



HAL
open science

Bosons couplés à des spins $1/2$ sur réseau

Thibaut Flottat

► **To cite this version:**

Thibaut Flottat. Bosons couplés à des spins $1/2$ sur réseau. Autre [cond-mat.other]. COMUE Université Côte d'Azur (2015 - 2019), 2016. Français. NNT : 2016AZUR4080 . tel-01484474

HAL Id: tel-01484474

<https://theses.hal.science/tel-01484474>

Submitted on 7 Mar 2017

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

ECOLE DOCTORALE
SCIENCES FONDAMENTALES
ET APPLIQUÉES

T H È S E

pour obtenir le titre de

Docteur en Sciences

de l'Université de Nice - Sophia Antipolis

Discipline : Physique

Présentée et soutenue par

Thibaut FLOTTAT

Bosons couplés à des spins $1/2$
sur réseau

Thèse dirigée par George G. BATROUNI
préparée à l'Institut Non Linéaire de Nice
soutenue le 17 octobre 2016

Jury :

<i>Rapporteurs :</i>	Anna MINGUZZI	-	Directeur de Recherches (LPMMC)
	Guillaume ROUX	-	Maître de Conférences (LPTMS)
<i>Directeur :</i>	George G. BATROUNI	-	Professeur (INLN)
<i>Présidente :</i>	Patrizia VIGNOLO	-	Professeur (INLN)
<i>Examineurs :</i>	Marco SCHIRÓ	-	Chargé de Recherches (IPhT)
	Frédéric HÉBERT	-	Maître de Conférences (INLN)

Remerciements

C'est malheureusement avec hâte (les contraintes administratives étant ce qu'elles sont) que j'écris la partie la plus importante, et qui sera sans doute la plus lue de ma thèse : les remerciements.

Une thèse étant le fruit d'un travail scientifique, je voudrais commencer par remercier George Batrouni, mon directeur de thèse. Merci à lui pour m'avoir accepté au sein de l'équipe « *Systèmes fortement corrélés et gaz quantiques* » afin d'effectuer cette thèse purement numérique et théorique, malgré mon background et ma formation d'expérimentateur. De la même manière, je tiens à remercier Frédéric Hébert. Bien qu'il n'ait pas son nom sur toutes les paperasses administratives, il est pour moi au même titre que George mon directeur de thèse, et m'a accompagné et dirigé durant ces trois dernières années. Les débuts ont été plutôt difficiles, et ils ont toujours répondu à mes questions, même les plus basiques.

J'en profite aussi pour remercier Tommaso Roscilde, qui m'avait donné le contact de George durant ma (dure) période de recherche de bourse de thèse.

Ayant commencé par mes encadrants, je continue par les membres permanents de l'INLN. Que ce soit les équipes de recherche, le service technique ou administratif (qui ont d'ailleurs été extrêmement compétents à chaque fois que j'ai eu besoin d'eux, je pense notamment à Christian Taggiasco et Nathalie Hamel), tout le monde participe à la formidable ambiance qui règne dans ce laboratoire, que je ne peux qu'admirer et saluer. Je remercie aussi Jean-Marc Gambaudo ainsi que Patrizia Vignolo, les deux directeurs successifs du laboratoire, merci à vous deux de m'avoir accueilli en son sein.

Vient maintenant le tour de mes collègues étudiants du labo, doctorants et post-doctorants dont j'ai croisé la route plus ou moins longuement : Abdoulaye, Francois, Bruno, Jean-Jean, Aurélien, Patrice, Pierre, Foued, Michelle, Samir, Laurent, Simona, Tao, Taha, Ali, Axel n° 1 et 2, Antoine, Guido, Mathias et Mathias bis (qui bien que Maître de Conférences restera je pense un étudiant toute sa vie). Merci à vous pour avoir participé à tous ces petits moments, qu'ils se soient déroulés à l'intérieur ou à l'extérieur de l'INLN. Je pense plus particulièrement à certains de ces collègues qui sont devenus des copains voire des amis, inutile de les citer, ceux-ci se reconnaîtront. Enfin, impossible de ne pas citer Chloé et Yoni, qui font partis de ces rares personnes de la région que j'affectionne particulièrement : merci à vous pour ces moments passés, *i'll be back!*

Mes pensées se tournent maintenant vers ma contrée natale, qui se situe en terre Auvergnate. Ce petit coin de France contient à lui seul grand nombre d'attaches, à commencer par ma famille maternelle. Merci à mes parents, qui ont su éveiller puis

attiser ma curiosité étant enfant, et de toujours m'avoir laissé gérer mon orientation scolaire comme je le souhaitais. Merci à mon petit frère Antoine, dont le jeu de ces dernières années consiste à apprendre les noms de mes projets de recherche, lui qui est profondément littéraire. Je tiens à aussi remercier mes meilleurs amis, eux aussi mes frères : Antho, Guilhem, Titi et Antho, pour avoir toujours été là (enfin non, juste depuis une vingtaine d'année), et pour m'avoir apporté leur soutien lors de mon départ. Chris et toute la troupe de Dzebayi Saï-Saï, qui sont arrivés à un moment compliqué, et qui ont fait que je n'en serais peut-être pas là aujourd'hui. Bien que nous ne soyons pas sur le même bateau, vous savez que nous appartenons au même équipage. Merci à mes deux amies Mélanie et Amélie, pour leurs encouragements de ces trois dernières années, et plus spécialement à Amélie qui fut la seule à descendre (et à le pouvoir) à Nice pour assister à ma soutenance.

Pour terminer, je remercie les membres extérieurs de mon jury, Guillaume Roux, Anna Minguzzi et Marco Schiro, pour avoir lu ce manuscrit et s'être déplacés à Nice pour ma soutenance.

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Simulateurs quantiques	4
1.1.1	Réseaux Optiques	4
1.1.2	Électrodynamique Quantique sur réseau	7
1.2	Transitions de phases	12
1.2.1	Classification de Landau des transitions de phases	12
1.2.2	Transitions de phase quantiques	14
1.3	Plan de la thèse	18
	Bibliographie	19
2	Outils numériques et théoriques	27
2.1	Contexte	28
2.2	Théorie du champ moyen	28
2.3	Méthode de Monte-Carlo quantique	31
2.3.1	Idée générale de la méthode « classique »	32
2.3.2	Méthode quantique et formulation en intégrale de chemin	33
2.3.3	Algorithme des Fonctions de Green Stochastiques	36
	Bibliographie	40
3	Modèle de Kondo bosonique sur réseau	43
3.1	Introduction	44
3.1.1	Modèle à une impureté : l'effet Kondo	44
3.1.2	Du modèle à deux impuretés au réseau d'impuretés	47
3.2	Retour sur le modèle de Bose-Hubbard	50
3.2.1	Hamiltonien	50
3.2.2	Propriétés de phase et critiques	53
3.2.3	Extensions du modèle de Bose-Hubbard	56
3.3	Présentation du modèle	57
3.4	Analyse exacte à \mathcal{J}/\mathcal{U} fixé	61
3.4.1	Diagramme de phase	66
3.4.2	Transitions de phase quantique	71
3.4.3	Propriétés magnétiques	76
3.4.4	Effets thermiques	80
3.5	Conclusion	88
	Bibliographie	90
4	Modèle de Rabi sur réseau	95
4.1	Introduction	96
4.2	Limite à un seul site : le modèle de Rabi	100
4.2.1	Obtention du Hamiltonien	101

4.2.2	Approximation de l'onde tournante	103
4.2.3	Étude numérique	104
4.3	Modèle de Rabi sur réseau 1D	108
4.3.1	Hamiltoniens et propriétés critiques	109
4.3.2	Propriétés de phase et diagramme de phase	112
4.3.3	Équivalence avec le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau .	126
4.3.4	Vers le modèle de Dicke sur réseau	133
4.4	Conclusion	137
	Bibliographie	139
Conclusion		143
	Bibliographie	149

Introduction

Sommaire

1.1	Simulateurs quantiques	4
1.1.1	Réseaux Optiques	4
1.1.2	Électrodynamique Quantique sur réseau	7
1.2	Transitions de phases	12
1.2.1	Classification de Landau des transitions de phases	12
1.2.2	Transitions de phase quantiques	14
1.3	Plan de la thèse	18
	Bibliographie	19

Cette thèse présente une partie de mes travaux effectués lors de ces trois dernières années et prend sa place aux côtés de nombreuses études dans le domaine de la physique de la matière condensée dans un contexte tout particulier : celui des systèmes fortement corrélés. Contrairement aux systèmes décorrés, pour lesquels les particules composant les systèmes peuvent être traitées indépendamment, et où l'énergie prépondérante est l'énergie cinétique des particules, les fortes interactions mises en jeu dans les systèmes fortement corrélés rendent leur étude difficile. Prenons l'exemple des électrons évoluant au sein d'un métal : ceux-ci sont très bien décrits par la théorie des bandes, car ceux-ci se comportent comme des particules indépendantes. Ce n'est plus le cas quand on s'attache à la description des supraconducteurs conventionnels, où une description en terme de paires d'électrons s'avère nécessaire [Bardeen 1957]. Les systèmes fortement corrélés recouvrent un vaste pan de systèmes, allant des plasmas quark-gluons [Adams 2012] à des structures biologiques [Schneidman 2006]. Ces fortes corrélations peuvent aussi survenir pour des systèmes à très basse température. S'affranchir des fluctuations thermiques nous donne accès à des systèmes physiques qui seront gouvernés par les fluctuations quantiques uniquement. Dans ce régime particulier, de nouvelles phases de la matière, dites quantiques, vont voir le jour. Celles-ci présentent des propriétés pour le moins surprenantes et plutôt contre-intuitives dans le sens où elles n'apparaissent pas dans les conditions thermodynamiques usuelles.

En 1925, EINSTEIN [Einstein 1925] généralise les travaux de BOSE [Bose 1924], qui avait proposé une statistique différente de celle de Maxwell-Boltzmann pour les photons, à tous les bosons. Il prédit un quatrième état de la matière, en tous points différent des états solide, liquide et gazeux auxquels les physiciens de l'époque étaient confrontés. Considérons un gaz de bosons sans interactions, de densité n , caractérisés par leur longueur d'onde de de Broglie définie par :

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{\sqrt{2\pi m k_B T}}. \quad (1.1)$$

Cette dernière, qui représente l'extension spatiale d'une particule, est donc d'autant plus grande que la température est basse. À basse température, les fonctions d'ondes associées aux particules d'un système vont commencer à se recouvrir, quand $\lambda_{dB} \sim d$, où $d = n^{1/3}$ est la distance moyenne entre particules. Ainsi, pour un système tridimensionnel, et sous l'hypothèse que la densité n et la longueur d'onde de de Broglie λ_{dB} satisfont l'inégalité $n\lambda_{dB}^3 \geq 2.612$ [London 1938], un nombre macroscopique de bosons condenserait dans le même état de plus basse énergie et ces derniers se comporteraient comme une seule particule : le condensat de Bose-Einstein (« BEC » pour *Bose-Einstein Condensate*). Cependant, les températures nécessaires à la satisfaction de cette relation sont très faibles et semblaient hors d'atteinte expérimentalement. EINSTEIN écrira lui-même à EHRENFEST : « *l'idée est belle mais contient-elle une part de vérité ?* ».

Il faudra attendre 70 ans et le perfectionnement des techniques de cryogénie afin

d'observer pour la première fois ce phénomène : WIEMAN et CORNELL (parallèlement à KETTERLE [Davis 1995]) parviennent à condenser 90% des atomes d'un gaz de Rubidium dilué et refroidi à 170 nK [Anderson 1995], ce qui leur permit d'obtenir un BEC et le prix Nobel de 2001. La figure 1.1 montre la distribution des impulsions des particules d'un gaz d'atomes de Rubidium 87 pour différentes températures.

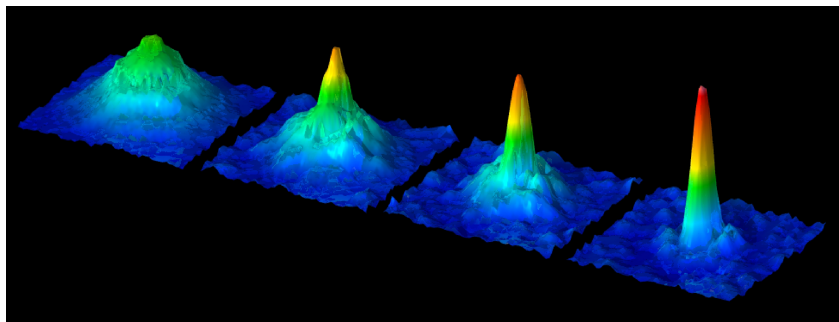


FIGURE 1.1 – Distribution des impulsions des particules d'un gaz de $6 \cdot 10^9$ atomes de ^{87}Rb refroidi de 0.03 mK (à l'extrême gauche) à 500 nK (à l'extrême droite). À gauche, on est en présence d'un gaz d'atomes ayant des impulsions distribuées thermiquement, tandis qu'à droite, le BEC formé arbore un pic représentant un nombre macroscopique d'atomes dans le même état d'impulsion nulle. Figure provenant de [Dürr 2000].

Il s'en suivit d'énormes investigations afin d'étudier les propriétés du condensat de Bose-Einstein et de manière plus générale les ondes de matière cohérentes et macroscopiques dans des systèmes à N -corps en interaction : études interférométriques [Andrews 1997], vortex et réseaux de vortex [Matthews 1999, Madison 2000, Abo-Shaeer 2001], mélanges de bosons/fermions [Shin 2008], condensats de spineurs [Kawaguchi 2012]. D'autres phénomènes sont reliés à la condensation de Bose-Einstein comme la superfluidité [Allen 1938, Kapitza 1938], la supraconductivité, voire même l'effet LASER, bien que ce dernier cas soit sujet à controverse [Schmitt 2015]. Contrairement au condensat de Bose-Einstein, superfluidité et supraconductivité mettent en jeu des bosons en interaction. Dans le cas de l'Hélium 4, seules 10% des particules sont dans un état de condensat de Bose-Einstein à température nulle, tandis que 100% sont dans un état superfluide du fait des interactions.

Comme nous allons le voir dans la section suivante, notre intérêt réside dans le piégeage d'un condensat dans ce qu'on appelle un réseau optique. Un condensat de Bose-Einstein est généralement bien décrit par la théorie de Bogoliubov des bosons en faible interaction, la longueur de diffusion étant inférieure à la distance moyenne entre particules. Par contre, si l'on place un BEC sur un réseau, ce ne sera plus le cas et nous devrons avoir recours à d'autres méthodes pour décrire

de tels systèmes. En effet, on pourra avoir accès à des régimes où les interactions entre particules mises en jeu ne peuvent plus être considérées comme faibles, d'où l'émergence de systèmes fortement corrélés.

1.1 Simulateurs quantiques

L'étude des systèmes fortement corrélés est, depuis maintenant plusieurs décennies, un des axes fondamentaux de recherche en physique de la matière condensée. En effet, les fortes corrélations au sein de ces systèmes entraînent l'émergence de nouveaux états de la matière. Ceux-ci présentent souvent des propriétés physiques exceptionnelles qui peuvent s'avérer très utiles, comme par exemple la magnétorésistance géante [Baibich 1988, Binasch 1989]. Comprendre, étudier ces systèmes fortement corrélés est donc d'une importance capitale dans le but d'améliorer certains dispositifs et d'en inventer de nouveaux, surtout dans les domaines de l'informatique quantique, des dispositifs de stockage, de l'amélioration des lasers, du transport et stockage de l'information [José García-Ripoll 2003, Deng 2003, Zhou 2015, Flurin 2015, Bhattacharya 2014].

Ce défi est cependant compliqué à relever, dans le sens où ces systèmes fortement corrélés, que l'on retrouve pour la plupart dans le cadre de la physique du solide, sont compliqués à sonder. Il est en effet très compliqué d'accéder aux propriétés microscopiques de tels systèmes, car les échelles de temps et de longueurs mises en jeu dans les différents phénomènes sont très petites. Pour un problème donné, le but premier du physicien est de simplifier ledit problème, qui peut être relativement complexe, tout en perdant le minimum d'information. C'est ainsi que, basées sur une proposition de FEYNMANN [Feynman 1982], des structures artificielles, que l'on appelle simulateurs quantiques, voient le jour afin de créer des systèmes à N -corps effectifs que l'on contrôle avec une grande précision.

1.1.1 Réseaux Optiques

Un réseau optique est typiquement créé en superposant plusieurs paires de lasers contra-propageant, ondes planes progressives, dans différentes directions généralement perpendiculaires les unes aux autres, comme le montre la figure 1.2. Les interférences vont donner naissance à une onde stationnaire. Celle-ci ressemble en tout point aux potentiels périodiques cristallins, créés par les ions positifs d'un matériau et dans lesquels les électrons de ce matériau se déplacent. On charge ensuite ces réseaux avec des gaz d'atomes ultra-froids dilués dont les particules auront une probabilité non nulle de passer d'un nœud du réseau à un autre. Le confinement de ces derniers provient de la force dipolaire. La fréquence du laser est choisie de façon à ce qu'elle soit légèrement inférieure à une fréquence de transition atomique (« décalage vers le rouge »), ce qui permet d'obtenir un potentiel attractif de la forme :

$$V_{dip} \simeq \frac{3\pi c^2 \Gamma}{2\omega_s^3} I(r), \quad (1.2)$$

avec ω_s la fréquence de transition atomique, δ la différence entre fréquence du laser et fréquence de transition atomique, Γ les pertes et $I(r)$ le profil d'intensité du laser.

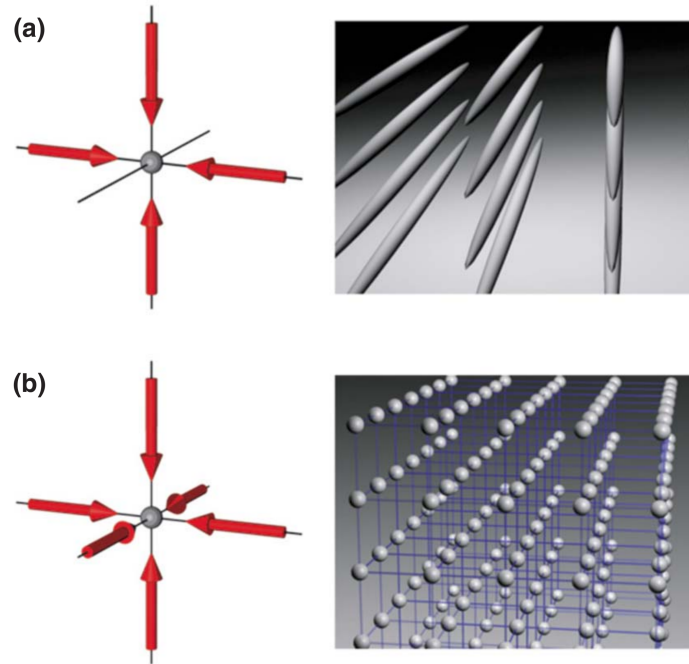


FIGURE 1.2 – Réseaux optiques bidimensionnel (a) et tridimensionnel (b). Ceux-ci sont formés en superposant 2 (a) ou 3 (b) paires de laser. Pour le réseau bidimensionnel, les atomes sont fortement confinés dans des potentiels unidimensionnels sous forme de tubes, tandis que pour le réseau tridimensionnel, le réseau optique correspond à un réseau cubique avec un confinement harmonique pour chaque site. Figure provenant de [Greiner 2003].

Cette technologie offre un très haut degré de contrôle sur les systèmes que l'on veut simuler. En effet, les lasers sont aujourd'hui largement maîtrisés : leur intensité permet de moduler l'amplitude du potentiel (et donc l'amplitude de saut des particules) tandis que leur fréquence permet de moduler le pas de ce réseau. De plus, on a la liberté de concevoir de nombreuses géométries de réseau. L'utilisation des résonances de Feshbach [Inouye 1998, Courteille 1998] nous permet aussi de moduler la force et la nature des interactions entre les particules en modifiant via un champ magnétique [Tiesinga 1993], l'intensité et le signe de la longueur de diffusion des particules. Enfin, nous avons la liberté de choisir la nature des particules du gaz : fermionique ou bosonique. On reconstruit donc par

ces dispositifs des systèmes de la physique de la matière condensée à une échelle 10^3 fois supérieure. On s'affranchit par ailleurs de toutes sortes de défauts liés à la nature des matériaux.

Un des modèles les plus célèbres décrivant ces systèmes est sans doute le modèle de Hubbard, qui décrit le déplacement des électrons au sein d'un réseau cristallin [Hubbard 1963], dans lequel une transition de phase entre un état isolant et métallique peut survenir. Il recouvre un ensemble de modèles de particules quantiques évoluant sur réseau, et est appelé modèle de Bose-Hubbard pour sa version bosonique [Fisher 1989]. Ce dernier décrit donc des bosons fortement corrélés sur réseau et a été l'objet de larges investigations depuis l'observation de la transition entre état superfluide (SF) et isolant de Mott (MI) dans un gaz de ^{87}Rb [Greiner 2002] (voir Fig. 1.3) suite à une proposition de JAKSCH [Jaksch 1998].

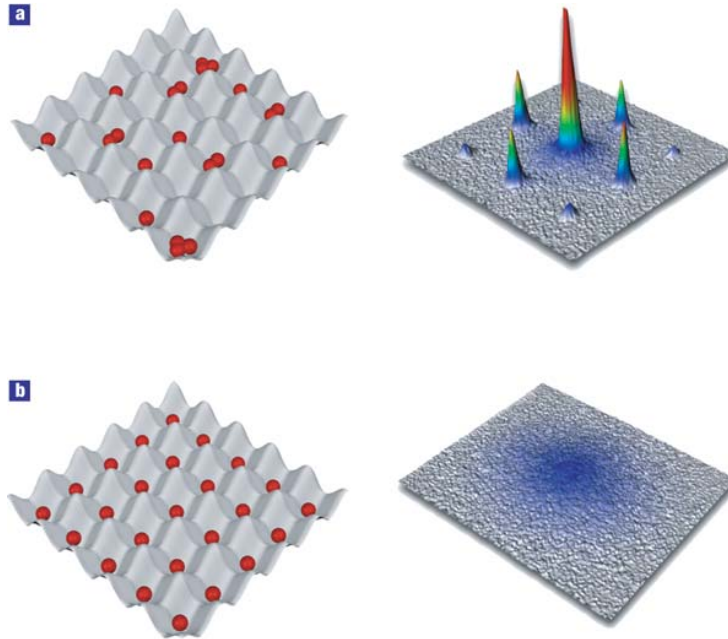


FIGURE 1.3 – Distribution des particules (à gauche) et de leur impulsion (à droite) pour un état superfluide (a) et état de Mott (b), dans un réseau bidimensionnel d'amplitude V_0 . Quand V_0 est faible, les particules peuvent se mouvoir sur le réseau, et ce sans friction : le système adopte une phase superfluide, et les particules sont décrites par une onde de matière macroscopique. La cohérence de phase entre les particules donne naissance à un motif d'interférence dans la distribution de leur impulsion. Au contraire, quand V_0 est élevé, l'amplitude de saut est faible, le système reste figé dans une phase isolante, appelée isolant de Mott, seulement si le nombre de particules est un multiple entier du nombre de site. Le nombre de particule par site ne fluctue pas, celles-ci sont localisées et aucune interférence n'est observée. Figure provenant de [Bloch 2005].

En utilisant le formalisme de la seconde quantification et dans l'ensemble grand canonique, le Hamiltonien de Bose-Hubbard est donné par :

$$\mathcal{H}_{BH} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + \text{h.c.}) + \frac{\mathcal{U}}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i a_i^\dagger a_i. \quad (1.3)$$

Les opérateurs a_i^\dagger et a_i sont les opérateurs bosoniques de création et d'annihilation sur un site i du réseau. Le premier terme décrit la capacité des bosons à se mouvoir dans le réseau, entre sites i et j plus proches voisins. Le second terme caractérise l'interaction sur site, tandis que le dernier fixe le nombre de bosons dans l'ensemble grand canonique, avec μ le potentiel chimique.

Cette thèse repose sur l'étude de modèles dérivant du modèle de Bose-Hubbard donné par le Hamiltonien 1.3 : ils auront tous en commun la partie cinétique qui décrit le déplacement des bosons sur le réseau.

Les technologies décrites plus haut ont levé le voile sur un nouvel horizon de la physique de la matière condensée, avec une approche fondamentalement différente de celle que l'on peut trouver en physique du solide. Dans cette dernière, une théorie est élaborée à partir des observations expérimentales, tandis que dans le domaine des atomes ultra-froids sur réseau, la très grande variété des montages expérimentaux, ainsi que le haut degré de contrôle sur les différents paramètres permettent de réaliser directement une expérience correspondante à un Hamiltonien donné. L'appellation de simulateur quantique prend ici tout son sens. Généralement, on s'attachera à définir le diagramme de phase des systèmes construits, mais aussi à étudier les propriétés des phases qu'ils peuvent adopter. Ces études, qu'elles soient théoriques, numériques ou expérimentales, seront bien entendu complémentaires [Capogrosso-Sansone 2007, Greiner 2002]. Bien qu'indispensable, l'approche numérique sera néanmoins réduite à des tailles de systèmes relativement faibles. De plus, les récents progrès en matière de piégeage et de maîtrise des réseaux optiques permettent d'aller toujours plus loin dans la conception et l'étude de divers Hamiltoniens. Par exemple, l'utilisation de pièges purement optiques permet de ne pas figer le degré de liberté de spin des particules considérées, ce qui entraîne donc l'émergence de phases ayant un caractère magnétique [Sadler 2006, de Forges de Parny 2011, de Forges de Parny 2013]. Le contrôle des interactions se fera par le biais de résonances de Feshbach optiques [Theis 2004, Thalhammer 2005]. Par ailleurs, on peut aujourd'hui stabiliser des particules qui évoluent dans différentes bandes d'énergies, ce qui permet d'étudier des phénomènes de couplage entre ces bandes.

Ce sera d'ailleurs le sujet du chapitre 3. Ce dernier (page 43) nous permettra aussi de revenir sur une description plus approfondie du modèle de Bose-Hubbard.

1.1.2 Électrodynamique Quantique sur réseau

Nous présentons dans cette sous-section une autre famille de systèmes permettant de simuler des systèmes quantiques à N -corps, basée sur des réseaux

de cavités couplées à des systèmes ayant un spectre d'énergie discret (typiquement des structures atomiques). De tels systèmes sont relativement récents [Hartmann 2006, Greentree 2006, Angelakis 2007] et sont décrits par la théorie de l'électrodynamique quantique (en cavité ou sur circuit) sur réseau. Avant de présenter ces systèmes, revenons tout d'abord sur une description élémentaire de l'électrodynamique quantique.

1.1.2.1 De l'émission spontanée au couplage ultra-fort

Cette branche de la physique quantique s'attache à la description du couplage entre lumière et matière. Les systèmes d'électrodynamique quantique sont composés de deux sous-systèmes : le champ électromagnétique (décrit de manière quantique) et une ou plusieurs particules (décrites elles aussi quantiquement) que l'on considère généralement comme des dipôles. Prenons l'exemple le plus simple d'un atome dans un état excité placé dans un environnement. Celui-ci est couplé avec le continuum des modes du champ électromagnétique et va se désexciter en émettant un photon via le processus d'émission spontanée qui est irréversible. Cette situation, bien décrite par la règle d'or de Fermi, est appelée régime de « couplage faible ». PURCELL montra que le couplage entre les deux sous-systèmes pouvait être drastiquement amplifié, en les confinant [Purcell 1946].

En effet, confiner la lumière permet d'augmenter les fluctuations quantiques du vide, celles-ci étant inversement proportionnelles au volume du confinement, ce qui se traduit donc par une augmentation du couplage. Cette idée est à la base de l'électrodynamique quantique en cavité (CQED) où l'on piège généralement un (ou plusieurs) atomes dans une cavité de Fabry-Pérot. D'autres dispositifs sont aussi utilisés, nous en présenterons certains par la suite.

Introduisons maintenant différentes grandeurs, nécessaires à la compréhension des phénomènes mis en jeu en CQED : le taux de perte de photons γ_l , le taux de perte atomique γ_s , la fréquence de transition du (des) dipôle(s) ω_s et g qui caractérise la force de l'interaction lumière-matière (correspondant à la demi fréquence de Rabi du vide Ω_{Rabi}). Le taux de perte de photons est relié au facteur de qualité Q de la cavité par $Q = \omega_l/2\gamma_l$. Lorsque la fréquence de Rabi est supérieure aux pertes, c'est-à-dire qu'elle satisfait à la relation $g \gg (\gamma_s, \gamma_l)$, on est dans un régime appelé régime de « couplage fort ».

Le concept de couplage fort dans les solides avait été introduit en 1958 par HOPFIELD [Hopfield 1958], suite à la théorie d'absorption excitonique qu'il trouvait incomplète. Dans ce régime, les nouveaux états propres résultant du couplage sont des quasi-particules appelées « polaritons », soit des polaritons de cavité dans ce contexte de confinement intra-cavité. Ces quasi-particules oscillent de manière quasi-réversible - au maximum - à la fréquence de Rabi entre l'état atomique et photonique, et ces oscillations sont appelées oscillations de Rabi. De tels systèmes sont décrits par le modèle de Jaynes-Cummings [Jaynes 1963], que nous présenterons dans le chapitre 4 (page 95), dont l'état fondamental est le produit tensoriel

du champ électromagnétique à zéro photon et de l'atome dans son état fondamental.

