: 010407, 2003.
- [74] TAKAYOSHI, S., M. SATO, and S. FURUKAWA. *Phys. Rev. A*, **81**: 053606, 2010.
- [75] AUERBACH, A. and D. P. AROVAS. *Introduction to Frustrated Magnetism*. Edited by C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, Springer, 2011.
- [76] CAZALILLA, M. A., R. CITRO, T. GIAMARCHI, E. ORIGNAC, and M. RIGOL. *Rev. Mod. Phys.*, **83**: 1405, 2011.
- [77] PRESS, W. H., B. P. FLANNERY, S. A. TEUKOLSKI, and W. T. VETTERLING. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [78] CULLUM, J. K. and R. A. WILLOUGHBY. *Progress in Scientific Computing*. Birkhäuser Boston, Inc., Boston, 1985.
- [79] WHITE, S. R. *Phys. Rev. Lett.*, **69**: 2863, 1992.
- [80] WHITE, S. R. and R. M. NOACK. *Phys. Rev. Lett.*, **68**: 3487, 1992.
- [81] WHITE, S. R. *Phys. Rev. B*, **48**: 10345, 1993.
- [82] CHIARA, G. D., M. RIZZI, D. ROSSINI, and S. MONTANGERO. *J. Comput. Theor. Nanosci.*, **5**: 1277, 2008.

-
- [83] HALLBERG, K. *CRM Series in Mathematical Physics*. Edited by D. Senechal, A. M. Tremblay and C. Bourbonnais, Springer, New York, 2003.
- [84] MANMANA, S. R., A. MURAMATSU, and R. M. NOACK. *AIP Conf. Proc.*, **789**: 269, 2005.
- [85] NOACK, R. M. and S. R. MANMANA. *AIP Conf. Proc.*, **789**: 93, 2005.
- [86] SCHOLLWÖCK, U. *Rev. Mod. Phys.*, **77**: 259, 2005.
- [87] HIRSCH, J. E., R. L. SUGAR, D. J. SCALAPINO, and R. BLANKENBECLER. *Phys. Rev. B*, **26**: 5033, 1982.
- [88] SWENDSEN, R. H. and J. S. WANG. *Phys. Rev. Lett.*, **58**: 86, 1987.
- [89] EVERTZ, H. G., G. LANA, and M. MARCU. *Phys. Rev. Lett.*, **70**: 875, 1993.
- [90] KAWASHIMA, N., J. E. GUBERNATIS, and H. G. EVERTZ. *Phys. Rev. B*, **50**: 136, 1994.
- [91] PROKOF'EV, N. V., B. V. SVISTUNOV, and I. S. TUPITSYN. *JETP Letters.*, **64**: 911, 1996.
- [92] PROKOF'EV, N. V. and B. V. SVISTUNOV. *Phys. Rev. Lett.*, **80**: 4355, 1998.
- [93] PROKOF'EV, N. V. and B. V. SVISTUNOV. *Understanding Quantum Phase Transitions*. Edited by Lincoln D. Carr (Taylor & Francis, Boca Raton, 2010), [cond-mat/0910.1393](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0910.1393).
- [94] SANDVIK, A. W. *Phys. Rev. B*, **59**: 14157, 1999.
- [95] ROUSSEAU, V. G. *Phys. Rev. E*, **77**: 056705, 2008.
- [96] ROUSSEAU, V. G. *Phys. Rev. E*, **78**: 056707, 2008.
- [97] SONDHI, S. L., S. M. GIRVIN, J. P. CARINI, and D. SHAHAR. *Rev. Mod. Phys.*, **69**: 315, 1997.
- [98] BATROUNI, G. G. and R. T. SCALETTAR. *Quantum Phase Transitions*. Oxford University Press.
- [99] BATROUNI, G. G., R. T. SCALETTAR, and G. T. ZIMANYI. *Phys. Rev. Lett.*, **65**: 1765, 1990.
- [100] ONSAGER, L. *Nuovo Cimento*, **6**: 249, 1949.
- [101] CEPERLEY, D. M. and E. L. POLLOCK. *Phys. Rev. B*, **39**: 2084, 1984.
- [102] POLLOCK, E. L. and D. M. CEPERLEY. *Phys. Rev. B*, **36**: 8343, 1987.
- [103] TROTTER, H. F. *Proc. Am. Math. Soc.*, **10**: 545, 1959.
- [104] SUZUKI, M. *Phys. Lett. A*, **113**: 299, 1985.
- [105] FYE, R. M. *Phys. Lett. B*, **33**: 6271, 1986.
- [106] FYE, R. M. and R. T. SCALETTAR. *Phys. Lett. B*, **36**: 3833, 1987.