Que se passe-t-il si l'on améliore l'efficacité du couplage? En considérant des systèmes où g atteint une valeur de l'ordre de la transition ($g \lesssim \omega_s$), on atteint un régime de couplage « ultra-fort ». Dans ce cas, l'état fondamental est foncièrement différent : celui-ci n'est pas vide mais composé d'un nombre d'excitations non nul. En terme d'application, on peut y voir une certaine similitude avec l'effet Casimir dynamique [Dalvit 2011] où l'on produirait des photons à partir des fluctuations quantiques du vide. Dans cette situation, le système est décrit par le modèle de Rabi [Rabi 1936, Rabi 1937], lui aussi présenté dans le chapitre 4. Si l'on augmente encore la valeur de couplage, telle que $g \gtrsim \omega_s$, on atteint un régime de couplage fort profond [Casanova 2010]. Un comportement contre-intuitif de systèmes opérant dans ce régime serait le découplage entre les excitations atomiques et photoniques [De Liberato 2014, Schiró 2012].

Cependant, expérimentalement, il peut être compliqué de réaliser de tels dispositifs. Nous en présentons quelques uns, par ordre croissant de valeur de couplage dans ce qui suit.

Le régime de couplage fort a pour la première fois été observé dans le domaine du visible, où des atomes de Césium sont piégés dans une cavité de type Fabry-Pérot et où le facteur de qualité atteint une valeur d'environ 10^5 , ce qui correspond à une valeur de couplage $g/\omega_l \sim 10^{-9}$ [Thompson 1992]. Une autre expérience plus récente, utilisant des atomes de Rydberg dans une cavité supraconductrice de meilleur facteur de qualité ($Q \sim 10^8$) permet d'augmenter la valeur de couplage jusqu'à $g/\omega_l \sim 10^{-7}$ [Raimond 2001].

D'autres dispositifs de confinement des photons sont aussi envisageables, tels que les micro ou nanocavités à miroirs de Bragg [Angelakis 2004], les microdisques et microtoroïdes siliconés (voir Fig. 1.4) [Armani 2003], les cavités de Fabry-Pérot fibrées [Colombe 2007] ou encore des guides d'ondes supraconducteurs (voir Fig 1.5) jouant le rôle de résonateurs [Schoelkopf 2008]. De même, les atomes peuvent être remplacés par des atomes artificiels, c'est à dire par des systèmes ayant un spectre d'énergie discret. Ceux-ci peuvent par exemple être réalisés en utilisant des boîtes quantiques semiconductrices ou encore des boîtes à paire de Cooper, basées sur une jonction Josephson [Schoelkopf 2008], dispositif mésoscopique pour lequel on dispose d'un haut degré de contrôle.

À titre d'exemple, dans [Reithmaier 2011], les auteurs placent une couche mince contenant des boîtes quantiques de InGaAs, piégée entre deux miroirs de Bragg de GaAs/AlAs. Cela leur a permis d'atteindre un couplage de $g/\omega_l \sim 10^{-4}$. De même, dans [Wallraff 2004], une boîte à paire de Cooper est placée dans un guide d'onde supraconducteur. Fonctionnant dans le domaine des micro-ondes, les couplages atteignent des valeurs de $g/\omega_l \sim 10^{-3}$ [Blais 2004].

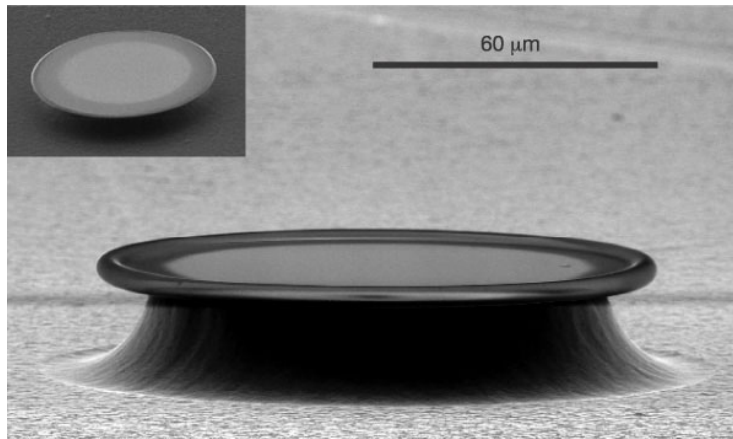


FIGURE 1.4 – Image obtenue par MEB d'un microrésonateur toroïdal, de facteur de qualité 10^8 . Image provenant de [Armani 2003].

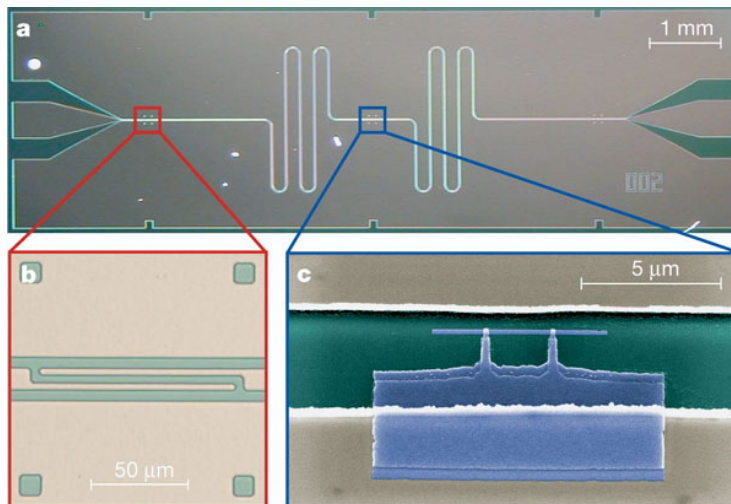


FIGURE 1.5 – (a) : guide d'onde supraconducteur coplanaire de Niobium de 24 mm, couplé à chaque extrémité du résonateur (voir (b)). (c) : boîte à paire de Cooper sur un substrat de silicium. Provenant de [Wallraff 2004].

Ainsi, il existe une large gamme de dispositifs expérimentaux qui permettent d'atteindre le couplage fort. Plus récemment, le régime de couplage ultra-fort (qui nous intéressera tout au long du chapitre 4) a été observé [Niemczyk 2010, Fedorov 2010]. En électrodynamique quantique sur circuits supraconducteurs, des dispositifs ont permis d'atteindre des valeurs de g/ω_l allant de 0.05 à 0.1 [Niemczyk 2010, Fedorov 2010]. De même, dans le domaine des semiconducteurs piégés dans des microcavités, on a atteint des valeurs de couplage de 0.1 [Anappara 2009] voire de 0.24 [Todorov 2010]. Le record actuel semble être de $g/\omega_l = 0.87$ et a été obtenu dans la référence [Maissen 2014]. Ces valeurs permettent d'atteindre le régime de couplage fort profond et le découplage que

nous avons mentionné a par ailleurs été observé, par exemple dans la référence [García-Ripoll 2015].

De nouveaux phénomènes émergent lorsque l'on couple entre elles les cavités précédemment décrites (schématisées sur la figure 1.6) opérant dans un régime de couplage fort. Un tel couplage est rendu possible par le recouvrement non nul des modes autorisés par les différentes cavités : les quanta du champ électromagnétique peuvent se mouvoir d'une cavité à une autre. Ces systèmes permettent, tout comme les systèmes d'atomes ultra-froids sur réseau, de réaliser des systèmes quantiques à N -corps. En effet, dans un régime de couplage fort, l'interaction sur site entre photon et atome peut donner lieu à un phénomène particulier, appelé *photon blockade* [Birnbbaum 2005]. Du fait de la forte interaction, le polariton de cavité engendre un décalage du mode de la cavité, ce qui empêche un autre photon d'y entrer. Le système adopte donc une phase isolante. On peut donc se demander de quelle manière la physique est modifiée quand ces cavités couplées opèrent en régime de couplage ultra-fort.

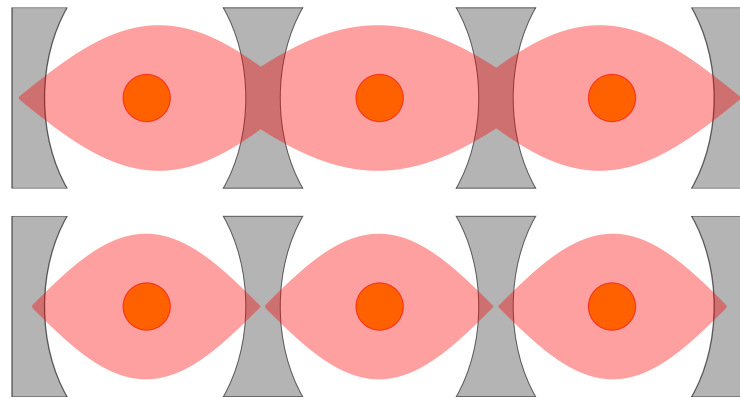


FIGURE 1.6 – Exemple d'un réseau unidimensionnel à 3 sites. En haut : les photons, représentés par un champ rouge, se meuvent en toute liberté sur le réseau de cavité. En bas : ce mouvement peut être figé du fait d'interactions répulsives entre photons, provenant du pompage des atomes (en orange).

De tels systèmes sont très intéressants vis-à-vis des atomes ultra-froids sur réseau, car ils ne nécessitent pas de refroidissements jusqu'à des températures de l'ordre du nanokelvin ; on peut même envisager des fonctionnements à température ambiante. Refroidir peut s'avérer nécessaire si l'on veut effectuer des mesures très précises : on utilisera de l'azote ou de l'hélium (refroidissement à 70 ou 4K), pour s'affranchir de rayonnements parasites du type rayonnement de corps noir. On reste pourtant bien au-dessus des valeurs nécessaires dans le domaine des atomes ultra-froids sur réseau. Le plus gros inconvénient de ces systèmes est lié aux pertes dues aux temps de décohérence des parties lumière et matière et donc à notre

capacité à concevoir des dispositifs d'une qualité et d'une efficacité suffisante pour minimiser ces pertes.

Comme nous venons de le voir, les systèmes précédemment décrits nous permettent de simuler une large variété d'autres systèmes quantiques complexes. La compétition des termes du Hamiltonien décrivant ces systèmes va généralement les amener à adopter une certaine phase plutôt qu'une autre. Nous nous attacherons à définir les différentes phases que le système peut choisir et à analyser leurs propriétés. Un autre centre d'intérêt sera d'étudier la nature des transitions entre ces différentes phases. La section suivante servira de rappel général concernant les transitions de phases quantiques, mais aussi à présenter les outils que nous utiliserons afin de caractériser la nature de ces transitions de phase.

1.2 Transitions de phases

Les transitions de phase sont parmi les phénomènes physiques auxquels nous sommes le plus souvent confrontés dans la vie de tous les jours. Ainsi, ces phénomènes fondamentaux ont été (et sont encore) un sujet d'étude central depuis plusieurs siècles. Une transition de phase survient lorsqu'on fait varier un certain paramètre sur un système et que celui-ci atteint une valeur critique, entraînant de profondes modifications qualitatives de ses propriétés. On peut prendre l'exemple de l'eau liquide qui se transforme en glace lorsqu'on diminue suffisamment la température ou que l'on augmente suffisamment la pression. De plus, une transition s'accompagne d'importants changements qualitatifs dans le comportement des corrélations.

En fait, ces transitions résultent d'une compétition entre entropie et énergie : un système cherchera toujours à minimiser son énergie libre $F = U - TS$ pour se trouver dans un état thermodynamiquement stable. Il apparaît très facilement que la température joue un rôle fondamental et prépondérant dans la transition.

Bien que les transitions de phase surviennent dans un large éventail de systèmes, celles-ci gardent cependant un caractère universel dans les concepts mis en jeu. Nous revenons dans ce qui suit sur la classification de Landau, dans laquelle nous introduirons les concepts fondamentaux de symétrie brisée et de paramètre d'ordre.

1.2.1 Classification de Landau des transitions de phases

LANDAU observa que, de manière générale, les phases après et avant transition n'avaient pas la même symétrie. Reprenons l'exemple de l'eau. Dans sa phase liquide, celle-ci est invariante par toutes les transformations de translation et de rotation. Par contre, dans sa phase solide, l'eau est invariante uniquement par des opérations de translation et de rotation laissant son réseau de Bravais inchangé. Ainsi, lors de la transition de phase, l'eau a perdu plusieurs éléments de symétrie. De manière générale, la phase désordonnée (qui est celle à haute température) est

la plus symétrique, tandis que la phase ordonnée (celle à basse température) est la moins symétrique. Landau définira donc un paramètre d'ordre m qui est tel que :

$$m \begin{cases} = 0 & \text{dans la phase haute température, symétrique, désordonnée.} \\ \neq 0 & \text{dans la phase basse température, moins symétrique, ordonnée.} \end{cases}$$

La nature mathématique du paramètre d'ordre est très diverse : ce peut être un tenseur d'ordre n ou encore un nombre complexe caractérisé par sa norme et sa phase. Le tableau 1.1 suivant présente différents paramètres d'ordres.

Transition	Phase désordonnée	Phase ordonnée	m
Ferroélectrique	Cristal non polaire	Cristal polaire	Polarisation
Magnétisme	Paramagnétique	Ferromagnétique	Aimantation
Magnétisme	Paramagnétique	Antiferromagnétique	Aimantation alternée
BEC	Liquide normal	BEC	$\langle \psi \rangle$

TABLE 1.1 – Paramètres d'ordre associés à différentes transitions de phase.

Le paramètre d'ordre est nul dans la phase de haute température, et devient non nul en dessous de la température critique, ce qui correspond à une « brisure spontanée de symétrie » : le système a perdu certains éléments de symétrie lors de la transition. La classification de Landau repose sur l'évolution du paramètre d'ordre $m(T)$ lors de la transition. Une évolution discontinue correspond à une transition du premier ordre, tandis qu'une évolution continue correspond à une transition du second ordre, comme le montre la figure 1.7.

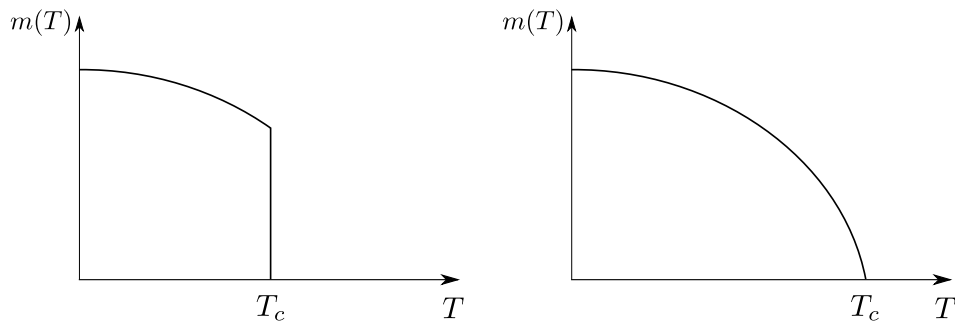


FIGURE 1.7 – Évolution du paramètre d'ordre dans le cas d'une transition de phase du premier ordre (à gauche) et du second ordre (à droite) au sens de Landau.

Dans le cas de transitions de phase du premier ordre, on s'attachera à étudier les discontinuités existantes pour certaines quantités au voisinage de la transition. L'étude des transitions du second ordre est cependant beaucoup plus aisée. En effet, celles-ci présentent des quantités qui divergent au voisinage de la transition et ont un caractère universel. Quelques exemples de ces quantités importantes sont données

par les équations 1.4 (longueur de corrélation), 1.5 (susceptibilité, par exemple magnétique) et 1.6 (capacité calorifique).

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}, \quad (1.4)$$

$$\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}, \quad (1.5)$$

$$C \sim |T - T_c|^{-\alpha}. \quad (1.6)$$

On peut ainsi définir six exposants critiques $(\alpha, \tilde{\beta}, \gamma, \delta, \eta, \nu)$ qui ne sont pas indépendants et sont reliés par des relations d'échelle du type 1.7 :

$$\alpha = 2 - \nu d, \quad (1.7)$$

où d est la dimension du système considéré. De ces lois de divergence découle directement le principe d'universalité : on peut regrouper différentes transitions de phase dans ce qu'on appelle des classes d'universalité, caractérisées par la dimension du système et la symétrie du paramètre d'ordre. Ainsi, à titre d'exemple, tous les systèmes bidimensionnels ayant une symétrie Z_2 présentant une phase brisant cette symétrie seront dans la classe d'universalité d'Ising 2D, et partageront les mêmes propriétés critiques et donc les mêmes exposants. La technique de *finite size scaling* (que nous utiliserons) s'avérera être un outil puissant afin d'étudier ces transitions.

Il n'est toutefois pas toujours possible de définir un paramètre d'ordre, ce qui correspond au fait qu'une symétrie n'est pas forcément brisée lors d'une transition de phase. C'est par exemple le cas de la transition de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) [Berezinskii 1970, Kosterlitz 1973], survenant dans le modèle XY bidimensionnel. On observe juste un changement du comportement qualitatif des fonctions de corrélation : celles-ci décroissent en loi de puissance dans la phase basse température (on parlera de « quasi » ordre à longue portée) puis exponentiellement dans la phase haute température (absence d'ordre à longue portée). L'analyse des fonctions de corrélations peut donc s'avérer indispensable dans l'étude des transitions de phase.

On peut enfin se poser la question de prévoir si une brisure de symétrie peut ou non avoir lieu. Le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg [Hohenberg 1967, Mermin 1966, Mermin 1968] répond à cette interrogation et est basé sur des critères de dimensionnalité et de type de symétrie. Celui-ci stipule qu'à température finie, aucune brisure de symétrie globale et continue (discrète) n'est possible en dimension $d \leq 2$ ($d \leq 1$). L'ordre à longue portée qui est généralement associé à de telles brisures est donc inexistant sous ces conditions.

1.2.2 Transitions de phase quantiques

Depuis maintenant plusieurs années, la grande place qu'a prise la Physique quantique a entraîné un fort intérêt sur une certaine variété de transitions de phase :

les transitions de phases quantiques. Considérons un système dont on abaisse la température à zéro. De ce fait, les fluctuations thermiques disparaissent. Il ne reste que les fluctuations quantiques, provenant du principe d'incertitude de Heisenberg. Ces dernières peuvent elles aussi entraîner des transitions de phases, que l'on appelle transition de phases quantiques. Considérons tout d'abord un Hamiltonien gouvernant un certain système de dimension d de la forme

$$\mathcal{H} = H_1 + gH_2, \quad (1.8)$$

tel que $[H_1, H_2] \neq 0$ et où g est un paramètre sans dimension. C'est ce paramètre g qui va jouer le rôle paramètre induisant la transition et qui contrôle les fluctuations quantiques. Ce peut être la pression, un champ magnétique extérieur, ou une interaction de répulsion entre particules. La non-commutation des deux termes du Hamiltonien entraîne une compétition entre ces derniers, ce qui va engendrer une transition de phase. De la même manière que pour un système classique, un système quantique adoptera l'état qui minimise son énergie libre (qui est égale à son énergie interne vu que $T = 0$).

Ainsi, pour $g \ll 1$, l'état fondamental est gouverné par H_1 , tandis qu'il est gouverné par H_2 pour $g \gg 1$. En modulant g entre ces deux limites, les deux termes du Hamiltonien vont entrer en compétition et, à une certaine valeur critique g_c , cette compétition entre H_1 et H_2 va définir l'état fondamental du système. On observera un croisement de niveaux entre l'état fondamental et le premier état excité où l'énergie devient non analytique : la transition de phase quantique a lieu. Comme le montre la figure 1.8, le croisement de niveaux n'est valable que dans la limite thermodynamique. Dans le cas d'un système fini, on a un anti-croisement, dont le gap diminue quand la taille du système augmente.

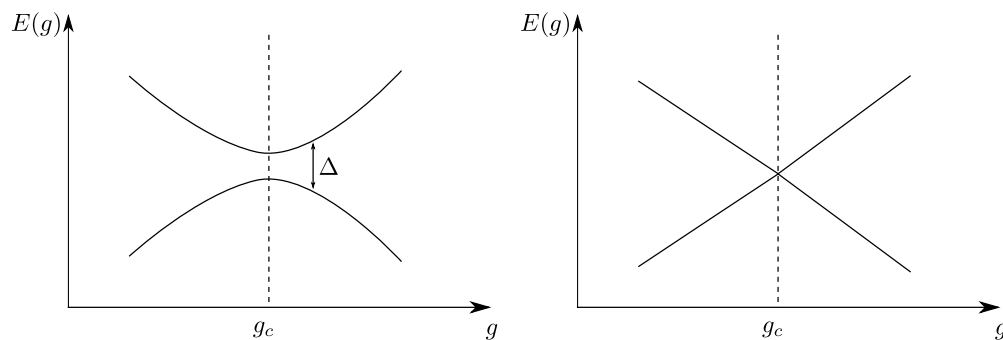


FIGURE 1.8 – Énergie de l'état fondamental et du premier état excité en fonction de g du Hamiltonien \mathcal{H} dans le cas d'un système fini (à gauche) et d'un système dans la limite thermodynamique (à droite). Le système subit une transition de phase à g_c , le gap entre l'état fondamental et le premier état excité diminue au fur et à mesure que la taille du système augmente.

Les concepts présentés dans la sous-section précédente s'appliquent aussi aux transitions de phase quantiques. En effet, il existe une équivalence entre un système quantique de dimension d avec un système classique de dimension $d + 1$ [Sondhi 1997]. Le rôle de cette dimension supplémentaire est jouée par β , l'inverse de la température, aussi appelé temps imaginaire (nous reviendrons sur cette notion dans le chapitre 2). La limite thermodynamique est atteinte dans une limite de température nulle, ce qui correspond à $\beta \rightarrow \infty$.

Cette équivalence nous permet d'introduire une extension du théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg : à température nulle, une brisure spontanée de symétrie continue (discrète) peut survenir dans un système quantique bidimensionnel (unidimensionnel). À titre d'exemple, le modèle de Bose-Hubbard bidimensionnel peut adopter une phase, le condensat de Bose-Einstein, qui brise la symétrie $U(1)$ et qui s'accompagne d'une cohérence de phase à longue portée. Par contre, ce n'est pas le cas du modèle de Bose-Hubbard unidimensionnel. Ici encore, le système peut adopter deux phases : phase de Mott et phase superfluide. La transition entre ces deux phases ne brise aucune symétrie, on ne peut pas définir un paramètre d'ordre, mais un quasi-ordre à longue portée s'établit tout de même dans la phase superfluide. Ce quasi-ordre se caractérisera par une décroissance en loi de puissance des corrélations. Quand le paramètre engendrant la transition est l'interaction entre particules (la densité étant fixée), celle-ci est dans la classe d'universalité de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless [Fisher 1989].

Tout comme un système classique, un système quantique présentera aussi des divergences lorsque $g \rightarrow g_c$. On pourra de plus définir une longueur de corrélation dans la dimension temporelle imaginaire :

$$\xi \sim |g - g_c|^{-\nu}, \quad (1.9)$$

$$\xi_\tau = \xi^z \sim |g - g_c|^{-\nu z}, \quad (1.10)$$

ce qui définit l'exposant critique dynamique z . Celui-ci est généralement différent de l'unité, ce qui signifie que l'évolution des corrélations en temps imaginaire est différente de celle dans les dimensions spatiales. L'équivalence formelle entre système quantique en d dimensions et système classique en $d + 1$ dimension n'est pas forcément évidente. On redéfinit les relations d'échelles telles que

$$\alpha = 2 - \nu(d + z). \quad (1.11)$$

Terminons cette partie en présentant le diagramme de phase typiquement observé au voisinage d'une transition du second ordre, dans le plan (g, T) . Celui-ci est présenté sur la figure 1.9.

À température nulle, on observe les phases ordonnée et désordonnée, séparées par le point critique quantique auquel survient la transition. À température finie, les fluctuations thermiques de l'ordre de kT entrent en compétition avec les fluctuations quantique d'ordre Δ qui correspondent au gap entre état fondamental

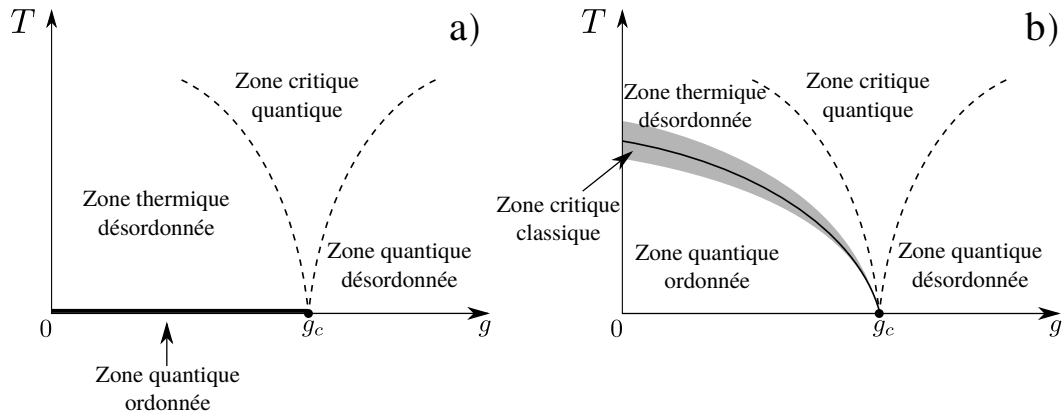


FIGURE 1.9 – Diagramme de phase au voisinage du point critique quantique. L’axe des abscisses est le paramètre g qui contrôle les fluctuations quantiques engendrant la transition de phase quantique, tandis que l’axe des ordonnées est la température. Le point critique quantique se situe en $g = g_c$ et à $T = 0$. a) La phase ordonnée est présente uniquement à température nulle. Les lignes en pointillés représentent des *crossover* qui délimitent la zone quantique critique qui se comportent en $|g - g_c|^{\nu z}$. b) La phase ordonnée existe aussi à température non nulle. La ligne en trait plein représente une transition de phase entre phase ordonnée et désordonnée, dont le comportement critique est décrit par une théorie classique.

et état excité. La phase désordonnée, c’est à dire la phase qui ne brise pas de symétrie, s’étend à température non nulle et est séparée de la zone quantique critique par un *crossover*.

En ce qui concerne la phase ordonnée, on a deux cas de figures. Pour le premier (a), les fluctuations thermiques détruisent immédiatement l’ordre (comme par exemple dans le cas du modèle d’Ising unidimensionnel). Pour le deuxième (b), l’ordre du système persiste même à température non nulle. Autour de la transition de phase classique, le système est gouverné par les fluctuations classiques. Cette zone se rétrécit au fur et à mesure que l’on s’approche du point critique quantique.

Les fluctuations quantiques dominent dans la région où $\Delta > kT$, qu’on appelle région quantique critique, délimitée par des *crossover* qui se comportent en $kT \sim |g - g_c|^{\nu z}$. Cette zone est d’un intérêt particulier pour les expérimentateurs, qui ont accès aux transitions de phases quantiques. À haute température, le système est désordonné et purement classique.

Comme nous allons le voir à partir du chapitre 3, nous nous intéresserons à des modèles de bosons itinérants sur réseau. Ces modèles présenteront des transitions de phase quantiques provenant de la compétition entre terme cinétique (qui tend à délocaliser les particules) et d’interaction sur site (qui tend à les localiser).

1.3 Plan de la thèse

Ce manuscrit présente mes travaux effectués lors de ces trois dernières années, dont le but principal a été d'étudier numériquement les propriétés thermodynamiques de deux modèles bosoniques dérivant du modèle de Bose-Hubbard. En effet, tous deux décrivent des bosons itinérants sur un réseau, couplés sur site à des spins $1/2$ qui eux sont fixes. La thèse est structurée de la manière suivante :

Pour commencer, nous présenterons dans le second chapitre (page 27) les outils numériques et théoriques que nous utiliserons afin d'étudier ces deux modèles. L'approche, essentiellement numérique, sera basée sur un algorithme de Monte-Carlo quantique : l'algorithme des Fonctions de Green Stochastiques (SGF). Cet algorithme, particulièrement lourd et puissant, fournit des résultats numériquement exacts (en dehors des erreurs statistiques), permet par ailleurs d'étudier les corrélations existantes (ou non) au sein du système via le calcul de fonctions de Green à N -corps, et peut être adapté à une très large gamme de Hamiltoniens. Nous utiliserons aussi une approche de champ moyen, qui nous permet d'accéder rapidement à plusieurs grandeurs essentielles. Cette dernière est approximative et se cantonne au calcul d'observables sur site. Bien entendu, nous confronterons ces deux approches.

Le chapitre 3 (page 43) présente l'étude du premier modèle : le modèle de Kondo bosonique sur réseau bidimensionnel, dont les résultats les plus importants sont regroupés dans la référence [Flottat 2015]. C'est en fait un modèle de Bose-Hubbard à deux bandes couplées. La première bande contient des bosons de spin $1/2$, qui sont fixes et dont la densité est fixée à l'unité. La deuxième bande contient elle aussi des bosons de spin $1/2$, qui peuvent se mouvoir. Expérimentalement, ce modèle s'inscrit dans le domaine des atomes ultra-froids sur réseaux optiques.

L'étude du second modèle, le modèle de Rabi sur réseau unidimensionnel, est présenté dans le quatrième chapitre (page 95). Celui-ci décrit un réseau de cavité, chacune étant décrite par le modèle de Rabi : un mode d'un champ bosonique (typiquement électromagnétique) couplé à un système à deux niveaux, analogue à un spin $1/2$. Les cavités sont ensuite couplées et les bosons peuvent se mouvoir le long de ce réseau. À l'inverse du chapitre 3, ce modèle décrit des dispositifs que l'on retrouve dans des expériences d'électrodynamique quantique en cavité.

Pour finir, nous résumons dans l'ultime chapitre (page 143) les différents résultats obtenus, et présentons certaines perspectives. En effet, nos travaux en cours portent sur un modèle de Bose-Hubbard où on ne considère aucun degré de liberté de spin, mais où on est en présence d'interactions à longue portée. Ce modèle dérive directement du modèle de Dicke, un autre modèle d'interaction lumière/matière. Son étude s'inscrit donc directement comme une suite de celle du chapitre 4.

Bibliographie

- [Abo-Shaeer 2001] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels et W. Ketterle. *Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates*. Science, vol. 292, no. 5516, pages 476–479, 2001. (Cit  en page 3.)
- [Adams 2012] Allan Adams, Lincoln D Carr, Thomas Sch fer, Peter Steinberg et John E Thomas. *Strongly correlated quantum fluids: ultracold quantum gases, quantum chromodynamic plasmas and holographic duality*. New Journal of Physics, vol. 14, no. 11, page 115009, 2012. (Cit  en page 2.)
- [Allen 1938] J. F. Allen et A. D. Misener. *Flow of Liquid Helium II*. Nature, vol. 141, pages 75–75, Jan 1938. (Cit  en page 3.)
- [Anappara 2009] Aji A. Anappara, Simone De Liberato, Alessandro Tredicucci, Cristiano Ciuti, Giorgio Biasiol, Lucia Sorba et Fabio Beltram. *Signatures of the ultrastrong light-matter coupling regime*. Phys. Rev. B, vol. 79, page 201303, May 2009. (Cit  en pages 10 et 145.)
- [Anderson 1995] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman et E. A. Cornell. *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*. Science, vol. 269, no. 5221, pages 198–201, 1995. (Cit  en page 3.)
- [Andrews 1997] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H.-J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn et W. Ketterle. *Observation of Interference Between Two Bose Condensates*. Science, vol. 275, no. 5300, pages 637–641, 1997. (Cit  en page 3.)
- [Angelakis 2004] D. G. Angelakis, P.L. Knight et E. Paspalakis. *Photonic crystals and inhibition of spontaneous emission: an introduction*. Contemporary Physics, vol. 45, no. 4, pages 303–318, 2004. (Cit  en page 9.)
- [Angelakis 2007] Dimitris G. Angelakis, Marcelo Franca Santos et Sougato Bose. *Photon-blockade-induced Mott transitions and XY spin models in coupled cavity arrays*. Phys. Rev. A, vol. 76, page 031805, Sep 2007. (Cit  en page 8.)
- [Armani 2003] D. K. Armani, T. J. Kippenberg, S. M. Spillane et K. J. Vahala. *Ultra-high-Q toroid microcavity on a chip*. Nature, vol. 421, pages 925–928, Feb 2003. (Cit  en pages 9 et 10.)
- [Baibich 1988] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich et J. Chazelas. *Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices*. Phys. Rev. Lett., vol. 61, pages 2472–2475, Nov 1988. (Cit  en page 4.)
- [Bardeen 1957] J. Bardeen, L. N. Cooper et J. R. Schrieffer. *Theory of Superconductivity*. Phys. Rev., vol. 108, pages 1175–1204, Dec 1957. (Cit  en page 2.)
- [Berezinskii 1970] V. L. Berezinskii. *Destruction of Long-range Order in One-dimensional and Two-dimensional Systems having a Continuous Symmetry*

- Group II. Classical Systems.* JETP, vol. 32, page 493, Mar 1970. (Cit  en page 14.)
- [Bhattacharya 2014] Pallab Bhattacharya, Thomas Frost, Saniya Deshpande, Md Zunaid Baten, Arnab Hazari et Ayan Das. *Room Temperature Electrically Injected Polariton Laser.* Phys. Rev. Lett., vol. 112, page 236802, Jun 2014. (Cit  en page 4.)
- [Binasch 1989] G. Binasch, P. Gr nberg, F. Saurenbach et W. Zinn. *Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange.* Phys. Rev. B, vol. 39, pages 4828–4830, Mar 1989. (Cit  en page 4.)
- [Birnbaum 2005] K. M. Birnbaum, A. Boca, R. Miller, A. D. Boozer, T. E. Northup et H. J. Kimble. *Photon blockade in an optical cavity with one trapped atom.* Nature, vol. 436, pages 87–90, Jul 2005. (Cit  en pages 11 et 99.)
- [Blais 2004] Alexandre Blais, Ren-Shou Huang, Andreas Wallraff, S. M. Girvin et R. J. Schoelkopf. *Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation.* Phys. Rev. A, vol. 69, page 062320, Jun 2004. (Cit  en pages 9 et 96.)
- [Bloch 2005] Immanuel Bloch. *Ultracold quantum gases in optical lattices.* Nat Phys, vol. 1, pages 23–30, Oct 2005. (Cit  en page 6.)
- [Bose 1924] S. N. Bose. *Planck’s Law and Light Quantum Hypothesis.* Z. Phys, page 178, 1924. (Cit  en page 2.)
- [Capogrosso-Sansone 2007] B. Capogrosso-Sansone, N. V. Prokof’ev et B. V. Svistunov. *Phase diagram and thermodynamics of the three-dimensional Bose-Hubbard model.* Phys. Rev. B, vol. 75, page 134302, Apr 2007. (Cit  en page 7.)
- [Casanova 2010] J. Casanova, G. Romero, I. Lizuain, J. J. Garc a-Ripoll et E. Solano. *Deep Strong Coupling Regime of the Jaynes-Cummings Model.* Phys. Rev. Lett., vol. 105, page 263603, Dec 2010. (Cit  en pages 9 et 138.)
- [Colombe 2007] Yves Colombe, Tilo Steinmetz, Guilhem Dubois, Felix Linke, David Hunger et Jakob Reichel. *Strong atom-field coupling for Bose-Einstein condensates in an optical cavity on a chip.* Nature, vol. 450, pages 272–276, Nov 2007. (Cit  en page 9.)
- [Courteille 1998] Ph. Courteille, R. S. Freeland, D. J. Heinzen, F. A. van Abeelen et B. J. Verhaar. *Observation of a Feshbach Resonance in Cold Atom Scattering.* Phys. Rev. Lett., vol. 81, pages 69–72, Jul 1998. (Cit  en page 5.)
- [Dalvit 2011] Diego A. R. Dalvit, Paulo A. Maia Neto et Francisco Diego Mazzitelli. *Fluctuations, Dissipation and the Dynamical Casimir Effect,* pages 419–457. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2011. (Cit  en page 9.)
- [Davis 1995] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn et W. Ketterle. *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms.* Phys. Rev. Lett., vol. 75, pages 3969–3973, Nov 1995. (Cit  en page 3.)

- [de Forges de Parny 2011] L. de Forges de Parny, F. Hébert, V. G. Rousseau, R. T. Scalettar et G. G. Batrouni. *Ground-state phase diagram of spin- $\frac{1}{2}$ bosons in a two-dimensional optical lattice*. Phys. Rev. B, vol. 84, page 064529, Aug 2011. (Cité en pages 7 et 70.)
- [de Forges de Parny 2013] L. de Forges de Parny, F. Hébert, V. G. Rousseau et G. G. Batrouni. *Interacting spin-1 bosons in a two-dimensional optical lattice*. Phys. Rev. B, vol. 88, page 104509, Sep 2013. (Cité en page 7.)
- [De Liberato 2014] Simone De Liberato. *Light-Matter Decoupling in the Deep Strong Coupling Regime: The Breakdown of the Purcell Effect*. Phys. Rev. Lett., vol. 112, page 016401, Jan 2014. (Cité en pages 9 et 138.)
- [Deng 2003] Hui Deng, Gregor Weihs, David Snoke, Jacqueline Bloch et Yoshihisa Yamamoto. *Polariton lasing vs. photon lasing in a semiconductor microcavity*. Proceedings of the National Academy of Sciences, vol. 100, no. 26, pages 15318–15323, 2003. (Cité en page 4.)
- [Dürr 2000] S. Dürr. <http://www.mpg.de/4938528/bec>, 2000. (Cité en page 3.)
- [Einstein 1925] A. Einstein. *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases*. Sitzungsber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss., 1925. (Cité en page 2.)
- [Fedorov 2010] A. Fedorov, A. K. Feofanov, P. Macha, P. Forn-Díaz, C. J. P. M. Harmans et J. E. Mooij. *Strong Coupling of a Quantum Oscillator to a Flux Qubit at Its Symmetry Point*. Phys. Rev. Lett., vol. 105, page 060503, Aug 2010. (Cité en pages 10, 98 et 145.)
- [Feynman 1982] Richard P. Feynman. *Simulating physics with computers*. International Journal of Theoretical Physics, vol. 21, no. 6, pages 467–488, 1982. (Cité en page 4.)
- [Fisher 1989] Matthew P. A. Fisher, Peter B. Weichman, G. Grinstein et Daniel S. Fisher. *Boson localization and the superfluid-insulator transition*. Phys. Rev. B, vol. 40, pages 546–570, Jul 1989. (Cité en pages 6, 16, 51 et 56.)
- [Flottat 2015] T. Flottat, F. Hébert, V. G. Rousseau, R. T. Scalettar et G. G. Batrouni. *Bosonic Kondo-Hubbard model*. Phys. Rev. B, vol. 92, page 035101, Jul 2015. (Cité en pages 18 et 57.)
- [Flurin 2015] E. Flurin, N. Roch, J. D. Pillet, F. Mallet et B. Huard. *Superconducting Quantum Node for Entanglement and Storage of Microwave Radiation*. Phys. Rev. Lett., vol. 114, page 090503, Mar 2015. (Cité en page 4.)
- [García-Ripoll 2015] J. J. García-Ripoll, B. Peropadre et S. De Liberato. *Light-matter decoupling and A^2 term detection in superconducting circuits*. Scientific Reports, vol. 5, page 16055, Nov 2015. (Cité en page 11.)
- [Greentree 2006] Andrew D. Greentree, Charles Tahan, Jared H. Cole et Lloyd C. L. Hollenberg. *Quantum phase transitions of light*. Nat Phys, vol. 2, pages 856–861, Dec 2006. (Cité en page 8.)
- [Greiner 2002] Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W. Hansch et Immanuel Bloch. *Quantum phase transition from a superfluid*

- to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms.* Nature, vol. 415, pages 39–44, Jan 2002. (Cité en pages 6 et 7.)
- [Greiner 2003] Markus Greiner. *Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials.* PhD thesis, April 2003. (Cité en page 5.)
- [Hartmann 2006] Michael J. Hartmann, Fernando G. S. L. Brandao et Martin B. Plenio. *Strongly interacting polaritons in coupled arrays of cavities.* Nat Phys, vol. 2, pages 849–855, Dec 2006. (Cité en pages 8 et 99.)
- [Hohenberg 1967] P. C. Hohenberg. *Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions.* Phys. Rev., vol. 158, pages 383–386, Jun 1967. (Cité en pages 14, 86 et 114.)
- [Hopfield 1958] J. J. Hopfield. *Theory of the Contribution of Excitons to the Complex Dielectric Constant of Crystals.* Phys. Rev., vol. 112, pages 1555–1567, Dec 1958. (Cité en page 8.)
- [Hubbard 1963] J. Hubbard. *Electron Correlations in Narrow Energy Bands.* Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, vol. 276, no. 1365, pages 238–257, 1963. (Cité en pages 6 et 50.)
- [Inouye 1998] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn et W. Ketterle. *Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate.* Nature, vol. 392, pages 151–154, Mar 1998. (Cité en page 5.)
- [Jaksch 1998] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner et P. Zoller. *Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices.* Phys. Rev. Lett., vol. 81, pages 3108–3111, Oct 1998. (Cité en page 6.)
- [Jaynes 1963] E. T. Jaynes et F. W. Cummings. *Comparison of quantum and semi-classical radiation theories with application to the beam maser.* Proceedings of the IEEE, vol. 51, no. 1, pages 89–109, Jan 1963. (Cité en pages 8 et 97.)
- [José García-Ripoll 2003] Juan José García-Ripoll et Juan Ignacio Cirac. *Quantum computation with cold bosonic atoms in an optical lattice.* Philosophical Transactions of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, vol. 361, no. 1808, pages 1537–1548, 2003. (Cité en page 4.)
- [Kapitza 1938] P. Kapitza. *Viscosity of Liquid Helium below the λ -Point.* Nature, vol. 141, pages 74–74, Jan 1938. (Cité en page 3.)
- [Kawaguchi 2012] Yuki Kawaguchi et Masahito Ueda. *Spinor Bose-Einstein condensates.* Physics Reports, vol. 520, no. 5, pages 253 – 381, 2012. Spinor Bose-Einstein condensates. (Cité en page 3.)
- [Kosterlitz 1973] J. M. Kosterlitz et D. J. Thouless. *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems.* Journal of Physics C : Solid State Physics, vol. 6, no. 7, page 1181, 1973. (Cité en page 14.)
- [London 1938] F. London. *On the Bose-Einstein Condensation.* Phys. Rev., vol. 54, pages 947–954, Dec 1938. (Cité en page 2.)

- [Madison 2000] K. W. Madison, F. Chevy, W. Wohlleben et J. Dalibard. *Vortex Formation in a Stirred Bose-Einstein Condensate*. Phys. Rev. Lett., vol. 84, pages 806–809, Jan 2000. (Cit  en page 3.)
- [Maissen 2014] Curdin Maissen, Giacomo Scalari, Federico Valmorra, Mattias Beck, J r me Faist, Sara Cibella, Roberto Leoni, Christian Reichl, Christophe Charpentier et Werner Wegscheider. *Ultrastrong coupling in the near field of complementary split-ring resonators*. Phys. Rev. B, vol. 90, page 205309, Nov 2014. (Cit  en page 10.)
- [Matthews 1999] M. R. Matthews, B. P. Anderson, P. C. Haljan, D. S. Hall, C. E. Wieman et E. A. Cornell. *Vortices in a Bose-Einstein Condensate*. Phys. Rev. Lett., vol. 83, pages 2498–2501, Sep 1999. (Cit  en page 3.)
- [Mermin 1966] N. D. Mermin et H. Wagner. *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*. Phys. Rev. Lett., vol. 17, pages 1133–1136, Nov 1966. (Cit  en pages 14, 86 et 114.)
- [Mermin 1968] N. D. Mermin. *Crystalline Order in Two Dimensions*. Phys. Rev., vol. 176, pages 250–254, Dec 1968. (Cit  en pages 14, 86 et 114.)
- [Niemczyk 2010] T. Niemczyk, F. Deppe, H. Huebl, E. P. Menzel, F. Hocke, M. J. Schwarz, J. J. Garcia-Ripoll, D. Zueco, T. Hummer, E. Solano, A. Marx et R. Gross. *Circuit quantum electrodynamics in the ultrastrong-coupling regime*. Nat Phys, vol. 6, pages 772–776, Oct 2010. (Cit  en pages 10, 98 et 145.)
- [Purcell 1946] E. M. Purcell. *Spontaneous emission probabilities at radio frequencies*. Physical Review, vol. 69, pages 681+, 1946. (Cit  en page 8.)
- [Rabi 1936] I. I. Rabi. *On the Process of Space Quantization*. Phys. Rev., vol. 49, pages 324–328, Feb 1936. (Cit  en pages 9 et 96.)
- [Rabi 1937] I. I. Rabi. *Space Quantization in a Gyrating Magnetic Field*. Phys. Rev., vol. 51, pages 652–654, Apr 1937. (Cit  en pages 9 et 96.)
- [Raimond 2001] J. M. Raimond, M. Brune et S. Haroche. *Manipulating quantum entanglement with atoms and photons in a cavity*. Rev. Mod. Phys., vol. 73, pages 565–582, Aug 2001. (Cit  en page 9.)
- [Reithmaier 2011] J. P. Reithmaier, G. Sek, A. Loffler, C. Hofmann, S. Kuhn, S. Reitzenstein, L. V. Keldysh, V. D. Kulakovskii, T. L. Reinecke et A. Forchel. *Strong coupling in a single quantum dot-semiconductor microcavity system*. Nature, vol. 432, pages 197–200, Nov 2011. (Cit  en page 9.)
- [Sadler 2006] L. E. Sadler, J. M. Higbie, S. R. Leslie, M. Vengalattore et D. M. Stamper-Kurn. *Spontaneous symmetry breaking in a quenched ferromagnetic spinor Bose-Einstein condensate*. Nature, vol. 443, pages 312–315, Sep 2006. (Cit  en page 7.)
- [Schir  2012] M. Schir , M. Bordyuh, B.  ztop et H. E. T reci. *Phase Transition of Light in Cavity QED Lattices*. Phys. Rev. Lett., vol. 109, page 053601, Aug 2012. (Cit  en pages 9, 100 et 138.)

- [Schmitt 2015] Julian Schmitt, Tobias Damm, David Dung, Frank Vewinger, Jan Klaers et Martin Weitz. *Thermalization kinetics of light: From laser dynamics to equilibrium condensation of photons*. Phys. Rev. A, vol. 92, page 011602, Jul 2015. (Cité en page 3.)
- [Schneidman 2006] Elad Schneidman, Michael J. Berry, Ronen Segev et William Bialek. *Weak pairwise correlations imply strongly correlated network states in a neural population*. Nature, vol. 440, pages 1007–1012, Apr 2006. (Cité en page 2.)
- [Schoelkopf 2008] R. J. Schoelkopf et S. M. Girvin. *Wiring up quantum systems*. Nature, vol. 451, pages 664–669, Feb 2008. (Cité en page 9.)
- [Shin 2008] Yong-il Shin, André Schirotzek, Christian H. Schunck et Wolfgang Ketterle. *Realization of a Strongly Interacting Bose-Fermi Mixture from a Two-Component Fermi Gas*. Phys. Rev. Lett., vol. 101, page 070404, Aug 2008. (Cité en page 3.)
- [Sondhi 1997] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini et D. Shahar. *Continuous quantum phase transitions*. Rev. Mod. Phys., vol. 69, pages 315–333, Jan 1997. (Cité en pages 16 et 34.)
- [Thalhammer 2005] Gregor Thalhammer, Matthias Theis, Klaus Winkler, Rudolf Grimm et Johannes Hecker Denschlag. *Inducing an optical Feshbach resonance via stimulated Raman coupling*. Phys. Rev. A, vol. 71, page 033403, Mar 2005. (Cité en page 7.)
- [Theis 2004] M. Theis, G. Thalhammer, K. Winkler, M. Hellwig, G. Ruff, R. Grimm et J. Hecker Denschlag. *Tuning the Scattering Length with an Optically Induced Feshbach Resonance*. Phys. Rev. Lett., vol. 93, page 123001, Sep 2004. (Cité en page 7.)
- [Thompson 1992] R. J. Thompson, G. Rempe et H. J. Kimble. *Observation of normal-mode splitting for an atom in an optical cavity*. Phys. Rev. Lett., vol. 68, pages 1132–1135, Feb 1992. (Cité en page 9.)
- [Tiesinga 1993] E. Tiesinga, B. J. Verhaar et H. T. C. Stoof. *Threshold and resonance phenomena in ultracold ground-state collisions*. Phys. Rev. A, vol. 47, pages 4114–4122, May 1993. (Cité en page 5.)
- [Todorov 2010] Y. Todorov, A. M. Andrews, R. Colombelli, S. De Liberato, C. Ciuti, P. Klang, G. Strasser et C. Sirtori. *Ultrastrong Light-Matter Coupling Regime with Polariton Dots*. Phys. Rev. Lett., vol. 105, page 196402, Nov 2010. (Cité en pages 10 et 145.)
- [Wallraff 2004] A. Wallraff, D. I. Schuster, A. Blais, L. Frunzio, R.-S. Huang, J. Majer, S. Kumar, S. M. Girvin et R. J. Schoelkopf. *Strong coupling of a single photon to a superconducting qubit using circuit quantum electrodynamics*. Nature, vol. 431, pages 162–167, Sep 2004. (Cité en pages 9 et 10.)
- [Zhou 2015] Zong-Quan Zhou, Yi-Lin Hua, Xiao Liu, Geng Chen, Jin-Shi Xu, Yong-Jian Han, Chuan-Feng Li et Guang-Can Guo. *Quantum Storage of Three-*

Dimensional Orbital-Angular-Momentum Entanglement in a Crystal. Phys. Rev. Lett., vol. 115, page 070502, Aug 2015. (Cité en page 4.)

Outils numériques et théoriques

Sommaire

2.1	Contexte	28
2.2	Théorie du champ moyen	28
2.3	Méthode de Monte-Carlo quantique	31
2.3.1	Idée générale de la méthode « classique »	32
2.3.2	Méthode quantique et formulation en intégrale de chemin	33
2.3.3	Algorithme des Fonctions de Green Stochastiques	36
	Bibliographie	40

2.1 Contexte

L'étude des systèmes fortement corrélés que nous avons présentés dans le précédent chapitre se révèle souvent compliquée : les protocoles expérimentaux demandent un investissement en terme de temps et d'argent considérable et, théoriquement, les résultats exacts sont peu nombreux et l'analyse requiert souvent des approximations, comme par exemple la théorie de champ moyen que nous développons dans la section 2.2 (page 28). Dans ces circonstances, une approche numérique, traitant le problème de manière exacte, s'avère judicieuse. Les deux dernières décennies ont vu d'énormes progrès en terme de développement d'algorithmes pour la simulation des systèmes fortement corrélés et il en existe désormais une multitude, qui seront plus ou moins adaptés au système étudié :

- *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG), particulièrement adaptée aux systèmes unidimensionnels [White 1992b, White 1992a, White 1993, Schollwöck 2005, De Chiara 2008].
- Diagonalisation exacte, comme par exemple l'algorithme de Lanczos. On est toutefois restreint à de petits systèmes.
- Famille des algorithmes de Monte-Carlo quantique, dont nous présentons une variété dans la section 2.3 (page 31).

Les Hamiltoniens auxquels nous serons confrontés, dans ce contexte de bosons couplés à des spins, seront toujours de la forme suivante :

$$\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V}, \quad (2.1)$$

où le premier terme de l'équation 2.1 contient les termes cinétiques et/ou non diagonaux, tandis que le second terme contient la partie diagonale des interactions sur site entre bosons et/ou des bosons avec les spins. Le terme cinétique est quant à lui donné par :

$$\mathcal{T}_c = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left(a_i^\dagger a_j + \text{h.c.} \right), \quad (2.2)$$

et correspond à celui du modèle de Bose-Hubbard, pour des bosons sans spins. Nous reviendrons plus en détail sur ce modèle dans le chapitre suivant ; pour l'instant, retenons juste que le terme cinétique décrit le déplacement des bosons sur le réseau entre sites i et j plus proches voisins, qui se fait par effet tunnel.

2.2 Théorie du champ moyen

Afin de simplifier le problème difficilement soluble de systèmes à N -corps en interaction, on peut procéder à une approximation, décrite dans la théorie de champ moyen. L'idée est que l'on peut moyenner les corrélations existantes au sein du système : les effets ressentis par une particule du fait de son interaction avec toutes les autres sont inclus dans un(e) champ (densité) moyen(ne). Cette approximation,

qui peut paraître grossière, réduit le problème à N -corps à un problème effectif à une particule. L'espace des états est fortement réduit, le Hamiltonien de champ moyen obtenu est donc facilement diagonalisable (par exemple par un algorithme de diagonalisation exacte) ce qui nous permet d'obtenir rapidement des informations essentielles sur le système. L'idée de cette théorie est représentée sur la figure 2.1 suivante.

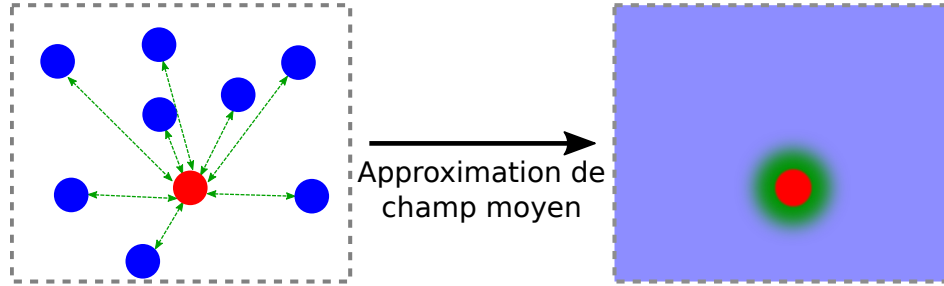


FIGURE 2.1 – À gauche, on a un système physique réel, où l'on considère l'effet de toutes les particules (en bleu) sur une particule (en rouge) par le biais d'interactions arbitraires (modélisées en vert). À droite, la particule rouge ressent l'effet moyen provenant de la densité moyenne des particules bleues.

Cependant, cette théorie présente de nombreux inconvénients : peu quantitative, elle fournit souvent de mauvais exposants critiques, ce qui ne permet pas d'étudier précisément les transitions de phase du second ordre qui peuvent survenir dans de tels systèmes. Surtout, cette approximation ne permet pas d'étudier de manière précise les corrélations existantes au sein du système. En effet, celles-ci deviennent « binaires » et seront de portée soit infinie, soit nulle.

Dans le cadre de notre étude, où l'on considère des particules évoluant sur un réseau, l'approximation consiste à découpler les termes cinétiques [van Oosten 2001] : on fait une approximation sur les couplages par effet tunnel, décrits par \mathcal{T} dans l'équation 2.2. Le Hamiltonien à N -corps est réduit à une somme de Hamiltoniens à un seul site, chaque site interagissant avec la moyenne de la densité (la densité superfluide dans notre cas).

Le point de départ est de réécrire les opérateurs d'échelle tels qu'ils fluctuent autour de leur valeur moyenne :

$$a_i = \langle a_i \rangle + \delta_i, \quad (2.3)$$

$$a_i^\dagger = \langle a_i^\dagger \rangle + \delta_i^\dagger, \quad (2.4)$$

avec

$$\langle a_i \rangle = \langle a_i^\dagger \rangle^* = \psi_i, \quad \delta_i = a_i - \psi_i, \quad \delta_i^\dagger = a_i^\dagger - \psi_i^*. \quad (2.5)$$

On considère que le système est invariant par translation, donc $\psi_i = \psi_j = \psi$, que l'on supposera réel du fait de l'invariance par rotation de phase de la partie cinétique \mathcal{T} . Donc on a $\sum_{\langle ij \rangle} \psi = z\psi$, avec z le nombre de plus proches voisins (qui vaut $2d$ dans le cas d'un réseau hypercubique de dimension d). Comme nous allons le voir, la quantité ψ , qui est le paramètre d'ordre condensé, nous renseignera sur la phase adoptée par le système.

Sous cette forme, $a_i^\dagger a_j$ se réécrit :

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_j &= (\psi + \delta_i^\dagger)(\psi + \delta_j) \\ &= \psi^2 + \delta_i^\dagger \psi + \psi \delta_j + \delta_j \delta_i^\dagger. \end{aligned} \quad (2.6)$$

La théorie de champ moyen consiste à négliger les fluctuations quadratiques $\delta_j \delta_i^\dagger$:

$$\begin{aligned} a_i^\dagger a_j &\simeq \psi^2 + (a_i^\dagger - \psi)\psi + \psi(a_j - \psi) \\ &\simeq \psi(a_i^\dagger + a_j) - \psi^2. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Enfin, on remplace 2.7 dans l'équation 2.2, et la partie cinétique du Hamiltonien devient :

$$\mathcal{T}_c^{CM} = -zt(\psi(a^\dagger + a) - \psi^2). \quad (2.8)$$

Le problème à N -corps est réduit à un problème sur site décrit par les équations auto-cohérentes :

$$\mathcal{H}^{CM} |\phi\rangle = E |\phi\rangle, \quad (2.9)$$

$$\psi = \langle \phi | a | \phi \rangle, \quad (2.10)$$

avec

$$\mathcal{H}^{CM} = -zt(\psi(a^\dagger + a) - \psi^2) + \mathcal{T}_{nd} + \mathcal{V}, \quad (2.11)$$

\mathcal{T}_{nd} contenant les termes non diagonaux des interactions.

Naturellement, dans ce contexte de particules bosoniques, on s'attend à ce que les systèmes que nous étudierons puissent adopter une phase de condensat de Bose-Einstein. Dans l'approche de Bogoliubov de la condensation de Bose-Einstein, on définit la fraction condensée :

$$\rho_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} = \frac{\langle n_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} \rangle}{N}, \quad (2.12)$$

avec $n_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}$ le nombre de particule dans le mode $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, et N le nombre total de particules. La fraction condensée vaut naturellement 1 quand toutes les particules sont condensées, et on a :

$$\langle a_i^\dagger a_j \rangle \xrightarrow{|i-j| \rightarrow \infty} \rho_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}, \quad (2.13)$$

$$\langle a_i^\dagger a_j \rangle \sim \langle a_i^\dagger \rangle \langle a_j \rangle = \psi^2. \quad (2.14)$$

Ainsi, ψ correspond au paramètre d'ordre du système, et on déduit de sa valeur la phase adoptée par le système : si $\psi = 0$, le système est dans une phase incohérente, et donc non condensée, tandis que si $\psi \neq 0$, le système est dans sa phase condensée. Concrètement, pour un jeu de paramètre donné, on s'attachera à trouver la valeur de ψ qui minimise l'énergie libre (soit l'énergie interne à température nulle), afin d'obtenir et d'étudier l'état d'équilibre du système. Cette technique étant variationnelle, le minimum de l'énergie correspond à une solution auto-cohérente des équations 2.11 et 2.10. On suivra le cheminement suivant :

1. on structure la matrice $\mathcal{H}^{CM}(\psi)$ pour un ψ choisi aléatoirement,
2. on la diagonalise numériquement, afin de trouver le vecteur propre $|\phi\rangle$ correspondant à l'état fondamental d'énergie E ,
3. on recalcule ψ tel que $\psi = \langle \phi | a | \phi \rangle$,
4. on réitère l'étape précédente jusqu'à convergence.