- [107] BARMA, M. and B. S. SHASTRY. *Phys. Rev. B*, **18**: 3351, 1978.
- [108] BATROUNI, G. G. and R. T. SCALETTAR. *Computer Physics Communications*, **97**: 63-81, 1996.
- [109] SCALETTAR, R. T. *Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry*. Edited by M. P. Nightingale and C. J. Umrigar (NATO Science Series, Kluwer Academic Press, Dordrecht), pp. 65-100.
- [110] VAN HOUCKE, K., S. M. A. ROMBOUTS, and L. POLLET. *Phys. Rev. E*, **73**: 056703, 2006.
- [111] ROMBOUTS, S. M. A, K. VAN HOUCKE, and L. POLLET. *Phys. Rev. Lett.*, **96**: 180603, 2006.
- [112] LARSON, J. and J. P. MARTIKAINEN. *Phys. Rev. A*, **80**: 033605, 2009.
- [113] LIU, W. V. and C. WU. *Phys. Rev. A*, **74**: 13607, 2006.
- [114] WU, C., W. V. LIU, J. E. MOORE, and S. DAS SARMA. *Phys. Rev. Lett.*, **97**: 190406, 2006.
- [115] WU, C. *Modern Physics Letters B*, **23**: 1, 2009.
- [116] WOLAK, M. J., V. G. ROUSSEAU, C. MINIATURA, B. GRÉMAUD, R. T. SCALETTAR, and G. G. BATROUNI. *Phys. Rev. A*, **82**: 013614, 2010.
- [117] ECKHOLT, M. and T. ROSCILDE. *Phys. Rev. Lett.*, **105**: 199603, 2010.
- [118] KUKLOV, A. B. and B. V. SVISTUNOV. *Phys. Rev. Lett.*, **90**: 100401, 2003.
- [119] ALTMAN, E., W. HOFSTETTER, E. DEMLER, and M. D. LUKIN. *New J. Phys.*, **5**: 113.1-113.19, 2003.
- [120] CAPOGROSSO-SANSONE, B., S. G. SÖYLER, N. V. PROKOF'EV, and B. V. SVISTUNOV. *Phys. Rev. A*, **81**: 053622, 2010.
- [121] CLADÉ, P., C. RYU, A. RAMANATHAN, K. HELMERSON, and W. D. PHILLIPS. [cond-mat/0805.3519](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0805.3519).
- [122] BATROUNI, G. G. and R. T. SCALETTAR. *Phys. Rev. Lett.*, **84**: 1599, 2000.
- [123] ECOLE NORMALE SUPÉRIEURE. www.lkb.ens.fr/recherche/atfroids/tutorial/index2.htm.
- [124] LE BELLAC, M. *Quantum and Statistical Field Theory*. Oxford University Press, 1992.
- [125] NELSON, D. R. and J. M. KOSTERLITZ. *Phys. Rev. Lett.*, **39**: 1201, 1977.
- [126] TOGA, T., H. TSUCHIURA, M. YAMASHITA, K. INABA, H. YOKOYAMA, and W. D. PHILLIPS. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **81**: 063001, 2012.
- [127] HARADA, K. and N. KAWASHIMA. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **70**: 13, 2001.
- [128] HARADA, K. and N. KAWASHIMA. *Phys. Rev. B*, **65**: 052403, 2002.

BOSONS DE SPIN- $1/2$ ET 1 SUR RÉSEAUX OPTIQUES EN UNE ET DEUX DIMENSIONS

Le piégeage optique d'atomes sur réseaux optiques permet d'étudier leur comportement dans un régime de très basse température, de l'ordre du nanokelvin, sans geler le degré de liberté de leur moment cinétique. Ces méthodes récentes de piégeage offrent la possibilité d'analyser le magnétisme des phases quantiques spontanément adopté par les atomes. Dans cette thèse, nous étudions numériquement des bosons à deux états effectifs de spin, ou bosons de spin- $1/2$, ainsi que des bosons à trois états de spin, ou bosons de spin-1, avec deux méthodes conceptuellement différentes: une approche simplifiée en champ moyen et une méthode exacte, la méthode de Monte Carlo Quantique. Au delà de l'étude de ces deux systèmes, nous comparons une méthode en champ moyen, parfois abusivement employée, à la méthode de Monte Carlo Quantique. L'étude approfondie du système de bosons de spin- $1/2$ en une et deux dimensions dans la limite de température nulle montre l'influence de la dimension sur la physique de ce système. Les effets thermiques, non négligeables expérimentalement, sont aussi étudiés. Enfin, le système de bosons de spin-1 piégés sur un réseau bidimensionnel, système plus riche et plus complexe à étudier que le précédent, est étudié dans la limite de température nulle. L'étude de ces deux systèmes révèle différentes organisations magnétiques dans les phases isolantes de Mott ainsi que dans la phase superfluide, telles qu'un superfluide ferromagnétique. Des transitions de phases du premier ordre et des mouvements cohérents anticorrélés, présents dans les phases de Mott, sont aussi observés.

Mots-clés: *Bosons sur réseaux optiques, Condensats de Bose-Einstein mixtes, Modèle de Bose-Hubbard, Magnétisme quantique, Monte Carlo quantique, Systèmes fortement corrélés, Thermodynamique Statistique, Matière condensée.*

SPIN- $1/2$ AND 1 BOSONS IN OPTICAL LATTICES IN ONE AND TWO DIMENSIONS

Optical trapping of atoms on optical lattices allows the study of their behavior in the range of ultra low temperature, at the nanokelvin scale, without freezing their angular momentum degrees of freedom. Those recent trapping methods offer the possibility to analyse the quantum magnetism spontaneously adopted by the atoms. In this thesis we study numerically bosons with two internal effective degrees of freedom, referred to as spin- $1/2$ bosons, and also bosons with three degrees of freedom, spin-1 bosons, with two conceptually different methods: a simplified one using mean field approximation and an exact method, the Quantum Monte Carlo method. Beyond the study of these two systems, we compare a mean field method, sometimes excessively used, to the Quantum Monte Carlo method. The thorough investigation of the spin- $1/2$ bosons system in one and two dimensions in the zero temperature limit shows the influence of dimensionality on the physical properties of this system. The thermal effects, still present experimentally, are also analysed. Lastly, the spin-1 boson system trapped into a two dimensional lattice, a richer and more complicated system than the previous one, is investigated in the zero temperature limit. The study of these two systems reveals different magnetic organization in Mott insulators and superfluid phases, such as a ferromagnetic superfluid. First order phase transitions and coherent anticorrelated movements, present in the Mott phases, are also observed.

Keywords: *Spinor Boson systems, Optical lattices, Multicomponent Bose-Einstein condensates, Bose-Hubbard model, Quantum Monte Carlo, Strongly correlated systems, Statistical Thermodynamics, Condensed Matter.*