Cependant, cette approche peut être problématique dans le cas de transitions du premier ordre où le système exhibe des métastabilités et donc des minimums locaux. Dans ce cas, cette méthode d'auto-cohérence peut s'avérer inefficace si l'on reste piégé dans un minimum local qui n'est pas le minimum global. Pour palier à ce problème, nous ferons un balayage dans un large intervalle de valeurs de ψ , afin de trouver le minimum global. Ensuite, on pourra s'assurer de la bonne valeur de ψ en reprenant la méthode d'auto-cohérence précédente.

2.3 Méthode de Monte-Carlo quantique

Nous venons de voir une méthode approximative qui néglige les fluctuations quantiques. La méthode de Monte-Carlo quantique vient palier à ce problème et prend en compte ces fluctuations. En revanche, le développement d'un tel algorithme demande du temps, et les temps de simulations sont plus élevés¹. Il existe une multitude d'algorithmes sous la dénomination de Monte-Carlo quantique, ceux-ci visant systématiquement à reconstruire l'état d'équilibre du système en échantillonnant l'espace des configurations selon un processus stochastique. Ils sont regroupés dans plusieurs « familles » qui seront adaptées à la description de certaines variétés de systèmes : nature des particules étudiées (fermions, bosons) ; nature discrète ou continue du système, étude à $T = 0$ ou $T \neq 0$ et cætera.

Après avoir rappelé la méthode pour des systèmes classiques, ainsi que l'équivalent pour des systèmes quantiques, nous présenterons l'algorithme des Fonctions de Green Stochastiques (SGF), que nous utiliserons pour simuler tous les systèmes étudiés dans cette thèse.

1. De 15 jours au maximum dans nos différentes études

2.3.1 Idée générale de la méthode « classique »

La méthode de Monte-Carlo permet d'estimer la moyenne de certaines observables A , qui s'écrivent, dans un système à l'équilibre thermique :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^N A_i e^{-\beta E_i}, \text{ avec } Z = \sum_{i=1}^N e^{-\beta E_i}, \quad (2.15)$$

N représente le nombre de configurations possibles du système, $\beta = 1/kT$ avec k constante de Boltzmann, E_i l'énergie de la configuration considérée, et Z la fonction de partition du système. Le problème est que le nombre de configurations du système est important et que la fonction de partition est difficilement calculable. On s'attachera à réduire ce nombre de configurations, en choisissant un sous-ensemble contenant M configurations, tel que $M < N$, afin d'échantillonner Z . Nous revenons ici sur le célèbre algorithme de Metropolis [Metropolis 1953], basé sur la construction d'une chaîne de Markov représentée sur la figure 2.2.

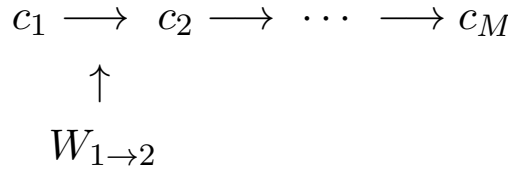


FIGURE 2.2 – Représentation une chaîne de Markov : on part d'une configuration c_1 choisie aléatoirement, et on se déplace de configuration en configuration avec la probabilité $W_{i \rightarrow j}$.

Les M états seront tirés selon les probabilités p_i , où p_i est donnée par le poids de Boltzmann $e^{-\beta E_i}$ par :

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}. \quad (2.16)$$

La valeur moyenne de A se réécrit :

$$\langle A \rangle \sim \bar{A} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_i, \text{ et } \Delta A \sim \sqrt{\frac{A^2 - \bar{A}^2}{M}}, \quad (2.17)$$

A_i est la valeur de A dans la $i^{\text{ème}}$ configuration, et ΔA l'erreur statistique sur $\langle A \rangle$. Les probabilités de transition $W_{i \rightarrow j}$ doivent vérifier les deux conditions suivantes :

- Principe d'ergodicité,
- Bilan détaillé : $W_{i \rightarrow j} p_i = W_{j \rightarrow i} p_j$.

Le bilan détaillé peut se réécrire :

$$\frac{W_{i \rightarrow j}}{W_{j \rightarrow i}} = \frac{p_i}{p_j} = \exp(-\beta(E_j - E_i)) \quad (2.18)$$

La solution de cette équation, fournie par Metropolis [Metropolis 1953], est :

$$W_{i \rightarrow j} = \exp(-\beta(E_j - E_i)) \text{ si } E_j > E_i, \quad (2.19)$$

$$= 1 \text{ sinon.} \quad (2.20)$$

Ainsi, la méthode de Monte-Carlo avec l'algorithme de Metropolis suivra ce chemin :

1. on part d'un état initial aléatoire 1.
2. on considère l'état suivant 2 obtenu par une modification aléatoire de 1 dont on calcule l'énergie.
3. on calcule $\Delta E = E_2 - E_1$.
4. si $\Delta E < 0$, on passe à 2, sinon on passe à 2 avec la probabilité $\exp(-\beta\Delta E)$.

On réitérera ces différentes étapes, dans l'étape de thermalisation, jusqu'à ce que l'on atteigne l'équilibre thermique. Ensuite, durant l'étape dite de mesure, on effectuera une statistique des différentes observables d'intérêt autour de l'équilibre.

2.3.2 Méthode quantique et formulation en intégrale de chemin

L'appellation « quantique » pour la méthode de Monte-Carlo signifie simplement qu'on applique la méthode de Monte-Carlo vue dans le paragraphe précédent à un système quantique. La différence majeure est que la fonction de partition est ici la trace de l'exponentielle d'un opérateur, définie par :

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_{\{\psi\}} \langle \psi | e^{-\beta\mathcal{H}} | \psi \rangle \quad (2.21)$$

où $\{\psi\}$ correspond à une base de l'espace des états. La première étape va être d'exprimer la fonction de partition comme une somme de nombre et de calculer les différents éléments de matrice $\langle \psi | e^{-\beta\mathcal{H}} | \psi \rangle$. Pour cela, il existe de nombreuses approches, chacune aboutissant à une certaine famille d'algorithmes plus ou moins efficaces en fonction du problème étudié. Dans ce qui suit, nous procéderons à une formulation de la fonction de partition en intégrales de chemin. En effet, cette approche est très intuitive et est tout à fait adaptée aux problèmes auxquels nous serons confrontés : particules bosoniques évoluant sur réseau. Introduisons maintenant un pas de température en réécrivant β tel que $\beta = \delta_\tau N$ avec $\delta_\tau \ll 1$. On peut donc décomposer $e^{-\beta\mathcal{H}}$ en un produit de N exponentielles :

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{\psi\}} \langle \psi | e^{-\delta_\tau\mathcal{H}} e^{-\delta_\tau\mathcal{H}} \dots e^{-\delta_\tau\mathcal{H}} | \psi \rangle \quad (2.22)$$

En insérant entre chaque exponentielle l'opérateur unité $\sum_{\psi} |\psi\rangle \langle\psi| = 1$, la fonction de partition se réécrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & \sum_{\{\psi_{\tau}\}} \langle\psi_0| e^{-\delta_{\tau}\mathcal{H}} |\psi_{N-1}\rangle \langle\psi_{N-1}| e^{-\delta_{\tau}\mathcal{H}} |\psi_{N-2}\rangle \\ & \times \langle\psi_{N-2}| \dots |\psi_1\rangle \langle\psi_1| e^{-\delta_{\tau}\mathcal{H}} |\psi_0\rangle. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Chaque élément de matrice $\langle\psi_{i+1}| e^{-\delta_{\tau}\mathcal{H}} |\psi_i\rangle$, que l'on peut voir comme l'analogie du poids de Boltzmann, fait évoluer le système d'un état initial $|\psi_i\rangle$ vers un état final $|\psi_{i+1}\rangle$ durant le pas de temps imaginaire δ_{τ} . On peut noter l'ajout de l'indice τ dans la formulation de la fonction de partition : cela correspond en fait à l'ajout d'une dimension supplémentaire au système. En effet, on a une certaine analogie entre $e^{-\beta\mathcal{H}}$ et le propagateur $e^{-i\mathcal{H}t}$. En faisant la substitution $\beta \rightarrow -it$, on peut voir β comme un temps imaginaire : l'opérateur $e^{-\beta\mathcal{H}}$ est appelé opérateur d'évolution en temps imaginaire. Cette formulation en intégrale de chemin a permis d'introduire le concept d'équivalence entre un système quantique de dimension d et un système classique en dimension $d + 1$ [Sondhi 1997], dont nous avons déjà parlé dans le premier chapitre. Et c'est sur ce système classique qu'on utilisera la méthode de Monte-Carlo. La limite thermodynamique sera atteinte dans une limite de température nulle : en effet $\beta \xrightarrow{T \rightarrow 0} +\infty$, on a donc une extension infinie de la dimension supplémentaire.

Ainsi, la fonction de partition, qui s'écrivait au départ comme la trace d'un opérateur, s'écrit comme une somme de produit d'éléments de matrice. Le terme $\delta_{\tau}\mathcal{H}$ étant faible devant 1, on peut utiliser différentes approximations sur $e^{-\delta_{\tau}\mathcal{H}}$, après avoir éventuellement décomposé le Hamiltonien. Ces approximations ont abouti sur différents algorithmes, dont le plus célèbre est sans doute le *World line algorithm*, développé en 1982 par HIRSCH *et al.* [Hirsch 1982]. Celui-ci consiste à séparer le Hamiltonien en deux parties, l'une couplant les sites pairs, et l'autre les sites impairs aux plus proches voisins : $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{pair} + \mathcal{H}_{impair}$, puis d'utiliser l'approximation de Trotter-Suzuki [Suzuki 1977]. Cela permet d'obtenir une nouvelle expression de $e^{-\delta_{\tau}\mathcal{H}}$:

$$e^{-\delta_{\tau}\mathcal{H}} \simeq e^{-\delta_{\tau}\mathcal{H}_{pair}} e^{-\delta_{\tau}\mathcal{H}_{impair}} + O(\delta_{\tau}^2) \quad (2.24)$$

Pour chaque pas de temps imaginaire, on introduira une erreur δ_{τ}^2 soit une erreur totale de $\beta\delta_{\tau}$. Pour palier à ce problème, on peut développer d'autres algorithmes de telle manière à ce qu'ils fonctionnent en temps continu et non pas en temps discret [Prokof'ev 1998]. L'algorithme de *World line* souffre de nombreux défauts, du fait des *updates* locaux lors de l'échantillonnage : problème de convergence au niveau des transitions, impossibilités de calculer les fonctions de Green, restriction à l'ensemble canonique, *Winding* fixé. Des extensions de cet algorithme, connues sous le nom d'algorithmes de cluster, viennent contrecarrer ces défauts [Wolff 1990, Sokal 1991].

On peut interpréter cette expression de la fonction de partition très simplement, en terme de parcours de lignes d'univers, comme le décrit la figure 2.3. Les différents algorithmes vont déformer ces lignes d'univers, afin de déplacer les particules et ainsi explorer les états accessibles au système. Ces déplacements seront acceptés ou rejetés, de manière à ce qu'ils satisfassent le bilan détaillé associé à l'algorithme considéré. Cette représentation graphique nous permet par ailleurs d'introduire une grandeur topologique particulière : le *Winding number* W . Ce nombre compte le nombre de fois où une ligne d'univers traverse totalement le système dans une dimension spatiale pendant son évolution en temps imaginaire. Ce nombre caractérisera la cohérence du déplacement des particules, et nous permet d'obtenir la densité superfluide qui s'écrit [Pollock 1987] :

$$\rho_s = \frac{\langle W^2 \rangle}{2dt\beta L^{d-2}}, \quad (2.25)$$

avec d la dimension du système, L sa taille, β l'inverse de la température, t le paramètre de saut, et W le *Winding number*. Cette quantité sera d'un intérêt primordial dans nos futures études. En effet, sa valeur nulle (ou non nulle) renseigne sur le comportement superfluide du système.

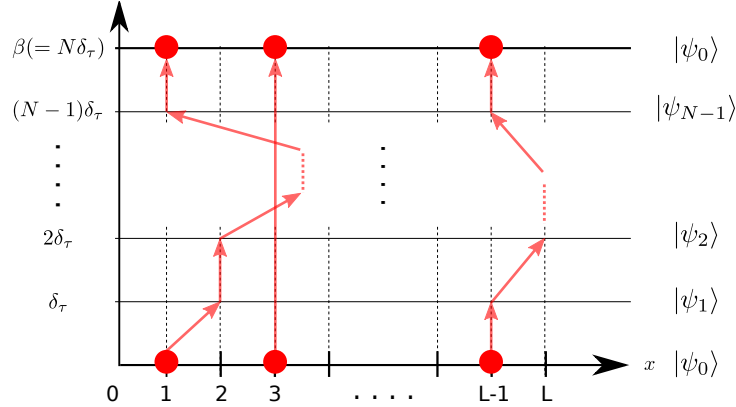


FIGURE 2.3 – Diagramme de ligne d'univers pour un système unidimensionnel. On considère un état initial $|\psi_i\rangle = |1, 0, 1, \dots, 1, 0\rangle$ qui fait aussi office d'état final (vu que l'on considère une trace). Les particules vont se déplacer (ou non) à chaque pas de température, afin d'explorer les différentes configurations.

Une autre approche consiste à traiter les termes cinétiques comme des perturbations par rapport aux termes d'interactions, et à faire un développement perturbatif. Cette approche a donné naissance à une autre grande famille d'algorithme, les *Worm algorithms*. Ces algorithmes introduisent un « opérateur de Worm » [Prokof'ev 2001], qui génère des discontinuités dans les lignes d'univers (les déplacements sont autorisés entre sites qui ne sont pas forcément plus proches voisins), ce qui permet de calculer les fonctions de Green à N -corps. Cette approche sert justement de base à l'algorithme que nous utiliserons et que nous explicitons dans la sous-section suivante.

2.3.3 Algorithme des Fonctions de Green Stochastiques

L'algorithme des Fonctions de Green Stochastiques (SGF) [Rousseau 2008a, Rousseau 2008b] que nous utilisons dans cette thèse est une généralisation de l'algorithme de Worm canonique [Rombouts 2006, Van Houcke 2006]. En effet, les deux algorithmes utilisent la même représentation de la fonction de partition, basée sur une approche perturbative, et explore un espace des configurations étendu (via des *updates* globaux) ce qui permet notamment de calculer les fonctions de Green à N -corps, qui nous intéressent tout particulièrement afin d'étudier les corrélations pouvant exister dans les systèmes que nous traitons.

Avant de discuter du fonctionnement de cet algorithme, présentons ses différentes propriétés :

- Il s'applique à n'importe quel Hamiltonien de dimension d , du moment qu'il n'y a pas de problème de signe ;
- fonctionne en temps imaginaire continu et est donc exact en dehors des erreurs statistiques ;
- fonctionne dans l'ensemble canonique mais aussi grand-canonique ;
- utilise des *updates* globaux ce qui permet d'échantillonner le *winding number* ;
- le taux d'acceptation d'une configuration est de 100% ce qui assure l'ergodicité (contrairement à un algorithme de Worm Canonique) ;
- l'échantillonnage est perfectionné via l'utilisation d'*updates* dirigés [Rousseau 2008b].

Une force de cet algorithme réside dans le fait qu'aucune décomposition particulière du Hamiltonien n'est nécessaire, contrairement à l'algorithme *World line*. On sépare juste les termes diagonaux des termes non diagonaux, on considérera donc des Hamiltoniens \mathcal{H} de la forme :

$$\mathcal{H} = \mathcal{V} - \mathcal{T}, \quad (2.26)$$

\mathcal{V} représente les termes diagonaux, tandis que \mathcal{T} contient les termes cinétiques et d'interactions qui sont non diagonaux et positifs. On peut réécrire la fonction de partition $\mathcal{Z} = e^{-\beta\mathcal{H}}$ en procédant à l'expansion suivante :

$$\mathcal{Z}(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{V}} T_\tau \exp \left(\int_0^\beta \mathcal{T}(\tau) d\tau \right), \quad (2.27)$$

$$= \text{Tr} \sum_{N=0}^{+\infty} \int_{0 < \tau_1 < \dots < \tau_N < \beta} e^{-\beta\mathcal{V}} \mathcal{T}(\tau_N) \dots \mathcal{T}(\tau_1) d\tau_1 \dots d\tau_N. \quad (2.28)$$

T_τ est l'opérateur d'ordonnancement temporel et $\mathcal{T}(\tau)$ est défini par la transformation :

$$\mathcal{T}(\tau) = e^{\tau\mathcal{V}} \mathcal{T} e^{-\tau\mathcal{V}}. \quad (2.29)$$

Comme pour la formulation en intégrale de chemin, on insère l'opérateur unité $\sum_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| = 1$ entre chaque opérateur \mathcal{T} et on obtient :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\beta) &= \sum_{N=0}^{+\infty} \sum_{\{\psi_k\}} \int_{0 < \tau_1 < \dots < \tau_N < \beta} \langle \psi_0 | e^{-\beta \mathcal{V}} \mathcal{T}(\tau_N) | \psi_{N-1} \rangle \langle \psi_{N-1} | \mathcal{T}(\tau_{N-1}) \\ &\quad \times | \psi_{N-2} \rangle \dots \langle \psi_k | \mathcal{T}(\tau_N) | \psi_{k-1} \rangle \dots | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | \mathcal{T}(\tau_1) | \psi_0 \rangle d\tau_1 \dots d\tau_N. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Nous allons chercher à échantillonner la fonction de partition sous cette dernière forme. Pour cela, on définit un « opérateur de Green » qui s'écrit :

$$\mathcal{G} = \sum_{p=0}^{+\infty} \sum_{q=0}^{+\infty} g_{pq} \sum_{\{i_p | j_q\}} \prod_{k=1}^p \mathcal{A}_{i_k}^\dagger \prod_{l=1}^q \mathcal{A}_{j_l}. \quad (2.31)$$

Les opérateurs \mathcal{A}^\dagger et \mathcal{A} sont les opérateurs création et annihilation normalisés, c'est à dire qu'ils satisfont les relations :

$$\mathcal{A}^\dagger |n\rangle = |n+1\rangle, \quad \mathcal{A} |n\rangle = |n-1\rangle, \quad (2.32)$$

dans la base des états de Fock, avec la condition supplémentaire $\mathcal{A}|0\rangle = 0$. Ces opérateurs changent les états $|n\rangle$ en ajoutant ou supprimant une particule, mais sans en affecter la norme. L'expression $\{i_p | j_q\}$ correspond à deux ensembles de sites, tels qu'aucune égalité entre les deux indices ne soit permise. Les éléments de matrice g_{pq} (avec $g_{pq} = \langle \psi_L | \mathcal{G} | \psi_R \rangle$) sont choisis selon l'application que l'on souhaitera faire de l'algorithme (en terme de calcul des différentes observables). L'opérateur \mathcal{G} agira sur un état $|\psi_R\rangle$ pour le faire évoluer vers un état $|\psi_L\rangle$ en détruisant q particules aux sites j_q puis en les recréant aux sites i_p . Les éléments diagonaux de \mathcal{G} seront définis égaux à 1. En rompant la fonction de partition au temps τ et en insérant l'opérateur \mathcal{G} entre les deux parties, on peut réécrire cette dernière sous la forme d'une fonction de partition étendue telle que :

$$\mathcal{Z}(\beta, \tau) = e^{-(\beta-\tau)\mathcal{H}} \mathcal{G} e^{-\tau\mathcal{H}}. \quad (2.33)$$

En suivant le même cheminement que précédemment, la fonction de partition étendue s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(\beta, \tau) &= \sum_{N=0}^{+\infty} \sum_{\{\psi_k\}} \int_{0 < \tau_1 < \dots < \tau_N < \beta} \langle \psi_0 | e^{-\beta \mathcal{V}} \mathcal{T}(\tau_N) | \psi_{N-1} \rangle \langle \psi_{N-1} | \mathcal{T}(\tau_{N-1}) | \psi_{N-2} \rangle \\ &\quad \times \dots \langle \psi_{L+2} | \mathcal{T}(\tau_L) | \psi_{L+1} \rangle \langle \psi_{L+1} | \mathcal{T}(\tau_L) | \psi_L \rangle \langle \psi_L | \mathcal{G}(\tau) | \psi_R \rangle \\ &\quad \times \langle \psi_R | \mathcal{T}(\tau_R) | \psi_{R+1} \rangle \langle \psi_{R+1} | \mathcal{T}(\tau_R) | \psi_{R+2} \rangle \\ &\quad \times \dots | \psi_1 \rangle \langle \psi_1 | \mathcal{T}(\tau_1) | \psi_0 \rangle d\tau_1 \dots d\tau_N. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Sous cette forme, la fonction de partition est donc définie comme une somme sur toutes les configurations possibles, celles-ci étant déterminées par un ensemble d'indice de temps imaginaire $(\tau_1 \cdots \tau_N)$ et un ensemble d'état $(\psi_0 \cdots \psi_{N-1})$. L'opérateur de Green met à jour ces configurations, en créant ou en détruisant des opérateurs de saut \mathcal{T} dans la chaîne définissant la fonction de partition, lors de ses déplacements en temps imaginaire croissant (vers la gauche) ou décroissant (vers la droite). Dans sa version du schème d'*update* simplifié, deux cas de figure sont à prendre en compte :

- \mathcal{G} crée un opérateur \mathcal{T} à sa droite au temps τ , puis est décalé dans la chaîne de $\Delta\tau \in [0, \tau_L - \tau]$.
- \mathcal{G} est directement décalé dans la chaîne à gauche de l'opérateur \mathcal{T} agissant à τ_L puis le détruit.

\mathcal{G} sera modifié en conséquence afin d'assurer la périodicité en temps imaginaire de la chaîne représentant la fonction de partition. Les probabilités associées aux différents processus satisfont les bilans détaillés, non présentés ici mais développés dans [Rousseau 2008a]. Nous utiliserons une version plus performante qui impose une direction de propagation de l'opérateur de Green. L'organigramme de la figure 2.4 représente le schème de l'algorithme.

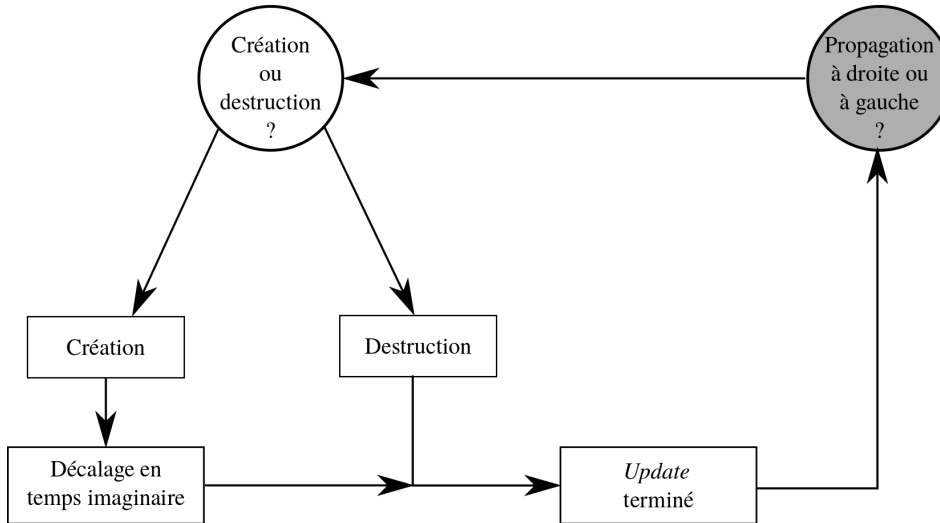


FIGURE 2.4 – Schème de l'algorithme des Fonctions de Green Stochastiques. Celui-ci est explicité dans ce qui précède.

Quand on est dans le cas particulier où les états se trouvant de part et d'autre de l'opérateur de Green sont identiques, ce dernier est diagonal. Dans ce cas, la fonction de partition étendue $\mathcal{Z}(\beta, \tau)$ se ramène à la fonction de partition normale $\mathcal{Z}(\beta)$, et les observables qui nous intéressent peuvent être calculées. L'action de l'opérateur de Green induit donc des déplacements qui sont aléatoires, ce qui vient justifier le caractère stochastique de l'algorithme. Ces déplacements aléatoires se traduiront par des discontinuités dans les lignes d'univers comme le montre la figure 2.5.

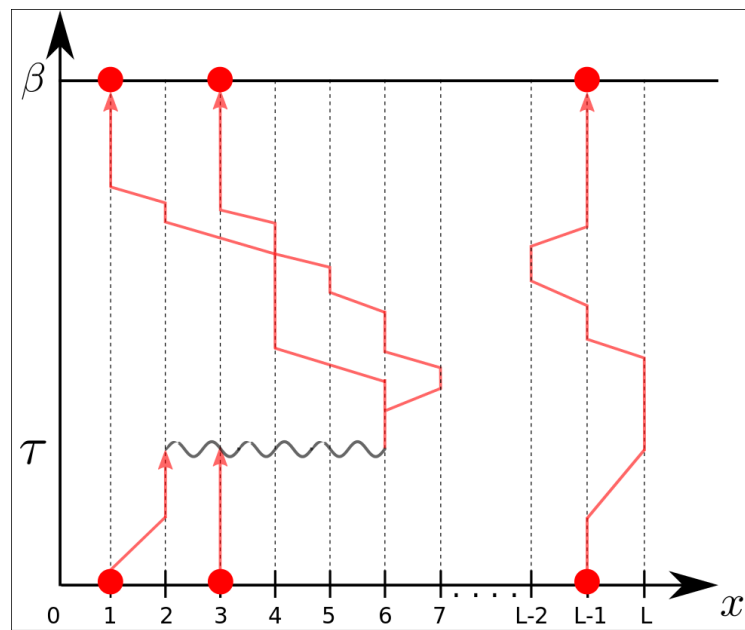


FIGURE 2.5 – Représentation d’un réseau unidimensionnel de L sites contenant 3 particules. Au temps τ , l’opérateur de Green délocalise simultanément les particules situées aux sites 1 et 3 sur le 6^{ième} site. Cette action permet de calculer les fonctions de Green.

Bibliographie

- [De Chiara 2008] Gabriele De Chiara, Matteo Rizzi, Davide Rossini et Simone Montangero. *Density Matrix Renormalization Group for Dummies*. Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, vol. 5, no. 7, pages 1277–1288, 2008. (Cité en page 28.)
- [Hirsch 1982] J. E. Hirsch, R. L. Sugar, D. J. Scalapino et R. Blankenbecler. *Monte Carlo simulations of one-dimensional fermion systems*. Phys. Rev. B, vol. 26, pages 5033–5055, Nov 1982. (Cité en page 34.)
- [Metropolis 1953] Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller et Edward Teller. *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*. The Journal of Chemical Physics, vol. 21, no. 6, pages 1087–1092, 1953. (Cité en pages 32 et 33.)
- [Pollock 1987] E. L. Pollock et D. M. Ceperley. *Path-integral computation of superfluid densities*. Phys. Rev. B, vol. 36, pages 8343–8352, Dec 1987. (Cité en page 35.)
- [Prokof'ev 1998] N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov et I. S. Tupitsyn. *Exact, complete, and universal continuous-time worldline Monte Carlo approach to the statistics of discrete quantum systems*. Journal of Experimental and Theoretical Physics, vol. 87, no. 2, pages 310–321, 1998. (Cité en page 34.)
- [Prokof'ev 2001] Nikolay Prokof'ev et Boris Svistunov. *Worm Algorithms for Classical Statistical Models*. Phys. Rev. Lett., vol. 87, page 160601, Sep 2001. (Cité en page 35.)
- [Rombouts 2006] S. M. A. Rombouts, K. Van Houcke et L. Pollet. *Loop Updates for Quantum Monte Carlo Simulations in the Canonical Ensemble*. Phys. Rev. Lett., vol. 96, page 180603, May 2006. (Cité en page 36.)
- [Rousseau 2008a] V. G. Rousseau. *Stochastic Green function algorithm*. Phys. Rev. E, vol. 77, page 056705, May 2008. (Cité en pages 36, 38 et 143.)
- [Rousseau 2008b] V. G. Rousseau. *Directed update for the stochastic Green function algorithm*. Phys. Rev. E, vol. 78, page 056707, Nov 2008. (Cité en pages 36 et 143.)
- [Schollwöck 2005] U. Schollwöck. *The density-matrix renormalization group*. Rev. Mod. Phys., vol. 77, pages 259–315, Apr 2005. (Cité en page 28.)
- [Sokal 1991] Alan D. Sokal. *How to beat critical slowing-down: 1990 update*. Nuclear Physics B - Proceedings Supplements, vol. 20, pages 55 – 67, 1991. (Cité en page 34.)
- [Sondhi 1997] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini et D. Shahar. *Continuous quantum phase transitions*. Rev. Mod. Phys., vol. 69, pages 315–333, Jan 1997. (Cité en pages 16 et 34.)
- [Suzuki 1977] Masuo Suzuki, Seiji Miyashita et Akira Kuroda. *Monte Carlo Simulation of Quantum Spin Systems. I*. Progress of Theoretical Physics, vol. 58, no. 5, pages 1377–1387, 1977. (Cité en page 34.)

-
- [Van Houcke 2006] K. Van Houcke, S. M. A. Rombouts et L. Pollet. *Quantum Monte Carlo simulation in the canonical ensemble at finite temperature*. Phys. Rev. E, vol. 73, page 056703, May 2006. (Cité en page 36.)
- [van Oosten 2001] D. van Oosten, P. van der Straten et H. T. C. Stoof. *Quantum phases in an optical lattice*. Phys. Rev. A, vol. 63, page 053601, Apr 2001. (Cité en page 29.)
- [White 1992a] S. R. White et R. M. Noack. *Real-space quantum renormalization groups*. Phys. Rev. Lett., vol. 68, pages 3487–3490, Jun 1992. (Cité en page 28.)
- [White 1992b] Steven R. White. *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. Lett., vol. 69, pages 2863–2866, Nov 1992. (Cité en page 28.)
- [White 1993] Steven R. White. *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. B, vol. 48, pages 10345–10356, Oct 1993. (Cité en page 28.)
- [Wolff 1990] Ulli Wolff. *Critical slowing down*. Nuclear Physics B - Proceedings Supplements, vol. 17, pages 93 – 102, 1990. (Cité en page 34.)

Modèle de Kondo bosonique sur réseau

Sommaire

3.1	Introduction	44
3.1.1	Modèle à une impureté : l'effet Kondo	44
3.1.2	Du modèle à deux impuretés au réseau d'impuretés	47
3.2	Retour sur le modèle de Bose-Hubbard	50
3.2.1	Hamiltonien	50
3.2.2	Propriétés de phase et critiques	53
3.2.3	Extensions du modèle de Bose-Hubbard	56
3.3	Présentation du modèle	57
3.4	Analyse exacte à \mathcal{J}/U fixé	61
3.4.1	Diagramme de phase	66
3.4.2	Transitions de phase quantique	71
3.4.3	Propriétés magnétiques	76
3.4.4	Effets thermiques	80
3.5	Conclusion	88
	Bibliographie	90

3.1 Introduction

Ce que nous appelons aujourd'hui « effet Kondo » regroupe un certain nombre de comportements, originellement observés dans les années 1930 dans certains métaux [de Haas 1934]. Le plus célèbre est sans doute l'existence d'un minimum de résistivité à température finie. De manière plus générale, il concerne la dépendance en température des propriétés de transport ou thermodynamiques de certains matériaux.

Il fallut attendre 1964 pour que KONDO, se basant sur les travaux de FRIEDEL [Friedel 1958, Blandin 1959] ainsi que ceux d'ANDERSON [Anderson 1961], explicite l'origine de ces phénomènes : ceux-ci proviennent de l'interaction antiferromagnétique locale entre électrons de conduction, évoluant dans les orbitales délocalisées du matériau (typiquement orbitales s , p ou d) et impuretés magnétiques du matériau (électrons appartenant généralement à des orbitales f ou d) [Kondo 1964].

L'effet Kondo concerne typiquement des métaux tels que Cu et Al dopé avec Fe ou Ni et est aussi observé dans des matériaux tels que les composés à fermions lourds, les semi-conducteurs magnétiques, les boîtes quantiques, ou les transistors moléculaires dans un régime dit de « blocage de Coulomb » [Hewson 1993, Cronenwett 1998, Park 2002]. Les fermions lourds regroupent des composés tels que des métaux de transition contenant des terres rares, ou encore des actinides, et l'on appelle ces composés fermions lourds, car la masse effective des électrons est de deux à trois ordres de grandeur supérieure à celle de l'électron libre, du fait de leur structure de bande très plate. Ainsi, en physique de la matière condensée, l'interaction entre des particules mobiles et des impuretés magnétiques (que l'on nommera « physique de Kondo »), a été et est encore un sujet très actif du fait du grand nombre de systèmes décrits par cette physique [Hewson 1993, Tsunetsugu 1997].

Nous revenons dans cette section sur une explication sommaire de la physique de Kondo, en explicitant tout d'abord un système contenant une seule impureté, puis deux, ce qui permet de mettre en évidence relativement facilement les phénomènes qui entrent en jeu, avant de généraliser à un réseau d'impuretés, qui sera par la suite notre centre d'intérêt.

3.1.1 Modèle à une impureté : l'effet Kondo

Le Hamiltonien décrivant des électrons de conduction pouvant interagir avec le spin d'une impureté magnétique est donné par :

$$\mathcal{H}_K = -t \sum_{\sigma, \langle i, j \rangle} (b_{\sigma, i}^\dagger b_{\sigma, j} + \text{h.c.}) + \mathcal{J} \mathbf{S}^c \cdot \mathbf{S}^l. \quad (3.1)$$

Le premier terme décrit la capacité des électrons de conduction, de spin σ (\uparrow ou \downarrow) à se mouvoir sur le réseau cristallin entre sites i et j plus proches voisins et est en fait le terme cinétique du modèle de Hubbard dont nous avons déjà parlé dans

le chapitre 1 (page 7). Nous reviendrons plus en détail sur ce terme, ainsi que sur sa provenance, dans la section suivante. Gardons juste à l'esprit que l'intensité de ces déplacements sera gouvernée par le coefficient t .

Le second terme représente l'interaction de Kondo, d'intensité \mathcal{J} (aussi connu sous la dénomination de Hamiltonien $s - d$) et couple le spin d'un électron de la couche de conduction c avec une impureté magnétique locale antiferromagnétiquement. \mathbf{S}^α ($\alpha = c, l$) est l'opérateur vectoriel de spin des électrons, et s'écrit $\mathbf{S}^\alpha = \sum_{\uparrow, \downarrow} b_{\uparrow}^\dagger \boldsymbol{\sigma} b_{\downarrow}$ où les composantes de $\boldsymbol{\sigma}$ sont données par les trois matrices de Pauli.

De manière générale, cette interaction se manifeste par des retournements de spins locaux au niveau de l'impureté (que nous appellerons par la suite *spin flip*), entre spin des électrons de conduction et spin de l'impureté, comme le montre la figure 3.1. Un électron de conduction subit donc un *spin flip* avec un spin localisé, sous réserve que ces deux spins soient antiparallèles.

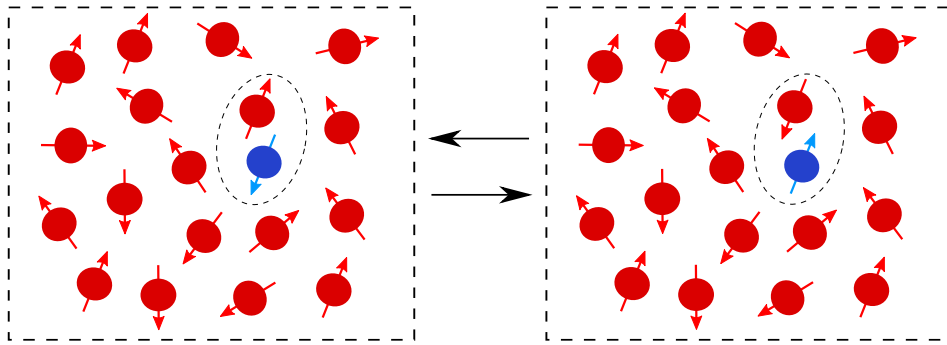


FIGURE 3.1 – Représentation du processus de *spin flip*. Les particules rouges représentent les électrons de conduction, tandis que la particule bleu représente l'impureté. Localement, on observe un échange de spin entre ces deux particules.

Comme nous allons le voir, l'impureté magnétique se comporte comme un spin libre à haute température. Puis celle-ci perd son caractère magnétique au fur et à mesure que la température est abaissée en dessous d'une certaine température T_K , appelée température de Kondo et caractéristique du matériau considéré, jusqu'à perdre totalement son caractère magnétique aux très basses températures.

3.1.1.1 Régime de couplage faible $T \gg T_K$

À haute température, les électrons de conduction et le spin localisé se comportent de manière complètement indépendante et l'impureté magnétique se agit comme un spin libre qui n'a aucune influence sur les propriétés de transport. Localement, un mécanisme diffusif entre un électron de conduction et une impureté magnétique conduit à un *spin flip* décrit sur la figure 3.1. L'interaction de Kondo étant faible devant l'énergie d'agitation thermique, le second terme du Hamiltonien 3.1 peut être traité perturbativement. Kondo a effectué ce calcul au troisième ordre,

et a mis en évidence une expression pour la résistivité liée à l'impureté qui s'écrit :

$$R_{imp}(T) = \frac{3\pi m \mathcal{J}^2 S(S+1)}{2e^2 \varepsilon_F} (1 - 4\mathcal{J} \rho_0(\varepsilon_F) \ln \left(\frac{kT}{D} \right)), \quad (3.2)$$

avec ε_F le niveau de Fermi, $\rho_0(\varepsilon_F)$ la densité d'état au niveau de Fermi, et D la largeur de bande des électrons de conduction. On obtient finalement une expression pour la résistivité totale :

$$R(T) = aT^5 + c_{imp}R_0 - c_{imp}R_1 \ln \left(\frac{kT}{D} \right). \quad (3.3)$$

Le premier terme contient la contribution des vibrations du réseau, qui prévaut à haute température, avec a constante. Le second terme contient la contribution de l'impureté indépendante de la température, et le dernier terme la contribution à l'ordre 3 en \mathcal{J} de l'impureté. Cette dernière croît quand la température décroît, ce qui vient expliquer le minimum de résistivité à température non nulle. Étant proportionnelle à \mathcal{J}^3 , il est important de préciser que ce comportement n'est possible que pour un couplage antiferromagnétique et donc pour $\mathcal{J} > 0$. Enfin, c_{imp} correspond à la densité d'impuretés et nous considérons que c_{imp} est suffisamment faible pour que les impuretés n'interagissent pas entre elles (ce cas sera traité dans la prochaine sous-section).

Ainsi, quand la température diminue, la contribution du troisième terme devient de plus en plus grande, et ce d'autant plus que le couplage Kondo \mathcal{J} est élevé. Le spin des impuretés magnétiques va donc commencer à jouer un rôle dans la valeur de la résistivité. On peut déduire de l'expression 3.3 une expression pour la température à laquelle la résistivité sera minimale, qui s'exprime :

$$T_{min} = \frac{R_1}{5a} c_{imp}^{1/5}. \quad (3.4)$$

La formule 3.3 permet par ailleurs d'introduire une nouvelle échelle d'énergie, donnée par kT_K et qui vaut :

$$kT_K \propto D e^{-1/2\mathcal{J}\rho_0(\varepsilon_F)}. \quad (3.5)$$

Quand on diminue T tel que $T \sim T_K$, le terme logarithmique commence à prédominer, et les propriétés du matériau dépendent fortement des processus liés à l'impureté magnétique. Cette température fixe par ailleurs une limite dans laquelle l'approche perturbative de Kondo reste valable. En effet, si on abaisse trop la température, la résistivité diverge, ce qui met en défaut l'approche perturbative de Kondo.

3.1.1.2 Régime de couplage fort $T \ll T_K$

Dans une limite où $T \ll T_K$, la résistivité diverge, ce qui suppose que l'on n'est plus dans un régime de couplage faible, mais de couplage fort. De fortes corrélations se développeraient au sein du système, où il y aurait donc la formation d'un

singulet entre un seul électron de conduction et l'impureté magnétique. L'approche numérique développée par WILSON a permis d'accéder à l'état fondamental du modèle de Kondo, et ce pour toutes les gammes de températures, pour le cas d'une impureté de spin 1/2 [Wilson 1975]. Par la suite, NOZIÈRES interpréta ces résultats de la manière suivante : à très basse température, un système Kondo se comporte selon la théorie de Landau des liquides de Fermi [Nozières 1974, Nozières 1976].

3.1.1.3 Régime de couplage intermédiaire $T \sim T_K$

De manière la plus qualitative et simpliste possible, on peut décrire l'évolution comportementale du système entre les deux limites de couplage précédemment décrites. En partant d'une haute température, lorsque la température diminue jusqu'à la valeur de $T \sim T_K$, un singulet commence à se former entre le spin de l'impureté et le spin d'un électron de conduction, et le processus de *spin flip* est progressivement supprimé. Un nuage d'écrantage, appelé nuage Kondo, apparaît autour de ce singulet, qui concerne d'autant plus d'électrons que la température est faible. Le spin perd peu à peu son caractère magnétique à cause de l'écrantage dû aux électrons de conduction, la résistance est minimale, puis ré-augmente au fur et à mesure que la taille du nuage d'écrantage augmente. Le singulet ici créé se comporte comme un potentiel attractif, qui s'opposera donc au mouvement des électrons. Quand la température est suffisamment faible, l'impureté magnétique est totalement écrantée, et celle-ci forme un état singulet parfait avec un électron de conduction.

3.1.2 Du modèle à deux impuretés au réseau d'impuretés

Toutefois, il y a rarement une seule impureté dans un matériau. Au delà d'une impureté, la physique est beaucoup plus riche, de nouveaux phénomènes sont à prendre en compte, car ces impuretés vont pouvoir interagir entre elles [Doniach 1977].

Considérons tout d'abord le cas le plus simple à deux impuretés, présenté sur la figure 3.2. Le système peut adopter soit un comportement où on est en présence de deux nuages de Kondo indépendants, ou bien des corrélations peuvent apparaître entre les deux nuages. Ces corrélations proviennent de l'interaction Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY) [Ruderman 1954, Kasuya 1956, Yosida 1957] et sont complètement analogues à l'interaction de couplage entre des moments magnétiques nucléaires via les électrons de conduction. Cette interaction d'échange indirecte, qui est à longue portée, utilise la médiation des électrons de conduction pour se manifester et un développement perturbatif au second ordre permet de dire qu'elle est proportionnelle à \mathcal{J}^2/r^3 , et l'on obtient le Hamiltonien de RKKY :

$$\mathcal{H}_{RKKY} = -\frac{9\pi}{8} n_c^2 \frac{\mathcal{J}^2}{\varepsilon_F} \sum_{\langle ij \rangle} \frac{\mathbf{S}_i^1 \cdot \mathbf{S}_j^1}{r_{ij}^3} [2k_F \cos(2k_F \mathbf{r}_{ij}) - \frac{\sin(2k_F \mathbf{r}_{ij})}{\mathbf{r}_{ij}}], \quad (3.6)$$

avec :

- n_c : densité des électrons de conduction,
- k_F : vecteur d'onde de Fermi,
- r_{ij} : distance entre les deux impuretés,
- ε_F : niveau de Fermi.

Ce Hamiltonien d'échange se réduit à $\mathcal{H}_{RKKY} = \mathcal{J}_{RKKY} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ quand on est en présence de seulement deux impuretés, avec $\mathcal{J}_{RKKY} \propto \mathcal{J}^2/\varepsilon_F$, et présente un comportement oscillatoire en fonction de la distance relative des impuretés, qui est totalement analogue aux oscillations de Friedel [Friedel 1952]. Ce sont justement les oscillations des nuages électroniques de conduction qui couplent les spins des moments localisés sur de longues distances.

Cette interaction entraîne donc une mise en ordre spatiale des spins, et dans le cas où les interactions entre spin sont de même signes, un ordre ferromagnétique ou antiferromagnétique se mettra en place entre les différentes impuretés du matériau. Dans le cas d'un alliage dilué, l'orientation des spins est bien entendu aléatoire ce qui se traduit par la mise en place d'un état de verre de spin isotrope [Theumann 2001]. Bien entendu, cette interaction se manifeste quand l'énergie de couplage devient supérieure à l'énergie d'agitation thermique, donc en dessous d'une certaine température que nous appellerons T_{RKKY} , qui est définie par $kT_{RKKY} \propto c_{imp} \mathcal{J}^2 \rho(\varepsilon_F) S(S+1)$.

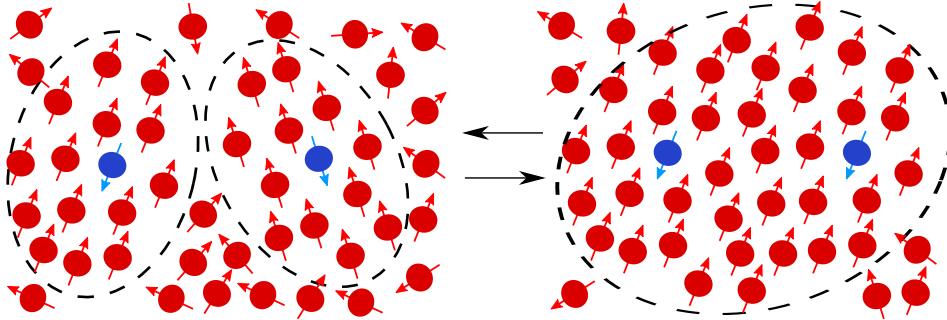


FIGURE 3.2 – Représentation des effets Kondo et RKKY, dans le cas de deux impuretés. À gauche, dans le cas où $\mathcal{J} \gg \mathcal{J}_{RKKY}$, l'effet Kondo domine, et deux nuages indépendants se forment. Cet état ne présente pas d'ordre magnétique. À droite, dans le cas où $\mathcal{J} \ll \mathcal{J}_{RKKY}$, l'effet RKKY domine, ce qui tend à aligner les spins des impuretés. Cet état, pour ce schéma, présente un ordre ferromagnétique.

On voit que les interactions Kondo et RKKY sont antagonistes, mais toutes deux tendent à limiter les fluctuations du spin des impuretés : l'effet Kondo par écrantage des moments locaux, et l'effet RKKY en couplant tous les moments magnétiques entre eux. L'un tend à former un singulet et aucun ordre magnétique

n'émerge, contrairement à l'autre où le couplage pourra rendre possible l'émergence d'un ordre magnétique. Pour $\mathcal{J} \gg \mathcal{J}_{RKKY}$, l'interaction entre les deux impuretés est négligeable, les deux spins forment deux singulets indépendants avec les électrons de conduction. Inversement, pour $\mathcal{J} \ll \mathcal{J}_{RKKY}$, les spins des impuretés se couplent, et restent figés dans une configuration donnée.

Intéressons nous maintenant au modèle sur réseau [Tsunetsugu 1997, Feldbacher 2002, Yanagisawa 1995, Fazekas 1997] où une impureté est présente sur chaque site, comme le montre la figure 3.3.

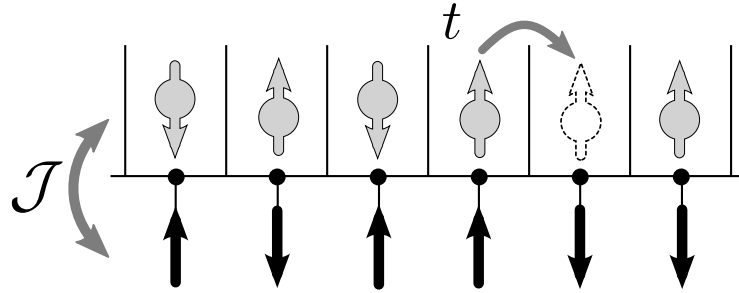


FIGURE 3.3 – Représentation du modèle de Kondo sur réseau, pour un réseau unidimensionnel. Les électrons de conduction, en gris, peuvent se mouvoir sur le réseau avec une intensité dépendante de t et interagissent avec les impuretés magnétiques, en noir, avec une force d'interaction gouvernée par \mathcal{J} .

Le Hamiltonien décrivant le système est donné par :

$$\mathcal{H}_{KLM} = -t \sum_{\sigma, \langle i, j \rangle} (b_{\sigma, i}^\dagger b_{\sigma, j} + \text{h.c.}) + \mathcal{J} \sum_i \mathbf{S}_i^c \cdot \mathbf{S}_i^l, \quad (3.7)$$

et dérive directement du modèle d'Anderson périodique [Schrieffer 1966]. Le sujet de cette thèse concernant les transitions de phase quantique (qui ont lieu à température nulle), nous nous plaçons donc dans cette limite de $T = 0$. La figure 3.4 reproduit de manière qualitative le diagramme de phase du modèle de Kondo sur réseau unidimensionnel, obtenu par une technique de champ moyen [Fazekas 1991].

Dans un régime de couplage fort ($\mathcal{J}/t \gg 1$), le système adopte une phase ferromagnétique, tandis qu'au contraire, le système forme un singulet à faible couplage ($\mathcal{J}/t \ll 1$). Dans le cas où $n_c = 1$, le système est toujours dans un état de singulet dont la nature sera différente selon le couplage. Pour un couplage faible, l'effet RKKY domine et un singulet global se forme, soit un état antiferromagnétique. À fort couplage, c'est l'effet Kondo qui domine ce qui se traduit par la formation de singulets locaux. La compétition de ces deux effets engendrera donc une transition de phase quantique entre deux phases ayant deux comportements magnétiques différents. Cette compétition entre effet Kondo et RKKY est un centre

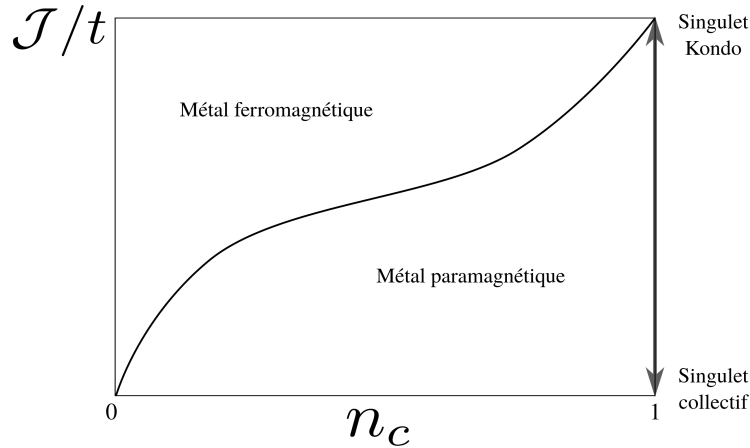


FIGURE 3.4 – Diagramme de phase en champ moyen dans le plan $(n_c, J/t)$, avec n_c la densité d'électrons.

d'intérêt concernant l'étude de transitions de phase quantiques [Wang 2006]; ou encore l'étude de l'impact de ces impuretés sur les propriétés du matériau étudié [Assaad 2002, Shirer 2012].

Grâce aux réseaux optiques avec des atomes ultra-froids, il est possible de reconstruire et de simuler expérimentalement de tels systèmes [Müller 2007, Clément 2009, Wirth 2011] où les atomes peuvent occuper plusieurs bandes d'énergie. Si l'on considère un système à deux bandes, les atomes occupant la première bande joueront le rôle des impuretés magnétiques localisées qui vont interagir avec les atomes mobiles occupant la bande d'énergie supérieure. On retrouve donc ici des systèmes analogues à ceux de Kondo, avec la liberté de charger le réseau optique avec des particules aussi bien fermioniques que bosoniques. Dans la prochaine section, nous revenons sur le modèle de Hubbard, qui décrit la partie cinétique des électrons sur un réseau dont nous avons parlé précédemment, que nous généraliserons par la suite à des particules bosoniques.

3.2 Retour sur le modèle de Bose-Hubbard

3.2.1 Hamiltonien

À l'origine, le modèle de Hubbard a été introduit par John HUBBARD, Martin C. GUTZWILLER et Junjiro KANAMORI en 1963 [Hubbard 1963, Gutzwiller 1963, Kanamori 1963] afin de décrire la transition métal-isolant que l'on observe dans certains solides. Ce modèle s'attache à la description du déplacement des fermions (typiquement des électrons) sur un réseau cristallin (typiquement les atomes d'un solide).

Le modèle de Bose-Hubbard est sa version bosonique, introduit en 1989 par FISHER *et al.* [Fisher 1989]. Celui-ci décrit donc la physique des bosons évoluant sur réseau. Considérons tout d'abord un gaz de N bosons ultra-froids dont le degré de liberté de spin est gelé, chargé dans un potentiel périodique V tridimensionnel (ayant n bandes d'énergie) assimilable à un réseau composé de N_L sites. En utilisant le formalisme de la seconde quantification, le Hamiltonien décrivant un tel système est donné par :

$$\mathcal{H} = \int d^3\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} \int d^3\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \quad (3.8)$$

L'opérateur $\psi(\mathbf{r})$ ou $\psi^\dagger(\mathbf{r})$ est l'opérateur de champ bosonique qui détruit ou crée une particule à la position \mathbf{r} ; tandis que le deuxième terme décrit les interactions de contact entre bosons. Dans le cadre d'un système dilué, ces interactions sont de type binaires élastiques, et proportionnelles à la longueur de diffusion a_d [Huang 1957]. De manière générale, dans le cas d'un potentiel périodique, les états propres des particules soumises à ce potentiel sont donnés par les fonctions de Bloch $\phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, où n dénote l'indice de la bande (de Bloch) énergétique considérée et \mathbf{k} le moment dans la première zone de Brillouin. Dans l'approximation des liaisons fortes, on peut utiliser une base plus adaptée à la description du déplacement de particules sur réseau qui est la base des fonctions de Wannier w , directement reliée à la base des fonctions de Bloch telle que :

$$\phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_i w_{n,\mathbf{r}_i}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}. \quad (3.9)$$

Les opérateurs $\psi(\mathbf{r})$ et $\psi^\dagger(\mathbf{r})$ qui détruisent et créent respectivement une particule au site r_i peuvent donc être développés sur la base des fonctions de Wannier et s'écrivent :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}_i,n} w_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) a_{\mathbf{r}_i,n}, \quad (3.10)$$

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{r}_i,n} w_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) a_{\mathbf{r}_i,n}^\dagger, \quad (3.11)$$

où $a_{\mathbf{r}_i,n}$ ($a_{\mathbf{r}_i,n}^\dagger$) est l'opérateur annihilation (création) qui détruit (créé) une particule dans l'état de Wannier $w_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ appartenant à la $n^{\text{ième}}$ bande d'énergie du potentiel $V(\mathbf{r})$, centré en \mathbf{r}_i . Les opérateurs création et annihilation obéissent aux relations de commutation bosonique suivantes :

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{ij}, \\ [a_i, a_j] &= 0, \\ [a_i^\dagger, a_j^\dagger] &= 0. \end{aligned}$$

Enfin, le modèle de Bose-Hubbard est obtenu sous la condition suivante : le réseau est profond et la température du système est suffisamment basse, c'est à dire que les énergies thermiques et d'interaction sont plus petites que l'écart entre les deux premières bandes énergétiques. La largeur des bandes doit elle aussi être négligeable devant les différentes échelles d'énergie. Il en découle que seule la première bande, d'indice $n = 0$, doit être prise en compte dans les relations 3.10 et 3.11. Ainsi, le déplacement des particules se fait uniquement entre plus proches voisins, et les interactions entre particules se limitent à des interactions sur site, car le recouvrement entre fonctions de Wannier sur deux sites voisins est négligeable. On obtient finalement le Hamiltonien de Bose-Hubbard qui est donné par :

$$\mathcal{H}_{BH} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + \text{h.c.}) + \frac{\mathcal{U}}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i. \quad (3.12)$$

Explicitons maintenant les différents termes. Le premier terme est le terme cinétique, tandis que le second terme est l'interaction entre particules sur site. Le dernier terme permet quant à lui de fixer le nombre moyen de particules dans l'ensemble grand-canonique.

3.2.1.1 Terme cinétique

Ce terme décrit le déplacement des bosons sur le réseau entre sites i et j plus proches voisins, qui se fait par effet tunnel. L'amplitude de ces déplacement est donnée par le coefficient de saut t qui est défini par :

$$t = \int d^3\mathbf{r} w^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) w(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \quad (3.13)$$

Une autre expression plus simple est donnée par $t = \hbar^2/2m^*\delta^2$, avec δ le pas du réseau et m^* la masse effective des bosons. Ce paramètre est donc complètement ajustable dans tout dispositif expérimental : la masse effective est réglable en ajustant l'amplitude du réseau optique, tandis que le pas du réseau est modifiable en changeant la longueur d'onde du laser utilisé. D'un point de vue numérique, et afin de fixer une échelle d'énergie, nous poserons $t = 1$ dans tout ce chapitre.

3.2.1.2 Terme d'interaction

Ce terme décrit une interaction sur site, où n bosons interagissent avec les $n - 1$ bosons restants sur ce site. Dans le cas présent, où on considère un gaz fortement dilué, les interactions sont de type diffusives et donc directement proportionnelles à la longueur de diffusion a_d . Il est important de noter que cette interaction est à courte portée étant donné qu'elle se limite au site même. La force ainsi que le signe de cette interaction est aussi modifiable expérimentalement en utilisant des résonances de Feshbach et est donnée par :

$$\mathcal{U} = \frac{4\pi\hbar^2 a_d}{m} \int d^3\mathbf{r} |w(\mathbf{r})|^4. \quad (3.14)$$

De manière générale, on préfère s'intéresser au cas où les interactions sont répulsives, ce qui sera le cas dans l'intégralité de ce chapitre. En effet, une interaction répulsive entre les particules ($\mathcal{U} > 0$) pourra donner lieu à une transition de phase quantique entre un état superfluide et un état isolant, du fait de la compétition avec le terme cinétique décrit précédemment. Le cas d'interactions attractives ($\mathcal{U} < 0$) n'est pas intéressant dans le sens où il mène à un effondrement du système où toutes les particules se retrouvent sur le même site.

Présentons maintenant les propriétés de phase ainsi que les propriétés critiques d'un tel système.

3.2.2 Propriétés de phase et critiques

Tout d'abord, intéressons nous à la symétrie du Hamiltonien de Bose-Hubbard : celui-ci présente une symétrie $U(1)$, c'est à dire qu'il est invariant par rotation de phase : la transformation $a^{(\dagger)} \rightarrow a^{(\dagger)} e^{(-)i\theta}$ le laisse inchangé. Il en découle directement que le nombre de particules au sein d'un tel système est conservé, car $[N, \mathcal{H}] = 0$. La base des états de Fock est donc une base tout à fait adaptée pour décrire ce système.

Un système décrit par ce Hamiltonien adoptera des phases bien distinctes en fonction des paramètres (t, \mathcal{U}) . Afin de présenter ces différents comportements, nous étudierons les deux cas limites où $t = 0$ et $\mathcal{U} \neq 0$, puis $\mathcal{U} = 0$ et $t \neq 0$ dans une limite de température nulle. De plus, pour une compréhension plus aisée des différents comportements, nous considérerons un cas où nous le réseau contient ρN_L particules, avec ρ entier et N_L le nombre de sites.

3.2.2.1 Isolant de Mott : $t = 0$

Dans la limite où le terme cinétique est strictement nul, le Hamiltonien se réduit à des termes qui sont purement diagonaux dans une base composée des états de Fock $\otimes_i |n_i\rangle$, avec n_i le nombre de bosons au site i . Les particules ne pouvant se mouvoir, lorsque $N = \rho N_L$, avec ρ un entier correspondant à la densité, on aura exactement ρ particules par site, le terme de saut nul empêchant la densité de fluctuer. Cette phase, qui est caractérisée par son incompressibilité, soit $\frac{\partial \rho}{\partial \mu} = 0$, est appelée « isolant de Mott » (MI). La fonction d'onde est donnée par :

$$|\Psi^{MI}\rangle = \prod_{i=1}^{N_L} \frac{(a_i^\dagger)^\rho}{\sqrt{\rho!}} |0\rangle. \quad (3.15)$$

L'état fondamental est donc un produit des différents états sur site, dans l'espace des positions. Cet état ne rompt pas la symétrie de jauge $U(1)$, c'est à dire qu'une phase peut être appliquée à chaque boson sans changer l'énergie du système.

Une phase de Mott a un spectre d'excitation présentant un gap, entre le coût énergétique pour ajouter ou pour enlever une particule. Il est aussi intéressant de regarder le comportement de l'énergie interne, qui est donnée par :

$$E^{MI} = \frac{\mathcal{U}N_L}{2}\rho(\rho - 1), \quad (3.16)$$

$$E_{site}^{MI} = \frac{\mathcal{U}}{2}\rho(\rho - 1). \quad (3.17)$$

En partant d'un système vide, on peut remplir ce dernier avec une particule par site, sans aucun coût énergétique. Une fois la densité $\rho = 1$ atteinte, l'ajout d'une particule coûtera à chaque fois \mathcal{U} , jusqu'à atteindre une densité $\rho = 2$, et cætera.

3.2.2.2 Condensat de Bose-Einstein et Phase superfluide : $\mathcal{U} = 0$

Quand le terme répulsif est strictement nul, le Hamiltonien se réduit à des termes non diagonaux, que l'on diagonalise dans l'espace de Fourier \mathbf{k} après une transformation définie par $a_i = 1/\sqrt{N_L} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i}$. Le système se comporte d'une manière totalement contraire du cas précédent : le nombre de particules sur site fluctue, celles-ci sont délocalisées sur l'ensemble du réseau. La compressibilité est non-nulle, et le spectre d'excitation sans gap. Le système adopte une phase qui n'est autre qu'un condensat de Bose-Einstein qui brise la symétrie de jauge globale $U(1)$. Cette phase est décrite par la fonction d'onde :

$$|\Psi^{BEC}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\frac{1}{\sqrt{N_L}} \sum_i a_i^\dagger \right)^N |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (a_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}^\dagger)^N |0\rangle. \quad (3.18)$$

Contrairement à la phase de Mott, le spectre d'excitation ne présente aucun gap. L'énergie s'écrit :

$$E^{BEC} = \varepsilon_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} n_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}, \quad (3.19)$$

où $\varepsilon_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}$, qui vaut $-2dt$ pour un réseau hypercubique de dimension d , est l'énergie du mode $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ et $n_{\mathbf{k}=\mathbf{0}}$ le nombre de particules dans le mode $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ qui vaut N .

Dans le cas de très faibles interactions ($t/\mathcal{U} \rightarrow 0$), la répulsion sur site va de plus entraîner un déplacement cohérent des particules qui va se faire sans aucun frottement. Un état superfluide (SF) s'établit en plus du condensat de Bose-Einstein. Cette phase sera caractérisée (et donc repérée) par une densité superfluide ou une fraction condensée non nulle.

3.2.2.3 Compétition et transition de phase : $t, \mathcal{U} \neq 0$

Dans le cas où les termes cinétique et d'interaction sont simultanément non nuls, une compétition entre ceux-ci va se mettre en place.

Considérons maintenant un système qui se trouve initialement dans une phase de Mott parfaite, caractérisée par un état de Fock, où le terme cinétique est donc strictement nul. Puis on augmente le terme cinétique : les particules commencent à se déplacer, ce qui augmente l'énergie du système de \mathcal{U} . Comme le système veut minimiser son énergie, les bosons restent tout de même localisés, les interactions répulsives sur site empêchant la densité de fluctuer. Quand le terme de saut sera suffisamment élevé pour contrecarrer cette force de répulsion, le système subira une transition de phase quantique vers un état superfluide, transition qui peut s'accompagner de la brisure de symétrie de jauge globale $U(1)$ et d'un établissement d'un ordre non diagonal à longue portée.

De manière purement qualitative, la valeur des ratios t/\mathcal{U} (faibles ou fortes interactions) et μ/\mathcal{U} (nombre de particules dans le système) déterminera la phase qu'adopte le système. Cependant, trouver l'état fondamental du système n'est pas une chose aisée comme dans les deux cas limites. Plusieurs approches sont envisageables : théorique comme par exemple celle de champ moyen (qui est approximative) ou numérique avec un algorithme de Monte-Carlo quantique. La figure 3.5 présente le diagramme de phase dans le plan $(t/\mathcal{U}, \mu/\mathcal{U})$ du modèle de Bose-Hubbard en dimension $d = 2$ et à température nulle, obtenu notre algorithme de Monte-Carlo quantique et par une approche de champ moyen. On observe deux lobes de Mott pour $\rho = 1, 2$, entourés par la phase superfluide qui est aussi un condensat de Bose-Einstein pour cette dimension.

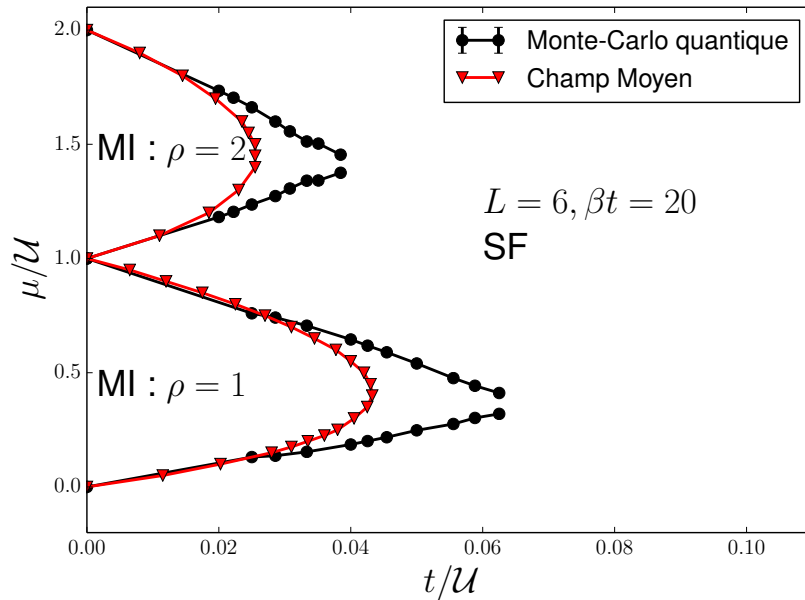


FIGURE 3.5 – Diagramme de phase du modèle de Bose-Hubbard bidimensionnel pour un système de taille $L = 6$, obtenu via des simulations de Monte-Carlo et en champ moyen. Les deux techniques sont en bon accord qualitatif.

Discutons maintenant des propriétés critiques de ce système. À densité entière (donc quand on fait une coupe du diagramme de phase en fonction de t/U à densité constante), la transition est uniquement gouvernée par les fluctuations de phase, et appartient à la classe d'universalité du modèle XY en dimension $d + 1$: la transition est alors du second ordre. Par contre, quand la transition est gouvernée par une modification de la densité, et donc du potentiel chimique, le comportement critique est différent. La transition est aussi du second ordre mais est dans la classe d'universalité du champ moyen, comme l'ont montré FISHER *et al.* par des arguments de *scaling* [Fisher 1989]. Le gap dans la phase de Mott diminue linéairement avec l'augmentation de t/U .

3.2.3 Extensions du modèle de Bose-Hubbard

Comme nous l'avons dit à de nombreuses reprises, le domaine des atomes ultra-froids sur réseaux optiques nous permet, expérimentalement, de modéliser des systèmes quantiques à N -corps dans une gamme de paramètres relativement large. Pourtant, le modèle de Bose-Hubbard avec des interactions sur site reste un modèle relativement basique et la liberté apportée par une approche numérique offre la possibilité d'étudier des modèles beaucoup plus complexes. Les récents progrès expérimentaux permettent d'ailleurs de confronter de mieux en mieux ces deux approches. Nous présentons ici succinctement différentes directions de sophistication, en développant deux d'entre elles qui nous intéressent plus particulièrement.

On peut par exemple ne pas se limiter à des interactions sur site et considérer des interactions entre bosons entre plus proches voisins, ou encore des interactions à portée infinie [Landig 2016], en utilisant des bosons ou des molécules dipolaires [Góral 2002]. Ici, de nouvelles phases pourront être adoptées par le système comme par exemple une onde de densité (CDW) où l'on observe une alternance entre sites vides et sites occupés, ou encore une phase supersolide où l'on observe simultanément un ordre diagonal et non diagonal à longue portée.

Étudier les phénomènes de localisation de type Anderson [Anderson 1958] est aussi d'un intérêt particulièrement important. Le désordre peut être réalisé expérimentalement via une autre onde stationnaire, dont la longueur d'onde est incommensurable avec le premier réseau optique (on parle cependant de quasi désordre) [Damski 2003] ou via un motif de tavelure (appelé *speckle*), qui utilise la diffusion d'ondes lumineuse par un milieu désordonné [Horak 1998].

Les progrès en matière de piégeage des atomes sur réseau (autre que magnéto-optique) ont permis de ne pas figer le spin des particules utilisées. Ainsi, considérer des particules bosoniques dotées de spins amène une richesse supplémentaire au système : le degré de liberté de spin entraîne l'émergence de magnétisme quantique, et permet donc d'étudier différentes phases magnétiques. Les bosons étant de spin entier, on s'intéressera par exemple au modèle de Bose-Hubbard de spin

1, en utilisant par exemple des atomes caractérisés par leur structure hyperfine $F = 1$ (comme le Rubidium). Ces bosons ont trois sous-niveaux dégénérés F_z qui prennent les valeurs $-1, 0, +1$. Cependant, d'un point de vue numérique, il peut s'avérer judicieux de simplifier grandement le problème, en couplant les deux états de spin $+1$ et -1 , qui ont des observables égales en moyenne [Krutitsky 2004]. Ce couplage est aussi possible expérimentalement, en utilisant encore une fois un laser [Mandel 2003]. Le système se réduit à des bosons ayant deux états internes effectifs, ce qui correspond donc à un spin $1/2$. En terme de pseudo-spin, on notera dans la suite les deux états possibles (\uparrow, \downarrow). Cette optique nous intéresse particulièrement dans le sens où ce chapitre concerne l'étude d'un modèle de Bose-Hubbard à deux espèces de bosons.

Enfin, nous pouvons aussi nous intéresser à des systèmes multi-bandes, où l'on ne se limitera pas à la première bande d'énergie dans le développement des relations 3.10 et 3.11, mais par exemple aux deux premières. Expérimentalement, on a désormais la possibilité de simuler de tels systèmes, et de stabiliser des particules dans différentes bandes [Müller 2007, Clément 2009, Wirth 2011]. Cela nous permet d'étudier la physique de systèmes ayant de nombreux degrés de liberté, comme les systèmes de Kondo.

3.3 Présentation du modèle

Le modèle de Kondo bosonique sur réseau, initialement introduit par DUAN [Duan 2004] constituera le coeur de notre étude tout au long de ce chapitre. Par rapport au modèle originel présenté dans la sous-section 3.1.2 (page 47), les électrons de conduction sont remplacés par des bosons de spin $1/2$, qui possèdent donc deux états internes que l'on notera (\uparrow, \downarrow). Ces bosons, qui ont la capacité de se mouvoir sur le réseau, ont une interaction répulsive sur site, et sont couplés de manière antiferromagnétique avec des impuretés elles aussi modélisées par des spins $1/2$. Le système peut être vu comme un système bicouche, où la première est occupée par les bosons mobiles, et la seconde par les spins qui sont fixes. Nous considérerons un réseau bidimensionnel carré contenant L^2 sites, où L est la longueur du réseau. Schématiquement, on peut représenter le modèle étudié par la figure 4.3 qui montre un système simplifié unidimensionnel.

La majeure partie des résultats de cette étude a été publiée dans la référence [Flottat 2015].

Nous rappelons que le modèle présenté ici diffère du modèle de Kondo originel sur plusieurs points :

- les particules évoluant sur le réseau sont des bosons et non pas des fermions,
- celles-ci ne sont pas libres mais interagissent entre elles,
- nous n'avons pas un petit nombre d'impuretés distribuées aléatoirement [Hewson 1993] mais un réseau d'impuretés [Fazekas 1991].

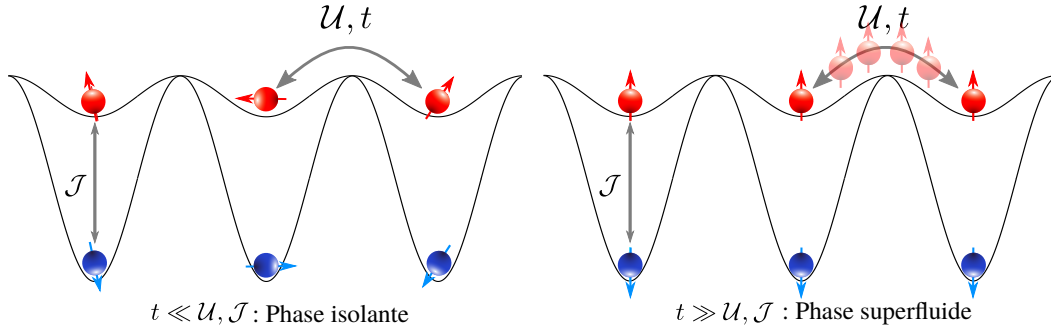


FIGURE 3.6 – Représentation du modèle étudié. Les bosons de spin 1/2 de la couche a (en rouge), peuvent se déplacer sur le réseau et sont sujet à une interaction répulsive sur site. Ils interagissent antiferromagnétiquement avec les spins 1/2 de la couche b (en bleu).

Reconsidérons tout d'abord le Hamiltonien donné par l'équation 3.8, décrivant des bosons en faible interaction dans un potentiel. Plaçons nous dans le cas où l'on considère des déplacements de bosons uniquement entre plus proches voisins, et des interactions uniquement sur site. Comme nous nous intéressons à un système bidimensionnel, le potentiel s'écrit $V(x, y, z) = V_{xy}(\mathbf{r}) + V_z(z)$, en faisant l'hypothèse que V_z est suffisamment profond pour que les particules ne puissent pas se déplacer dans cette direction. Aucune hypothèse n'est pour l'instant faite sur les différentes bandes énergétiques (notées par les indices a, b, c, d) prises en compte. Le Hamiltonien décrivant le système s'écrit :

$$\mathcal{H} = - \sum_{a,\sigma,\langle i,j \rangle} t_{a\sigma,\langle i,j \rangle} (a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,j} + \text{h.c.}) + \sum_{a,i} \frac{U_a}{2} n_{a,i} (n_{a,i} - 1) \quad (3.20)$$

$$+ \sum_{a>b,i} \mathcal{J}_{ab} n_{a,i} n_{b,i} + \sum_{a>b,i,\sigma\sigma'} \mathcal{J}_{ab} a_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma',i}^\dagger a_{\sigma',i} b_{\sigma,i} \quad (3.21)$$

$$+ \sum_{(a,b) \neq (c,d), i, \sigma\sigma'} \mathcal{W}_{abcd} a_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma',i}^\dagger c_{\sigma',i} d_{\sigma,i}. \quad (3.22)$$

Les différents paramètres sont donnés par :

$$t_{a\sigma,\langle i,j \rangle} = \int d^2\mathbf{r} w_a^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) w_a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (3.23)$$

$$\mathcal{U}_a = \frac{4\pi\hbar^2 a_d \chi}{m} \int d^2\mathbf{r} |w_a(\mathbf{r})|^4, \quad (3.24)$$

$$\mathcal{J}_{ab} = \frac{4\pi\hbar^2 a_d \chi}{m} \int d^2\mathbf{r} |w_a(\mathbf{r})|^2 |w_b(\mathbf{r})|^2, \quad (3.25)$$

$$\mathcal{W}_{abcd} = \frac{2\pi\hbar^2 a_d \chi}{m} \int d^2\mathbf{r} |w_a(\mathbf{r})| |w_b(\mathbf{r})| |w_c(\mathbf{r})| |w_d(\mathbf{r})|, \quad (3.26)$$

où $\chi = \int dz w_0^z(z)^4$, $w_0^z(z)$ étant le mode de Wannier de la plus basse bande d'énergie de V_z . Explicitons de nouveau les différents termes :

- Le premier terme de 3.20 décrit la capacité des bosons à se déplacer sur le réseau dans le plan (x, y) . $a_{\sigma,i}^\dagger$ crée un boson de spin σ dans un mode de Wannier de la a -ième bande de V_{xy} . Le deuxième terme de 3.20 est la répulsion sur site, pour la bande a , avec $n_{a,i} = \sum_\sigma n_{a\sigma,i} = \sum_\sigma a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,i}$.
- Les deux termes de 3.21 décrivent le couplage, sur site, entre une bande b et une bande a d'énergie supérieure. Le premier compte uniquement le nombre de particules sur site dans chacune de ces bandes, tandis que le deuxième décrit l'échange de spin entre deux particules appartenant à la bande a et b .
- Le terme de 3.22 décrit des processus de diffusion où le nombre de particules sur site est modifié, pour deux bandes données.

Dans la suite, nous faisons l'hypothèse qu'aucun processus de diffusion entraînant une modification des populations sur site n'intervient, nous pouvons donc supprimer le terme 3.22 du Hamiltonien. Nous nous restreignons à un système où l'on considère uniquement deux bandes énergétiques, b et a . La bande b est la bande d'énergie la plus basse, qui comporte une particule par site uniquement. On se place de plus dans le cas où le potentiel est suffisamment profond, de telle sorte que le nombre de particules par site ne fluctue pas, et que l'on se trouve dans un régime d'isolant de Mott pour cette bande. Les particules b sont donc complètement analogues aux impuretés modélisées par des spins que l'on a présentées dans la section 3.1 précédente (page 44). La bande a , plus haute en énergie, contient un nombre n_a de particules a par site qui est variable, les particules a sont analogues aux électrons de conduction du modèle originel. De plus, les différents $t_{a\sigma,\langle i,j \rangle}$ ne dépendent ni du spin ni du site considéré, donc $t_{a\sigma,\langle i,j \rangle} = t_a$.

Sous ces hypothèses, on obtient finalement le Hamiltonien de Kondo sur réseau

(KR), pour des particules bosoniques, qui s'écrit :

$$\mathcal{H}_{KR} = - t \sum_{\sigma, \langle i, j \rangle} \left(a_{\sigma, i}^\dagger a_{\sigma, j} + \text{h.c.} \right) \quad (3.27)$$

$$+ \frac{\mathcal{U}}{2} \sum_i n_{a, i} (n_{a, i} - 1) \quad (3.28)$$

$$+ 2\mathcal{J} \sum_i \mathbf{S}_{a, i} \cdot \mathbf{S}_{b, i}. \quad (3.29)$$

Le terme 3.27 décrit le saut des particules : l'opérateur $a_{\sigma, i}^\dagger$ ($a_{\sigma, i}$) crée (détruit) une particule a de spin σ (\uparrow, \downarrow) au site i . Le paramètre de saut t ($t_a = t$) fixe l'échelle d'énergie, et sera fixé à l'unité dans l'intégralité de ce chapitre.

Le terme 3.28 décrit la répulsion sur site pour les particules a , avec $n_{a, i} = \sum_\sigma n_{a\sigma, i} = \sum_\sigma a_{\sigma, i}^\dagger a_{\sigma, i}$ le nombre total de bosons a au site i , et \mathcal{U} ($\mathcal{U}_a = \mathcal{U}$) l'énergie de répulsion sur site.

Le dernier terme 3.29, qui correspond à l'interaction de Kondo, est un terme de couplage magnétique sur site, entre le moment magnétique des particules a et des spins b . La force de l'interaction de Kondo \mathcal{J} ($\mathcal{J}_{ab} = \mathcal{J}$) étant du même signe que a_d , il est aussi du même signe que \mathcal{U} et est donc positif. L'interaction entre les particules a et b sera donc de nature antiferromagnétique. $\mathbf{S}_{a, i} = (S_{a, i}^x, S_{a, i}^y, S_{a, i}^z)$ est l'opérateur vectoriel de spin des bosons, dont les composantes sont données par :

$$S_{a, i}^\alpha = \sum_{\sigma, \sigma'} a_{i, \sigma}^\dagger S_{\sigma, \sigma'}^\alpha a_{i, \sigma'}, \quad (3.30)$$

où les $S_{\sigma, \sigma'}^\alpha$ sont les trois matrices de Pauli. Les spins b sont aussi décrits par ces matrices $\mathbf{S}_{b, i} = (S_{b, i}^x, S_{b, i}^y, S_{b, i}^z)$.

Le Hamiltonien de Kondo sur réseau peut se réécrire, en utilisant uniquement les opérateurs d'échelle, sous la forme :

$$\mathcal{H}_{KR} = - t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} \left(a_{i, \sigma}^\dagger a_{j, \sigma} + \text{h.c.} \right) \quad (3.31)$$

$$+ \frac{\mathcal{U}}{2} \sum_i n_{a, i} (n_{a, i} - 1) \quad (3.32)$$

$$+ \frac{\mathcal{J}}{2} \sum_i (n_{a\uparrow, i} n_{b\uparrow, i} + n_{a\downarrow, i} n_{b\downarrow, i} - n_{a\uparrow, i} n_{b\downarrow, i} - n_{a\downarrow, i} n_{b\uparrow, i})$$

$$+ \mathcal{J} \sum_i \left(a_{\uparrow, i}^\dagger a_{\downarrow, i} b_{\downarrow, i}^\dagger b_{\uparrow, i} + a_{\downarrow, i}^\dagger a_{\uparrow, i} b_{\uparrow, i}^\dagger b_{\downarrow, i} \right). \quad (3.33)$$

Intéressons nous maintenant aux différentes propriétés de ce Hamiltonien. Tout comme celui de Bose-Hubbard, \mathcal{H}_{KR} est invariant par symétrie de jauge globale

$U(1)$, ce qui implique que la transformation $a^{(\dagger)} \rightarrow a^{(\dagger)} e^{(-)i\theta}$ laisse \mathcal{H}_{KR} inchangé. Le nombre de particules N au sein d'un système gouverné par \mathcal{H}_{KR} est conservé : $[N, \mathcal{H}_{KR}] = 0$. Ainsi, nous nous attendons donc à observer un comportement similaire, du moins qualitativement, à celui du modèle de Bose-Hubbard traditionnel : un régime de paramètres dans lequel le système adopte une phase isolante, avec un nombre entier de particule par site, et un régime dans lequel le système adopte une phase superfluide qui est condensée étant donnée la bidimensionnalité du système. Ensuite, il est aussi invariant par symétrie $SU(2)$, ce qui signifie que, tout comme le Hamiltonien de Heisenberg, le spin total est une quantité conservée et $[\mathbf{S}^2, \mathcal{H}_{KR}] = 0$. Ainsi, toute la richesse de ce système, par rapport au modèle de Bose-Hubbard traditionnel, réside dans le terme 3.29 du Hamiltonien, qui couple le degré de liberté du spin des particules a et b . Notre but sera d'étudier l'impact de ce terme sur le diagramme de phase du système, ainsi que sur les propriétés de transport et magnétiques.

Ce modèle a précédemment été étudié dans les références [Duan 2004, Foss-Feig 2011]. FOSS-FEIG *et al.* ont obtenu des résultats basés sur une approche perturbative dans une limite de faibles ($t/\mathcal{U} \gg 1$) et de fortes ($t/\mathcal{U} \ll 1$) interactions. Cependant, dans un régime intermédiaire, ils obtiennent des résultats approchés par une théorie de champ moyen. Pour une particule par site, ils prédisent une transition du premier ordre entre un isolant de Mott et une phase superfluide quand $\mathcal{J}/\mathcal{U} < 0.1$ en modulant t/\mathcal{U} . Dans la phase isolante, ils observent un nuage de singulets bosons/spins, et aucun ordre magnétique à longue portée n'est observé. La phase superfluide, quant à elle, exhibe un ordre ferromagnétique à longue portée, dans la couche a comme dans la couche b . Pour une densité $\rho_a \geq 2$, la phase isolante est déjà ferromagnétique tandis que la transition devient du second ordre.

Le but de notre étude sera d'infirmer ou de confirmer ces résultats, ainsi que de les approfondir. En effet, la théorie de champ moyen donne accès à des quantités qui sont évidemment essentielles mais pourtant limitées. Notre étude se basera sur l'utilisation de l'algorithme des Fonctions de Green Stochastiques (SGF) présenté à la sous-section 2.3.3 du chapitre 2 (page 36), qui nous fournit des résultats numériquement exacts, et qui nous permet de calculer les fonctions de Green à N -corps. Nous avons la liberté de travailler dans l'ensemble canonique ou grand-canonique. Le nombre de particules étant conservé, nous nous placerons préférentiellement dans l'ensemble canonique et nous ferons quelques analyses complémentaires dans l'ensemble grand-canonique.

3.4 Analyse exacte à \mathcal{J}/\mathcal{U} fixé

Nous explorons dans cette section le diagramme de phase ainsi que les propriétés de phase de notre système, à température nulle tout d'abord.

Nous étudierons des systèmes de tailles $L = 6, 8, 10$: au delà, les temps de simulations deviennent beaucoup trop importants¹. Nous ferons une étude complète du cas $\mathcal{J}/\mathcal{U} = 0.05$, puis nous comparerons certains résultats pour d'autres ratios, en nous restreignant à une taille $L = 6$.

Ensuite, nous étudierons l'influence de la température sur la persistance des différents comportements qu'exhibe le système à température nulle (ordre à longue portée, propriétés de transport et magnétiques). Diminuer β nous permettra d'étudier des systèmes de tailles supérieures ($L = 12, 14$), par la diminution des temps de simulations pour une taille donnée, ce qui nous permettra d'obtenir des résultats d'une meilleure précision.

3.4.0.1 Plan systématique d'une étude complète

L'étude du système sera déduite de l'analyse des quantités ou données présentés ci-dessous :

- Diagramme de phase dans le plan $(t/\mathcal{U}, \mu/\mathcal{U})$, afin de définir les zones isolantes et superfluides. Comme nous travaillerons généralement dans l'ensemble canonique, à $T = 0$, on obtient aisément le potentiel chimique par la différence d'énergie $\mu(N_a) = E(N_a + 1) - E(N_a)$, où N_a est le nombre de bosons a . Cela nous permet de définir les limites des lobes de Mott pour différentes densités ρ ($\rho = \rho_a, \rho_b$ étant fixé à l'unité), en calculant l'énergie du système avec $N_a = \rho L^2, \rho L^2 + 1$, et $\rho L^2 - 1$ particules a .
- Fonctions de Green à un corps pour les bosons et les spins. Ces fonctions renseignent sur les corrélations qui existent dans le système. Leur évolution en fonction de la distance R donne une signature claire de la phase adoptée par le système. Dans un système bidimensionnel à symétrie continue, nous nous attendons à observer une décroissance exponentielle dans la phase isolante, incohérente, ce qui valide l'absence d'ordre à longue portée. Dans la phase cohérente, nous nous attendons à observer une saturation des valeurs de ces fonctions à un plateau, ce qui témoigne d'une cohérence de phase parfaite et donc d'un système qui adopte une phase condensée de Bose-Einstein.

$$\mathcal{G}_{a_\sigma^\dagger a_\sigma}(R) = \frac{1}{2L^2} \sum_i \langle a_{i,\sigma}^\dagger a_{i+R,\sigma} + \text{h.c.} \rangle, \quad (3.34)$$

$$\mathcal{G}_{b_\sigma^\dagger b_\sigma}(R) = \frac{1}{2L^2} \sum_i \langle b_{i,\sigma}^\dagger b_{i+R,\sigma} + \text{h.c.} \rangle. \quad (3.35)$$

L'expression 3.34 représente la valeur moyenne de la probabilité de détruire une particule a de spin σ au site i et de la recréer à une distance R . L'expression 3.35 représente la même chose, mais pour les spins b . Cependant,

1. Neuf jours pour $L = 10$

la couche b étant strictement équivalente à une phase de Mott, nous nous attendons à ce que cette fonction soit nulle dans tous les cas de figure.

- Fonctions de Green à deux corps pour les bosons et/ou les spins. De la même manière, ces grandeurs donnent des renseignements sur les corrélations qui s'établissent, ou non, au sein du système. Ces renseignements peuvent s'avérer beaucoup plus pertinents dans la caractérisation des différentes phases, car on peut obtenir des informations sur des déplacements mettant en jeu quatre particules, mais aussi à des échanges de spins à longue distance (ce qui correspond physiquement à des retournements de spins sur site).

$$\mathcal{G}_{a_\sigma^\dagger a_\sigma^\dagger a_\sigma a_\sigma}(R) = \frac{1}{2L^2} \sum_i \langle a_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma}^\dagger a_{i+R,\sigma} a_{i+R,\sigma} + \text{h.c.} \rangle, \quad (3.36)$$

$$\mathcal{G}_{a_\uparrow^\dagger a_\downarrow^\dagger a_\uparrow a_\downarrow}(R) = \frac{1}{2L^2} \sum_i \langle a_{i,\uparrow}^\dagger a_{i,\downarrow}^\dagger a_{i+R,\uparrow} a_{i+R,\downarrow} + \text{h.c.} \rangle, \quad (3.37)$$

$$\mathcal{G}_{a_\uparrow^\dagger a_\downarrow^\dagger a_\uparrow a_\downarrow}(R) = \frac{1}{2L^2} \sum_i \langle a_{i,\uparrow}^\dagger a_{i,\downarrow}^\dagger a_{i+R,\uparrow} a_{i+R,\downarrow} + \text{h.c.} \rangle, \quad (3.38)$$

$$\mathcal{G}_{b_\uparrow^\dagger b_\downarrow^\dagger b_\uparrow b_\downarrow}(R) = \frac{1}{2L^2} \sum_i \langle b_{i,\uparrow}^\dagger b_{i,\downarrow}^\dagger b_{i+R,\uparrow} b_{i+R,\downarrow} + \text{h.c.} \rangle, \quad (3.39)$$

$$\mathcal{G}_{a_\uparrow^\dagger a_\downarrow^\dagger b_\uparrow b_\downarrow}(R) = \frac{1}{2L^2} \sum_i \langle a_{i,\uparrow}^\dagger a_{i,\downarrow}^\dagger b_{i+R,\uparrow} b_{i+R,\downarrow} + \text{h.c.} \rangle. \quad (3.40)$$

Les fonctions 3.36 et 3.37 représentent respectivement des déplacements corrélés de deux particules a de même spin ou de spins différents.

Les fonctions 3.38, 3.39 et 3.40 représentent des déplacements anticorrélés qui décrivent des échanges de spins à longues distance. 3.38 correspond à la valeur moyenne de la probabilité du processus qui détruit (crée) une particule a de spin σ (σ') au site i et la recrée (détruit) à une distance R , 3.39 à la même chose mais pour les particules b , tandis que 3.40 correspond à la valeur moyenne de la probabilité du processus qui détruit (crée) une particule b de spin σ (σ') au site i et recrée (détruit) une particule a de même spin à une distance R . Il s'agit en fait de processus de retournement de spin sur site. Les figures 3.7 et 3.8 représentent schématiquement les processus de certaines fonctions de Green.

- La densité superfluide ρ_s , donnée par la relation

$$\rho_s = \frac{\langle (W_\uparrow + W_\downarrow)^2 \rangle}{4t\beta}, \quad (3.41)$$

où W_σ , winding number des bosons de spin σ , est une quantité topologique, qui compte le nombre de fois où les lignes d'univers traversent le système dans ses dimensions spatiales lors de son évolution en temps imaginaire (voir page 35 du chapitre 2). Cette quantité nous donne des renseignements sur la cohérence du déplacement des particules a , et passera d'une valeur

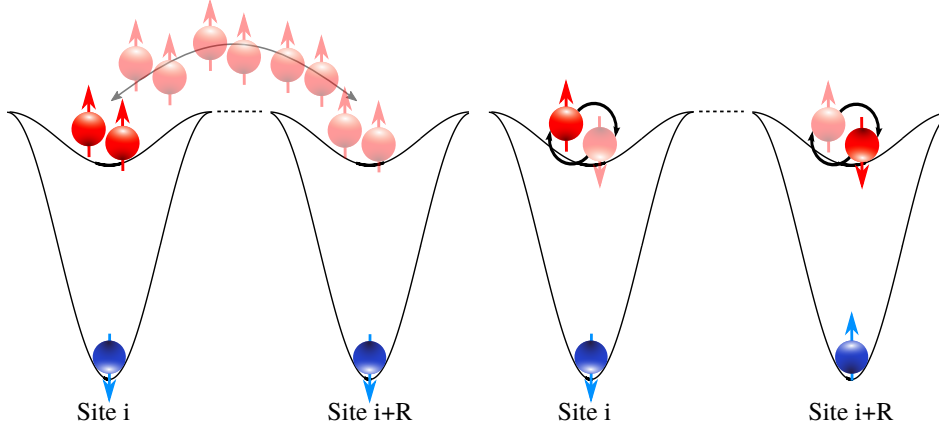


FIGURE 3.7 – À gauche, représentation du processus de la fonction de Green 3.36, et à droite de 3.38.

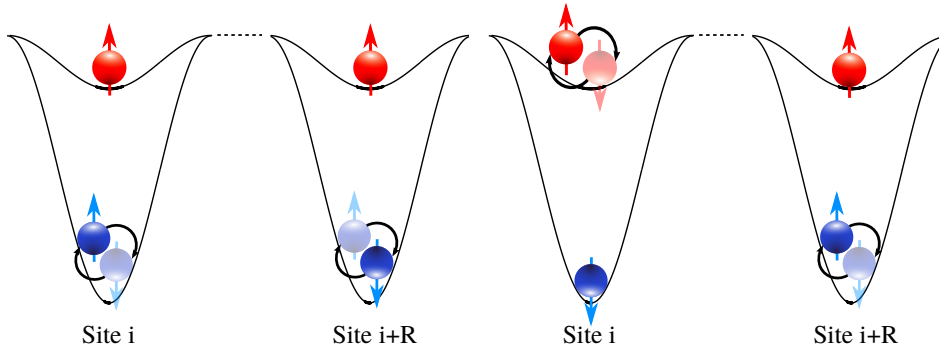


FIGURE 3.8 – À gauche, représentation du processus de la fonction de Green 3.39, et à droite de 3.40.

minimale nulle dans la phase isolante, à une valeur non nulle dans la phase superfluide dans laquelle les particules a se déplacent de manière cohérente.

- La fraction condensée $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$, correspondant à la transformée de Fourier de la somme sur le spin des fonctions de Green (3.34 et 3.35) à un corps d'impulsion nulle :

$$\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0}) = \sum_{R,\sigma} \mathcal{G}_{a^\dagger a_\sigma}(R)/L^2. \quad (3.42)$$

En deux dimensions, la fraction condensée aura le même comportement qualitatif que la densité superfluide, étant donné que dans un régime de faibles interactions, le système développe une phase condensée.

Ces deux dernières grandeurs nous intéressent pour deux raisons. Tout d'abord, une analyse de taille finie va nous permettre de mieux localiser la transition entre la phase isolante et la phase superfluide. De plus, l'évolution va nous permettre d'établir l'ordre de la transition : une évolution continue

de ces grandeurs correspondra à une transition du second ordre, tandis qu'une évolution discontinue attestera d'une transition du premier ordre.

- Corrélations densités-densités, intra-espèces et inter-espèces. Ces grandeurs donnent des informations sur l'ordre spatial du système, afin de savoir si on est en présence d'une onde de densité (ordre en échiquier), ou alors d'une phase homogène. Ces grandeurs nous permettent aussi de reconstruire des fonctions de corrélations magnétiques.

$$\mathcal{C}_{\alpha_{\uparrow}^{\dagger}\alpha_{\uparrow}\alpha_{\uparrow}^{\dagger}\alpha_{\uparrow}'} = \frac{1}{L^2} \sum_i \langle \alpha_{\uparrow,i}^{\dagger} \alpha_{\uparrow,i} \alpha_{\uparrow,i+R}^{\dagger} \alpha_{\uparrow,i+R}' + \text{h.c.} \rangle, \quad (3.43)$$

$$\mathcal{C}_{\alpha_{\downarrow}^{\dagger}\alpha_{\downarrow}\alpha_{\downarrow}^{\dagger}\alpha_{\downarrow}'} = \frac{1}{L^2} \sum_i \langle \alpha_{\downarrow,i}^{\dagger} \alpha_{\downarrow,i} \alpha_{\downarrow,i+R}^{\dagger} \alpha_{\downarrow,i+R}' + \text{h.c.} \rangle, \quad (3.44)$$

$$\mathcal{C}_{\alpha_{\uparrow}^{\dagger}\alpha_{\uparrow}\alpha_{\downarrow}^{\dagger}\alpha_{\downarrow}'} = \frac{1}{L^2} \sum_i \langle \alpha_{\uparrow,i}^{\dagger} \alpha_{\uparrow,i} \alpha_{\downarrow,i+R}^{\dagger} \alpha_{\downarrow,i+R}' + \text{h.c.} \rangle. \quad (3.45)$$

Où $\alpha, \alpha' = a$ ou b , dénotant la corrélation intra-espèces ou inter-espèces.

- Corrélations spin-spin totales, intra-espèces et inter-espèces :

$$S_{aa}(R) = \frac{1}{L^2} \sum_i \langle \mathbf{S}_{a,i} \cdot \mathbf{S}_{a,i+R} \rangle, \quad (3.46)$$

$$S_{bb}(R) = \frac{1}{L^2} \sum_i \langle \mathbf{S}_{b,i} \cdot \mathbf{S}_{b,i+R} \rangle, \quad (3.47)$$

$$S_{ab}(R) = \frac{1}{L^2} \sum_i \langle \mathbf{S}_{a,i} \cdot \mathbf{S}_{b,i+R} \rangle. \quad (3.48)$$

Avec $\langle \mathbf{S}_{\alpha,i} \cdot \mathbf{S}_{\alpha',i+R} \rangle = \langle S_{\alpha,i}^x S_{\alpha',i+R}^x + S_{\alpha,i}^y S_{\alpha',i+R}^y + S_{\alpha,i}^z S_{\alpha',i+R}^z \rangle$, que l'on peut réécrire en terme d'opérateur d'échelle :

$$\begin{aligned} \frac{1}{L^2} \sum_i (S_{\alpha,i}^x S_{\alpha',i+R}^x + S_{\alpha,i}^y S_{\alpha',i+R}^y) &= \frac{1}{2L^2} \sum_i \langle \alpha_{i,\uparrow}^{\dagger} \alpha_{i,\downarrow} \alpha_{i+R,\uparrow}^{\dagger} \alpha_{i+R,\downarrow}' + \text{h.c.} \rangle, \\ &= \mathcal{G}_{\alpha_{\uparrow}^{\dagger}\alpha_{\downarrow}\alpha_{\uparrow}^{\dagger}\alpha_{\downarrow}'}(R), \end{aligned} \quad (3.49)$$

$$\frac{1}{L^2} \sum_i (S_{\alpha,i}^z S_{\alpha',i+R}^z) = \mathcal{C}_{\alpha_{\uparrow}^{\dagger}\alpha_{\uparrow}\alpha_{\uparrow}^{\dagger}\alpha_{\uparrow}'} + \mathcal{C}_{\alpha_{\downarrow}^{\dagger}\alpha_{\downarrow}\alpha_{\downarrow}^{\dagger}\alpha_{\downarrow}'} - 2\mathcal{C}_{\alpha_{\uparrow}^{\dagger}\alpha_{\uparrow}\alpha_{\downarrow}^{\dagger}\alpha_{\downarrow}'} \quad (3.50)$$

On peut donc reconstruire les corrélations spin-spin totales très facilement : les corrélations dans le plan (x, y) sont données par la fonction de Green à deux corps (3.38), et les corrélations selon l'axe z sont obtenues par une combinaison linéaire de différentes fonctions de corrélation densité-densité.

- Spin total, $\mathbf{S}_{\text{tot}} = \sum_i (\mathbf{S}_{a,i} + \mathbf{S}_{b,i})$, dont l'expression est donnée par la somme des différentes fonctions de corrélations spin-spin précédentes :

$$\mathbf{S}_{\text{tot}}^2 = \sum_R [S_{aa}(R) + 2S_{ab}(R) + S_{bb}(R)].$$

3.4.0.2 Choix de β

Comme nous l'avons dit en début de section, nous nous intéresserons notamment au système dans une limite de température nulle, afin d'étudier uniquement l'influence des fluctuations quantiques sur la thermodynamique du système. Il paraît logique de travailler avec des valeurs de β les plus grandes possibles. L'augmentation de β requiert toutefois d'augmenter les temps de calculs. Il faut donc trouver un compromis entre la diminution de la température et l'augmentation de temps de calcul, qui va tout de même nous permettre de négliger les effets thermiques.

Lorsque l'on se place à une valeur de β définie telle que $\beta = 2L/t$ (avec L la taille du système), cette limite est généralement atteinte.

Cependant, il faut faire attention au choix de β quand on est dans une limite de forte interaction, où $\mathcal{U} \gg t$. En effet, le Hamiltonien \mathcal{H}_{KR} devient équivalent à, après un traitement perturbatif au second ordre en t [Foss-Feig 2011],

$$\mathcal{H}_{sc} = -f(\rho) \frac{t^2}{\mathcal{U}} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (3.51)$$

avec

$$f(\rho) = \frac{4\rho + 8}{(\rho + 1)^2} \left(\frac{\mathcal{J}(\rho + 1)^2 + \mathcal{U}(\rho + 2)^2}{\mathcal{J}\rho + \mathcal{U}} \right), \quad (3.52)$$

ce qui introduit une nouvelle échelle d'énergie qui sera d'autant plus petite que \mathcal{U} sera grand. Lorsque $1/\beta \simeq f(\rho)t^2/\mathcal{U}$, les effets thermiques ne seront plus négligeables et auront une influence sur les différentes observables calculées par l'algorithme.

Ainsi, β sera choisi de telle sorte que $1/\beta \ll t, \mathcal{U}, \mathcal{J}, t^2/\mathcal{U}$. Dans l'analyse suivante, nous prendrons $\beta t = 20$ pour $L = 6, 8$, et $\beta t = 25$ pour $L = 10$, que nous augmenterons lorsque nous nous intéresserons à des valeurs extrêmes de \mathcal{U} .

Lorsque l'on étudiera l'influence des effets thermiques, nous fixerons tous les paramètres $(t, \mathcal{U}, \mathcal{J})$, et nous suivrons l'évolution des différentes observables en faisant varier βt de 25 à 0.15 généralement.

3.4.1 Diagramme de phase

Nous présentons tout d'abord le diagramme de phase dans le plan $(t/\mathcal{U}, \mu/\mathcal{U})$ à $kT = 0$, pour une valeur de \mathcal{J}/\mathcal{U} fixée à 0.05 (Fig. 3.9), obtenu avec notre algorithme de Monte-Carlo quantique, dans l'ensemble canonique. Nous partirons d'un point de départ non polarisé, c'est à dire que $N_{a\uparrow} = N_{a\downarrow}$, et nous ferons varier de l'unité les population de $N_{a\downarrow}$, avec $N_{a\sigma}$ le nombre total de particule a de spin σ . Ce choix n'a aucune incidence sur l'évolution du système, étant donné que S_z^a (aimantation selon l'axe z pour les particules a) n'est pas une quantité conservée, l'état final sera exactement le même.

La figure 3.9 montre le diagramme de phase, où l'on retrouve les lobes de Mott pour $\rho = 1$ et $\rho = 2$, et en dehors des lobes une phase superfluide, qui est aussi un condensat de Bose-Einstein. Le premier lobe de Mott est paramagnétique, tandis que le reste du diagramme a un comportement ferromagnétique. Nous reviendrons sur le détail de l'étude des propriétés magnétiques du système dans la sous-section 3.4.3 (page 76).

En pointe de lobe, la transition survient à une valeur critique de $t/U_c \simeq 0.08$ pour $\rho = 1$ et $t/U_c \simeq 0.04$ pour $\rho = 2$. Dans la limite où $t = 0$, une diagonalisation exacte du Hamiltonien nous permet de définir analytiquement les limites des lobes de Mott avec $\mu_{0 \rightarrow 1} = -3V/2$, $\mu_{1 \rightarrow 2} = U - V/2$, $\mu_{2 \rightarrow 3} = 2U - V/2$, où $\mu_{\rho \rightarrow \rho+1}$ correspond à la valeur où la densité passe de ρ à $\rho + 1$.

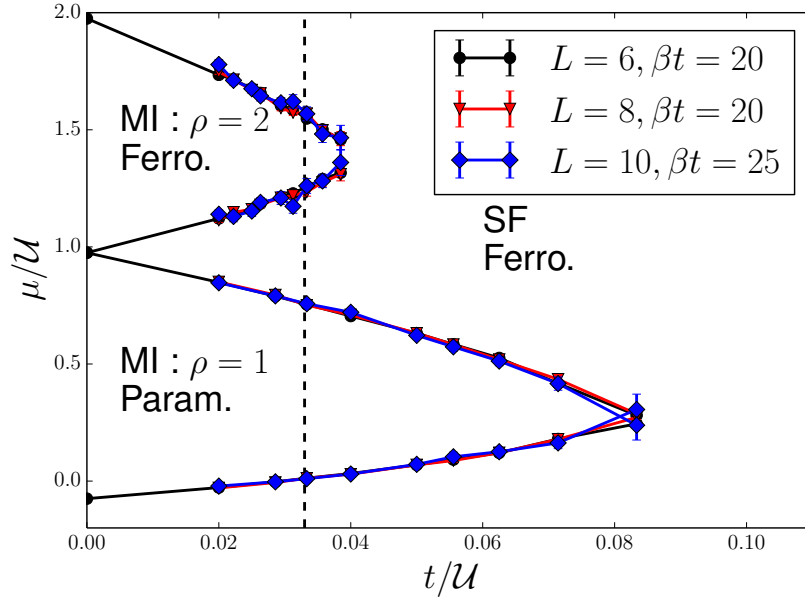


FIGURE 3.9 – Diagramme de phase pour des systèmes de taille $L = 6, 8, 10$. La phase de Mott à $\rho = 1$ est paramagnétique tandis que les autres sont ferromagnétiques. La ligne en pointillés correspond à la coupe de la figure 3.17.

La première chose intéressante est de comparer ce diagramme de phase à celui du modèle de Bose-Hubbard traditionnel. La figure 3.10 montre des diagrammes pour des rapports $\mathcal{J}/U = 0, 0.05$ et 0.1 . Comme nous l'attendions, les lobes de Mott occupent une zone de l'espace des paramètres d'autant plus importante que \mathcal{J}/U est élevé : en effet, l'interaction de Kondo renforce le comportement isolant du système par la création de singulets entre particules a et b .

Pour $\mathcal{J} = 0$, la pointe du lobe de Mott à $\rho = 1$ se situe à $t/U_c \simeq 0.06$, pour $\mathcal{J}/U = 0.05$, elle se trouve à $t/U_c \simeq 0.08$, et enfin pour $\mathcal{J}/U = 0.1$, la transition se trouve à $t/U_c \simeq 0.09$, comme le montre la figure 3.10. Ainsi, plus \mathcal{J}/U augmente, plus la transition se décalera à de grandes valeurs de t/U . On observe cette tendance pour $\rho = 1$ et $\rho = 2$, bien qu'elle soit bien plus

marquée pour $\rho = 1$. En effet, la largeur du lobe de Mott à $t/U = 0$ pour $\rho = 1$ est directement proportionnelle à \mathcal{J} , tandis que pour $\rho = 2$, celle-ci ne dépend que de \mathcal{U} .

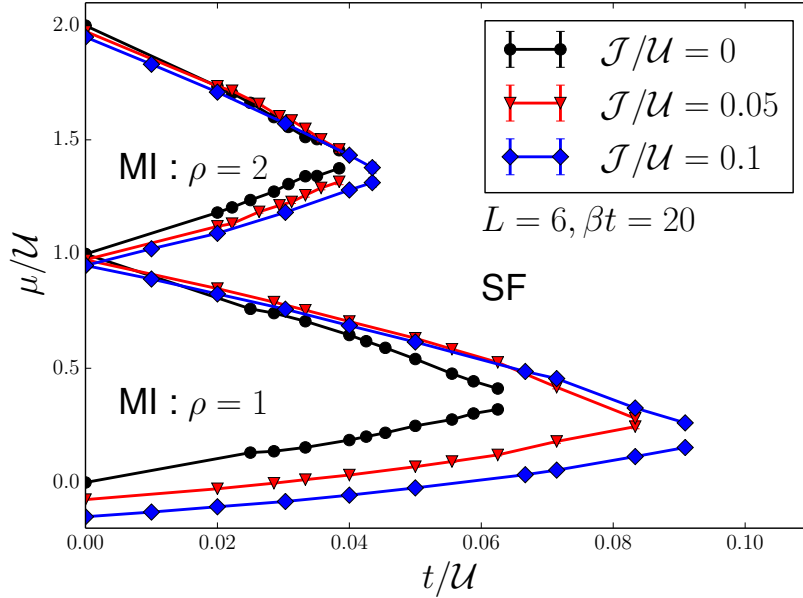


FIGURE 3.10 – Diagramme de phase pour des systèmes de taille $L = 6$, pour différentes valeurs de $\mathcal{J}/\mathcal{U} = 0, 0.05, 0.1$. L'interaction Kondo renforce le caractère isolant du système : les phases de Mott occupent une place plus importante dans le plan $(t/U, \mu/U)$. Les barres d'erreurs sont de la taille des symboles. Les valeurs critiques des transitions peuvent sembler sous-estimées : il s'agit en fait d'effets de taille finie, qui sont corrigés après extrapolation en $1/L \rightarrow 0$.

Afin de caractériser plus en détails les propriétés des différentes phases de notre système, il convient d'analyser le comportement des fonctions de Green en fonction de la distance, pour $\rho = 1$ puis pour $\rho = 2$.

3.4.1.1 Densité $\rho = 1$

Quand le système adopte une phase de Mott, les différentes fonctions de Green tombent immédiatement à zéro avec la distance : il n'y a pas de cohérence de phase (voir Fig. 3.11 (a) et (c)), comportement que nous attendions pour toutes les fonctions de Green que l'algorithme SGF calcule. Dans la limite où $t = 0$, afin de minimiser son énergie, le système adopte une configuration dans laquelle les moments magnétiques des bosons et des spins se couplent afin de former un singulet sur chaque site. Le système est figé et échanger des bosons entre différents sites est impossible. Ce comportement est aussi vérifié en dehors de cette limite $t = 0$, comme en témoigne la valeur non-nulle de $\mathcal{G}_{a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\downarrow} b_{\uparrow} b_{\downarrow}^{\dagger}}(0) \simeq -0.5$, qui est une

quantité sur site, et qui témoigne directement de la présence d'un singulet.

Dans la phase superfluide, (Fig. 3.11 (b) et (d)), toutes les fonctions de Green saturent à une valeur non nulle ce qui traduit un ordre à longue distance. Cet ordre témoigne de la délocalisation des particules a au sein du réseau et que le système présente une phase condensée. La valeur des plateaux atteinte par ces différentes fonctions nous permet aussi de dire que les mouvements à un corps sont les mouvements prépondérants dans la délocalisation des particules a . En effet, la valeur atteinte par $\mathcal{G}_{a_{\uparrow}^{\dagger}a_{\uparrow}}(R)$ et $\mathcal{G}_{a_{\downarrow}^{\dagger}a_{\downarrow}}(R)$ ($\simeq 0.3$) est supérieure à celles atteintes par toutes les autres fonctions de Green. De même, la valeur non nulle de $\mathcal{G}_{a_{\uparrow}^{\dagger}a_{\downarrow}a_{\downarrow}a_{\uparrow}^{\dagger}}(R)$ montre que les mouvements d'échange anticorrélés participent en partie à la délocalisation des particules (valeur saturant à environ 0.2), contrairement aux mouvements à deux corps corrélés $\mathcal{G}_{a_{\sigma}^{\dagger}a_{\sigma}^{\dagger}a_{\sigma}a_{\sigma}}(R)$ qui n'interviennent que très peu au sein de la phase cohérente (valeurs tombant rapidement à 0). $\mathcal{G}_{b_{\uparrow}^{\dagger}b_{\downarrow}b_{\downarrow}b_{\uparrow}^{\dagger}}(R)$ est aussi non nulle, ce qui montre que les spins b sont corrélés. Cependant, cette corrélation n'est pas le résultat d'une interaction directe, étant donné qu'il n'en existe aucune entre les spins b . Celle-ci provient du mouvement des bosons itinérants a , qui assurent la médiation d'une interaction effective entre les moments magnétiques des spins. Elle trouve en fait son origine dans un mécanisme complexe analogue à l'interaction RKKY que nous avons expliqué dans la section 3.1.2 (page 47). Le cas bosonique diffère du cas fermionique dans le sens où le signe de l'interaction n'oscille pas, il s'établit un ordre ferromagnétique dans la couche b . Ceci est confirmé par la valeur non-nulle de $\mathcal{G}_{a_{\uparrow}^{\dagger}a_{\downarrow}b_{\uparrow}b_{\downarrow}^{\dagger}}$, qui est aussi négative. Cette négativité atteste du couplage antiferromagnétique entre espèces a et b qui perdure à longue distance, tandis que les valeurs positives de $\mathcal{G}_{a_{\uparrow}^{\dagger}a_{\downarrow}a_{\downarrow}a_{\uparrow}^{\dagger}}(R)$ et $\mathcal{G}_{b_{\uparrow}^{\dagger}b_{\downarrow}b_{\downarrow}b_{\uparrow}^{\dagger}}(R)$ témoignent du couplage ferromagnétique intra-espèces (nous rappelons que ces fonctions de Green correspondent directement à l'aimantation dans le plan (x, y)).

3.4.1.2 Densité $\rho = 2$

Dans le cas de deux particules par site, la phase de Mott se comporte relativement différemment du cas $\rho = 1$ (Fig. 3.12 (a) et (c)). Les fonctions de Green à un et deux corps, décrivant des déplacements de particules a tombe encore rapidement à zéro avec la distance : le mouvement des particules a est encore supprimé. Par contre, $\mathcal{G}_{a_{\uparrow}^{\dagger}a_{\downarrow}a_{\downarrow}a_{\uparrow}^{\dagger}}(R)$ est non nulle même à longue distance : les mouvements d'échange de spin sont présents. En effet, dans une limite où $t/\mathcal{U} = 0$, l'état fondamental est fortement dégénéré, dégénérescence qui sera levée pour $t/\mathcal{U} \neq 0$ où les différents états sur site, formé par un singulet et un boson libre (de spin \uparrow ou \downarrow) ont la même énergie. Effectuer des *spin flip* sur site (ou échanger des spins à longue distance) permet donc de minimiser l'énergie cinétique du Hamiltonien. Ce type d'échange correspond à un certain type de densité superfluide, que l'on appellera superfluidité anticorrélée (ou encore superfluidité à contre courant). Ce comportement est typique dans les mélanges de bosons, et avait été prédit par SVISTUNOV et

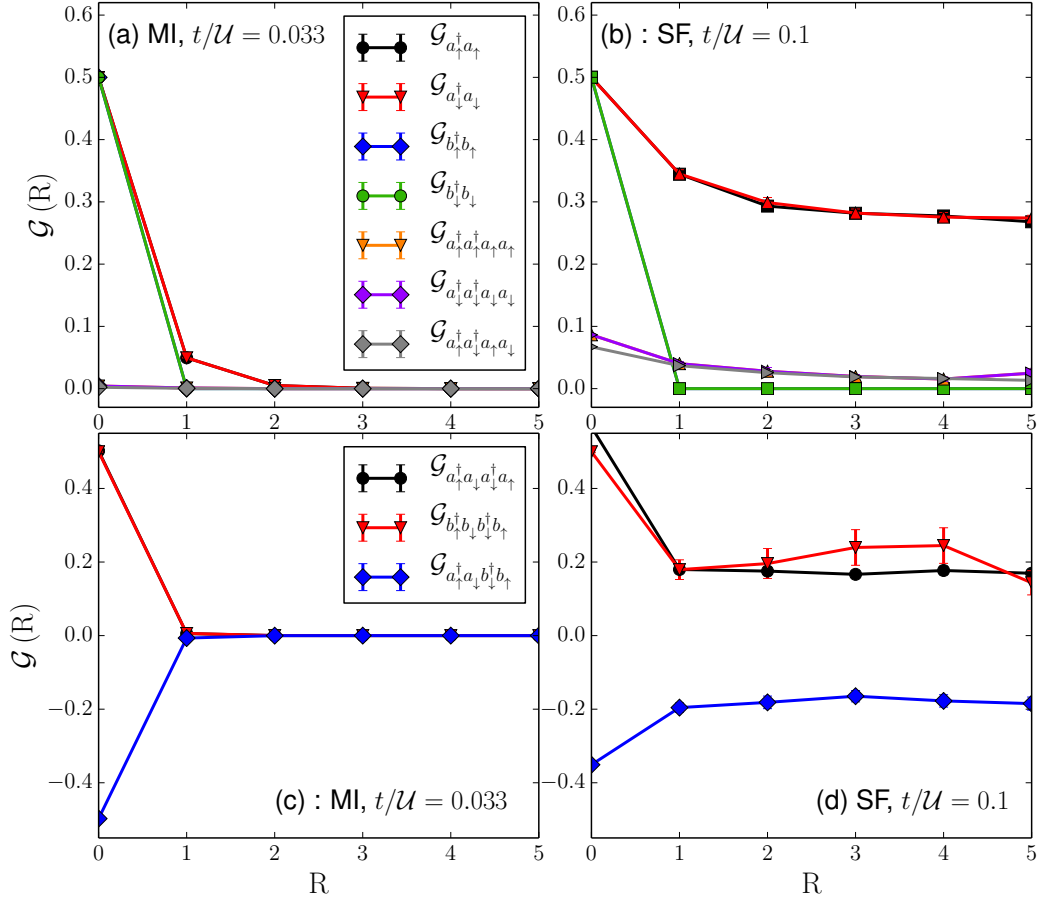


FIGURE 3.11 – Fonctions de Green à un et deux corps et d’échange de spin en fonction de la distance R dans la phase isolante ((a) et (c)) et dans la phase superfluide ((b) et (d)) pour $\rho = 1$. Dans la phase de Mott, les mouvements de particules et d’échange de spin sont inexistant du fait de la formation de singulet. Dans la phase superfluide, tous les types de mouvements sont présents, mouvements de particules aussi bien que mouvements d’échanges de spin.

KUKLOV03 [Kuklov 2003]. On observe donc un ordre ferromagnétique s’établissant dans le plan (x, y) en dépit du caractère isolant de cette phase, qui est similaire à celui de la phase superfluide. Cette superfluidité anticorrélée avait aussi été observée [de Forges de Parney 2011], mais pour $\rho = 1$ et pour un modèle de Bose-Hubbard avec conversion de spin. La différence ici est que la phase de Mott de densité 1 est figée dans son état de singulet sur site, ce qui n’autorise pas de mouvements anticorrélés.

Qualitativement, la phase superfluide à $\rho = 2$ se comporte comme celle de densité 1. De par les valeurs atteintes par $\mathcal{G}_{a_{\uparrow}a_{\downarrow}a_{\downarrow}a_{\uparrow}}(R)$, la délocalisation des particules provient plutôt des mouvements anticorrélés des bosons a , alors qu’elle provenait

surtout des mouvements individuels pour $\rho = 1$. En effet, $\mathcal{G}_{a_{\uparrow}^{\dagger}a_{\downarrow}a_{\downarrow}a_{\uparrow}^{\dagger}}(R)$ sature à une valeur de à environ 0.9 tandis que $\mathcal{G}_{a_{\uparrow}^{\dagger}a_{\uparrow}}(R)$ et $\mathcal{G}_{a_{\downarrow}^{\dagger}a_{\downarrow}}(R)$ atteignent une valeur de à environ 0.7. De même, les fonctions de Green à deux corps corrélés, interviennent de manière plus marquée dans la délocalisation des particules a (plateaux saturants à à environ 0.2).

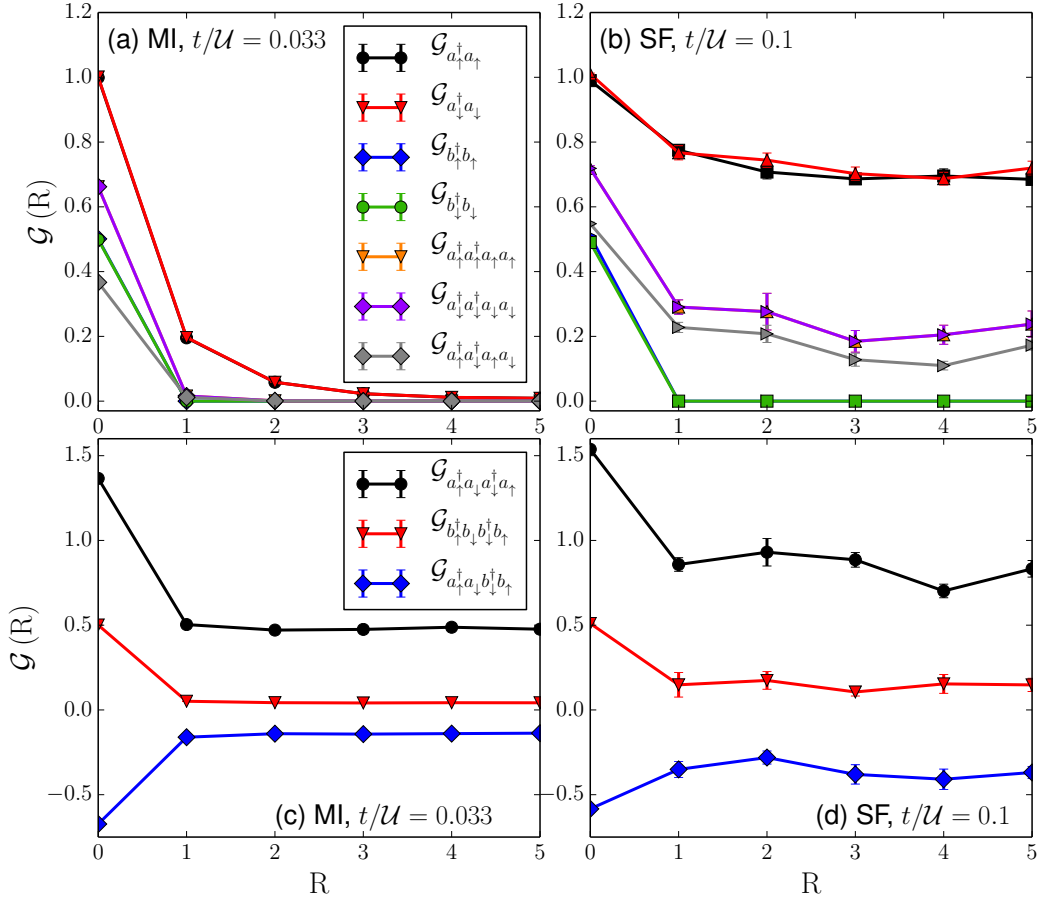


FIGURE 3.12 – Fonctions de Green à un et deux corps et d’échange de spin en fonction de la distance R dans l’isolant de Mott ((a) et (c)) et dans la phase superfluide ((b) et (d)) pour $\rho = 2$. Dans la phase de Mott, les mouvements d’échange de particules n’existent pas, mais des mouvements d’échange de spins sont néanmoins possibles. Dans la phase superfluide, tous les types de mouvements sont présents.

3.4.2 Transitions de phase quantique

Dans cette partie, nous étudions la nature des transitions de phase entre les phases de Mott ($\rho = 1, 2$) et la phase superfluide, aux pointes des lobes de Mott, ainsi qu’en périphérie. Cette étude nous permettra par ailleurs d’affiner la valeur

critique de t/U_c à laquelle la transition survient. Pour étudier la transition en pointe de lobe, nous suivons l'évolution de la densité superfluide et de la fraction condensée en fonction de t/U , à densité constante. Concernant la nature de la transition en dehors de la pointe du lobe, nous ferons des coupes verticales du diagramme de phase de la figure 3.9 : nous fixons la valeur de l'interaction t/U , puis nous suivons l'évolution de ρ et de ρ_s en faisant varier μ/U par la modification du nombre de particules a .

Pour $\rho = 1$, comme le montre la figure 3.13, la densité superfluide ρ_s part d'une valeur nulle dans le lobe de Mott, puis augmente jusqu'à une valeur limite de l'unité, au fur et à mesure que l'on augmente t/U et que l'on passe dans la phase superfluide. La fraction condensée $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ (voir Fig. 3.14) présente un comportement similaire, ce qui est attendu en $2D$ à température nulle où ρ_s et $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$ sont non nuls dans la phase superfluide. On observe une transition qui semble être continue : ce résultat vient contredire l'approche de champ moyen faite par FOSS-FEIG *et al.* [Foss-Feig 2011], qui prédit une transition discontinue pour ce ratio de $\mathcal{J}/U = 0.05$.

Afin de confirmer ce résultat contradictoire, nous avons aussi fait une coupe verticale en pointe de lobe, et suivi l'évolution de ρ en fonction de μ/U . Dans le cas d'une transition du premier ordre, le système est métastable dans la zone de transition, ce qui entraîne une compressibilité négative (toujours au niveau de la transition) [Batrouni 2000]. Nous n'avons observé aucune région à compressibilité négative qui aurait témoigné d'une transition discontinue. Cependant, ce résultat peut être nuancé, dans le sens où les tailles que nous étudions ($L = 6, 8, 10$), ne nous permettent peut-être pas de voir une telle discontinuité.

Une extrapolation en $1/L \rightarrow 0$ nous permet de déterminer la valeur critique de la transition dans la limite thermodynamique et l'on trouve $t/U_c = 0.079$.

La figure 3.15 montre l'évolution de la densité superfluide en fonction de t/U , pour différents ratios \mathcal{J}/U . Plus ce dernier est élevé, plus le caractère isolant du système est renforcé, et la transition entre phase de Mott et phase superfluide se fait à des valeurs de t/U élevées. Par ailleurs, la transition devient de plus en plus douce, celle-ci garde son caractère continu.

Pour $\rho = 2$, nous n'observons pas de discontinuité dans l'évolution de ρ_s en fonction de t/U : comme pour $\rho = 1$, la transition est continue (voir figure 3.16). De la même manière, une simple extrapolation en $1/L \rightarrow 0$ nous donne la valeur critique de la transition dans la limite thermodynamique à $t/U_c = 0.039$.

Étudions maintenant la nature des transitions en dehors de la pointe des lobes : dans la figure 3.17, nous traçons l'évolution de ρ et ρ_s en fonction du potentiel chimique μ/U , qui correspond à la coupe de la figure 3.9 en $t/U = 0.033$. On observe les plateaux de Mott où $d\rho/d\mu = 0$, ce qui témoigne de l'incompressibilité de ces phases. La densité superfluide tend vers zéro de manière continue dès qu'on approche ces plateaux, de même que ρ , et on n'observe pas d'inversion de pente

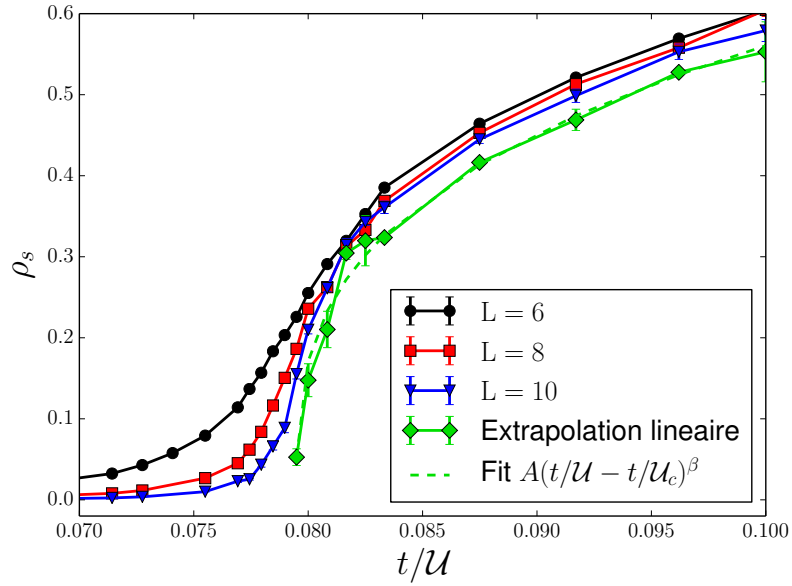


FIGURE 3.13 – Densité superfluide ρ_s , en fonction de t/\mathcal{U} pour $\rho = 1$. Nous observons une évolution continue pour ρ_s . La courbe verte représente une extrapolation linéaire en $L = \infty$ des résultats obtenus pour les trois tailles. L'extrapolation a été ajustée avec une loi de puissance $\rho_s \propto (t/\mathcal{U} - t/\mathcal{U}_c)^\beta$ (ligne en pointillée). On trouve $t/\mathcal{U}_c \simeq 0.079$ et $\beta \simeq 0.033$.

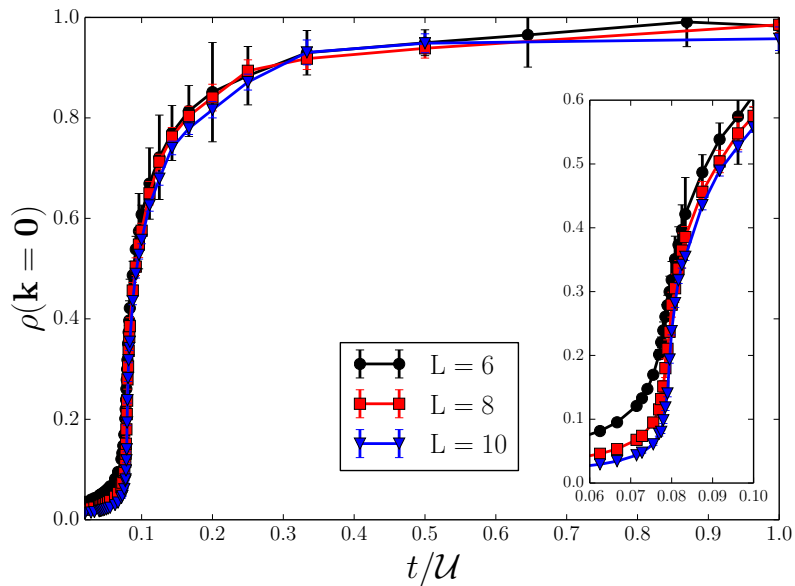


FIGURE 3.14 – Fraction condensée, $\rho(\mathbf{k} = \mathbf{0})$, en fonction t/\mathcal{U} pour $\rho = 1$. La forme est très similaire à la figure 3.13, ce qui confirme l'ordre de la transition.

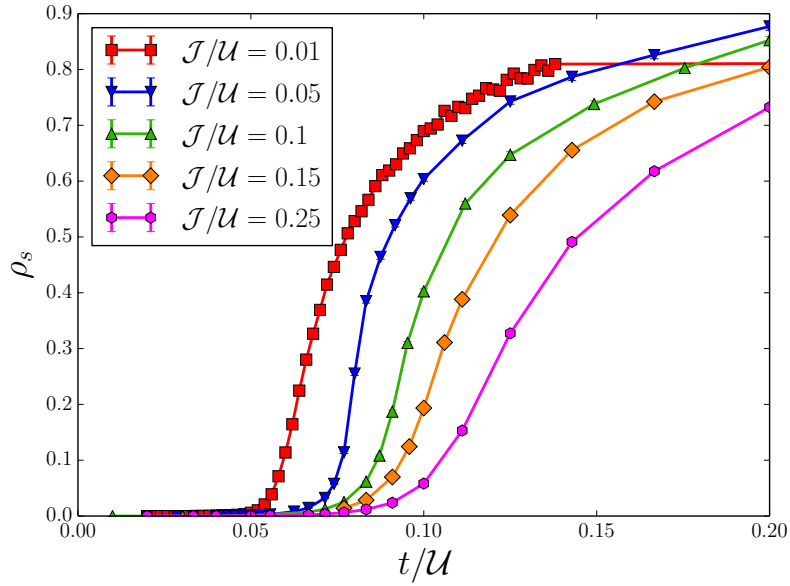


FIGURE 3.15 – Densité superfluide, ρ_s , en fonction de t/U , pour différentes valeurs de \mathcal{J}/U pour $\rho = 1$. Au fur et à mesure que l'on augmente ce ratio, l'évolution de ρ_s devient de plus en plus douce, en comparaison de la figure 3.13 et la transition reste du second ordre.

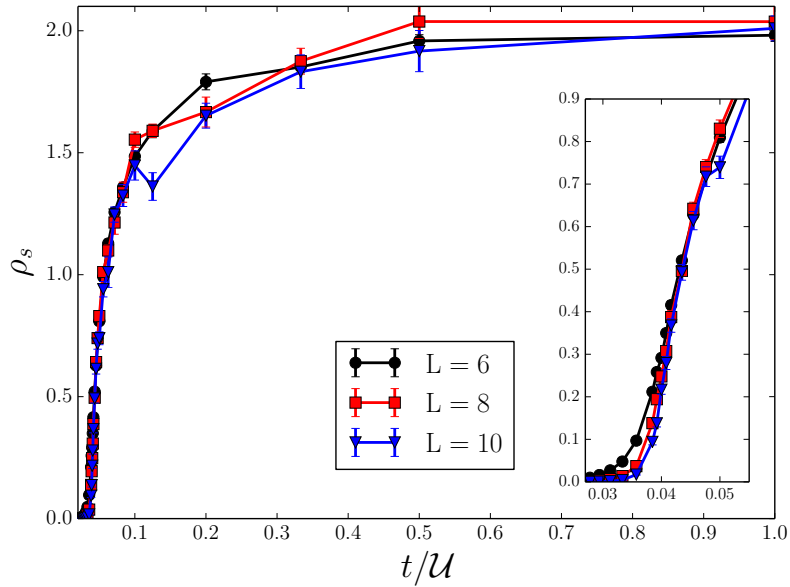


FIGURE 3.16 – Densité superfluide ρ_s , en fonction de t/U pour $\rho = 2$. Comme pour le cas à $\rho = 1$ (Fig. 3.13), on n'observe pas de discontinuité en ρ_s et la transition est du second ordre.

qui témoignerait d'une transition du premier ordre. Tous ces résultats montrent que les transitions sont aussi du second ordre en dehors de la pointe des lobes.

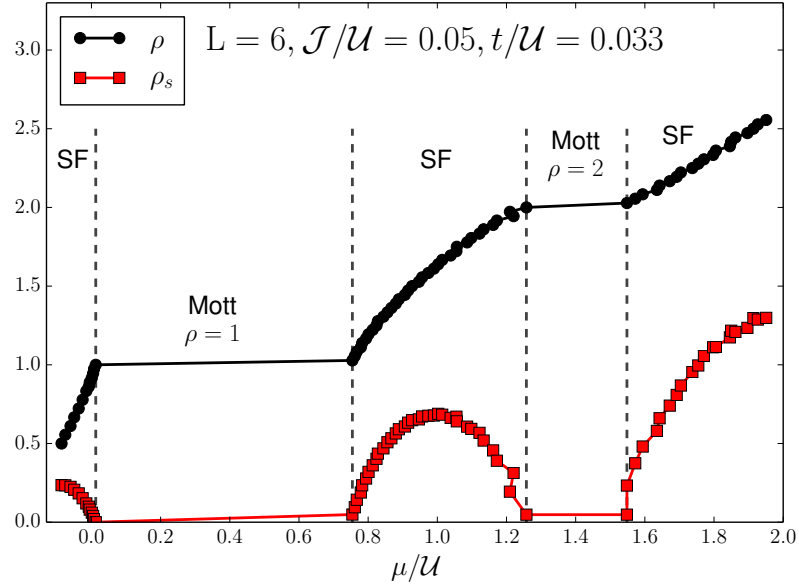


FIGURE 3.17 – Coupe de la figure 3.9 pour $t/U = 0.033$, représentant la densité totale ρ ainsi que la densité superfluide ρ_s , en fonction de μ/U . Toutes les transitions sont du second ordre.

On peut conclure que l'intégralité des transitions MI-SF de ce système sont du second ordre, ou que s'il existe une discontinuité (notamment pour $\rho = 1$), celle-ci est trop petite pour être observée avec les tailles de système que nous avons simulées.

3.4.3 Propriétés magnétiques

Nous allons maintenant étudier de manière plus détaillée les propriétés magnétiques du système. Nous analyserons successivement les corrélations magnétiques intra-espèces et inter-espèces, à longue distance mais aussi sur site, ainsi que l'aimantation totale du système. Toutes ces quantités sont tracés sur la figure 3.18 ($\rho = 1$) puis 3.20 ($\rho = 2$).

3.4.3.1 Densité $\rho = 1$

Dans la phase de Mott, les corrélations magnétiques intra-espèces et inter-espèces à longue distance sont toutes nulles, le système adopte une phase paramagnétique. Les corrélations inter-espèces sur site, quant à elles, sont non nulles et prennent la valeur de $-3/4$, ce qui correspond à un état singulet. Cette configuration de spin sur chaque site confirme l'absence de corrélations magnétiques à longue portée.

Lorsque le ratio t/U augmente, l'augmentation de $S_{aa}(R = L/2)$ et $S_{bb}(R = L/2)$ montre que des corrélations magnétiques à longue distance commencent à s'établir, de manière quasiment simultanée à la transition entre phase isolante et phase superfluide. L'état singulet local est quant à lui peu à peu détruit, les deux couches adoptent une phase ferromagnétique, tandis que les deux couches sont couplées antiferromagnétiquement, comme le montre l'augmentation de $|S_{ab}|$. Pour de faibles interactions, profondément dans le superfluide, les corrélations magnétiques à longue distance prennent leur valeur maximale de $1/4$. Il est important de mentionner, une fois encore, que le ferromagnétisme dans la couche b résulte d'un couplage indirect. De la même manière que l'interaction RKKY couple les spins localisés dans les systèmes fermioniques, ici, le ferromagnétisme de la couche b est due aux bosons itinérants de la couche a .

Enfin, le spin total du système est nul, dans la phase de Mott comme dans la phase superfluide. Ce comportement a été prédit par FOSS-FEIG *et al.* [Foss-Feig 2011], mais uniquement dans des régimes de fortes et faibles interactions. Notre étude, qui fournit des résultats exacts, nous permet de conclure que c'est également le cas pour des valeurs de t/U intermédiaires. Ainsi, le résultat intéressant ici est que le spin total du système reste identiquement nul, bien que l'on ait des comportements magnétiques différents (un nuage de singulet indépendant dans le Mott, puis un ordre magnétique dans le superfluide) dans les deux phases.

Regardons maintenant l'influence de l'interaction de Kondo sur ces différents comportements magnétiques. Comme nous pouvions nous en douter, augmenter \mathcal{J}/U n'entraîne aucune modification qualitative sur le comportement magnétique du système : il est juste plus difficile d'établir des corrélations magnétiques à longue distance. En effet, augmenter \mathcal{J}/U renforce le caractère isolant du système, donc les états superfluide et magnétique surviendront encore de manière simultanée, mais à une valeur de t/U plus grande, comme on peut le voir sur la figure 3.19. De même, les corrélations magnétiques atteignent leur valeur maximale pour des valeurs

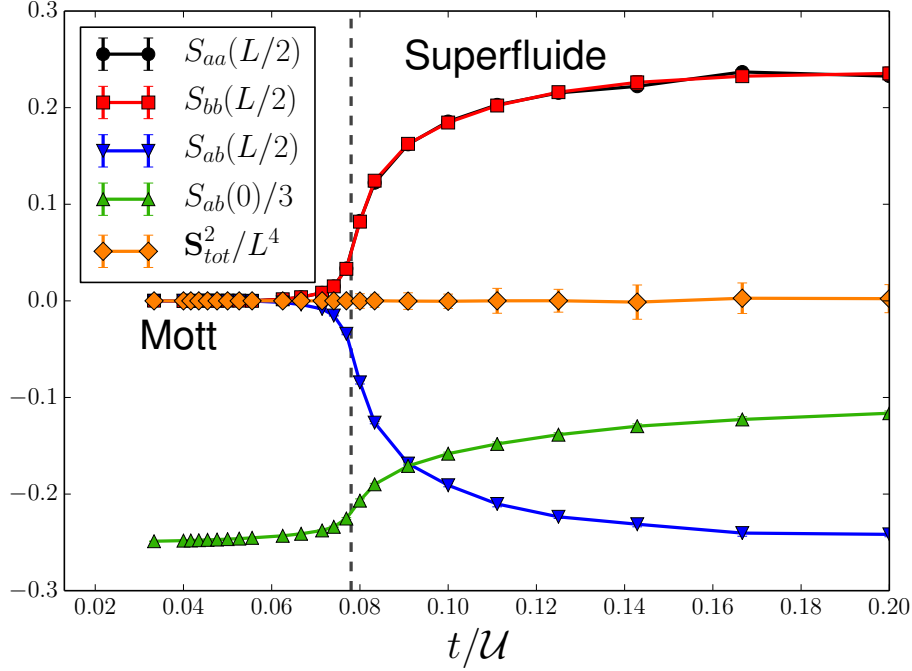


FIGURE 3.18 – Corrélations magnétiques en fonction de t/\mathcal{U} pour $\rho = 1$ et $\mathcal{J}/\mathcal{U} = 0.05$. La ligne en pointillés délimite la phase isolante de la phase superfluide. Dans la phase de Mott, il n'y a pas d'ordre magnétique, les particules a et b forment des singulets, comme le montre la valeur de $S_{ab}(0)$, qui ne pointent dans aucune direction privilégiée. La phase superfluide présente un comportement magnétique déjà souligné dans la figure 3.11. Pour t/\mathcal{U} grand, les corrélations magnétiques tendent vers leur valeur maximale.

supérieures, ce qui est compréhensible de la même manière : pour une interaction Kondo \mathcal{J}/\mathcal{U} plus importante, il est plus difficile de détruire les singulets et donc de développer des corrélations inter-sites.

3.4.3.2 Densité $\rho = 2$

Contrairement au cas où $\rho = 1$, la phase de Mott possède déjà un aspect ferromagnétique, du fait de la valeur non nulle de $S_{aa}(R = L/2)$ même dans un régime de fortes interactions. Nous en avons parlé dans la sous-section 3.4.1 (page 66), ce comportement ferromagnétique provient des mouvements anticorrélés d'échange de spin à longue distance. Nous nous sommes aussi intéressés à vérifier un résultat prédit analytiquement par FOSS-FEIG *et al.* concernant une valeur limite de $S_{bb}(R \neq 0)$: dans un régime de fortes interactions, $S_{bb}(R \neq 0) = 1/36 \simeq 0.0278$. Pour des temps de simulations raisonnables, nous sommes montés jusqu'à des interactions $\mathcal{U} = 100t$, et nous observons $S_{bb}(R = L/2) = 0.028 \pm 0.001$, ce qui est en bon accord avec la valeur théorique.

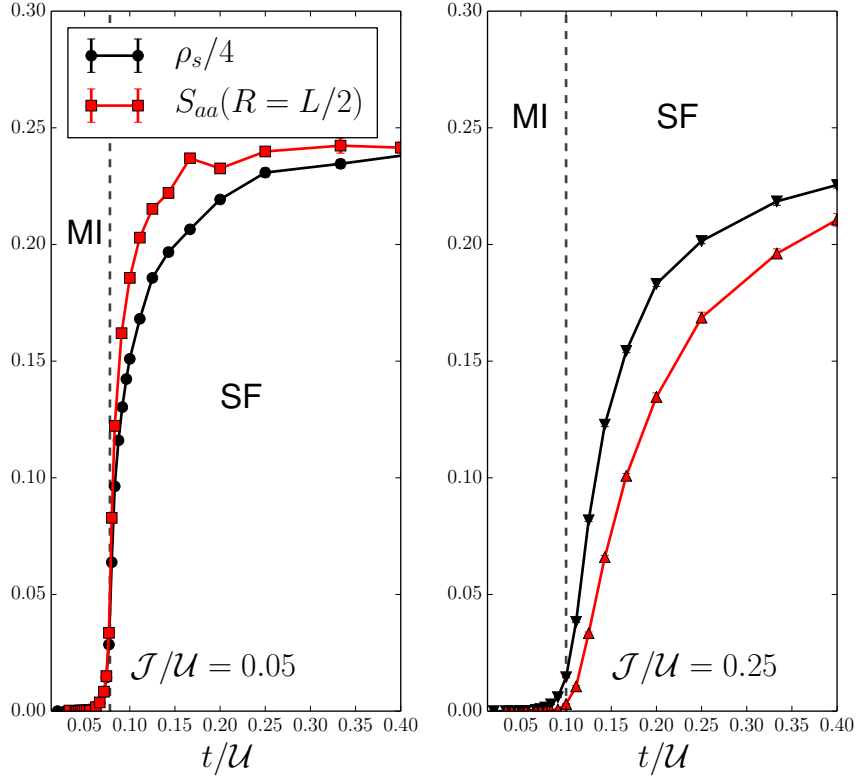


FIGURE 3.19 – Densité superfluide et corrélations magnétiques à longue distance pour les particules a en fonction de t/U pour $\mathcal{J}/U = 0.05$ (à gauche) et $\mathcal{J}/U = 0.25$ (à droite). La ligne en pointillés délimite la phase isolante de la phase superfluide. Plus \mathcal{J}/U est grand, plus il est difficile pour les corrélations magnétiques de s'établir. Pour une meilleure lisibilité, seul $S_{aa}(R = L/2)$ a été représenté, mais le même comportement est observé pour les autres fonctions de corrélations magnétiques.

Ensuite, la valeur de $S_{aa}(0) = s_a(s_a + 1) \approx 2$ nous renseigne sur la configuration des bosons a sur site : ceux-ci forment une particule « composite » de moment $s_a \approx 1$. Cette particule composite est ensuite couplée antiferromagnétiquement avec un spin de la couche b , comme en témoigne la valeur de $S_{ab}(0) \approx -1$, ce qui donne donc un spin total de $1/2$ (voir figure 3.20). Chaque site possède donc deux états dégénérés, dégénérescence levée par le terme cinétique et nous observons des corrélations magnétiques à longues portées dans la phase superfluide aussi bien que dans la phase de Mott.

Dans la phase superfluide, le système se comporte de manière similaire au cas $\rho = 1$: $S_{aa}(0)$ et $S_{ab}(0)$, augmentent faiblement à partir de leur valeur initiale dans le Mott. De même, $S_{aa}(L/2)$, $S_{bb}(L/2)$ and $S_{ab}(L/2)$ partent d'une valeur minimale (nulle pour S_{bb} et S_{ab} , non nulle pour S_{aa}) dans le Mott, puis atteignent leur valeur maximale profondément dans le superfluide, qui sont respectivement 1, $1/4$ et $-1/2$. De même, FOSS-FEIG *et al.* ont prédit un comportement spécifique pour le spin

total où $S_{\text{tot}}^2 = (L^2/2)(L^2/2 + 1) \approx L^4/4$, qui est le même dans un régime de fortes et de faibles interactions. Nous trouvons que S_{tot}^2/L^4 garde une valeur constante de $1/4$, peu importe la valeur de t/\mathcal{U} . Comme pour $\rho = 1$, on observe une valeur constante de S_{tot}^2/L^4 , pour des comportements magnétiques différents entre les deux phases adoptées par le système.

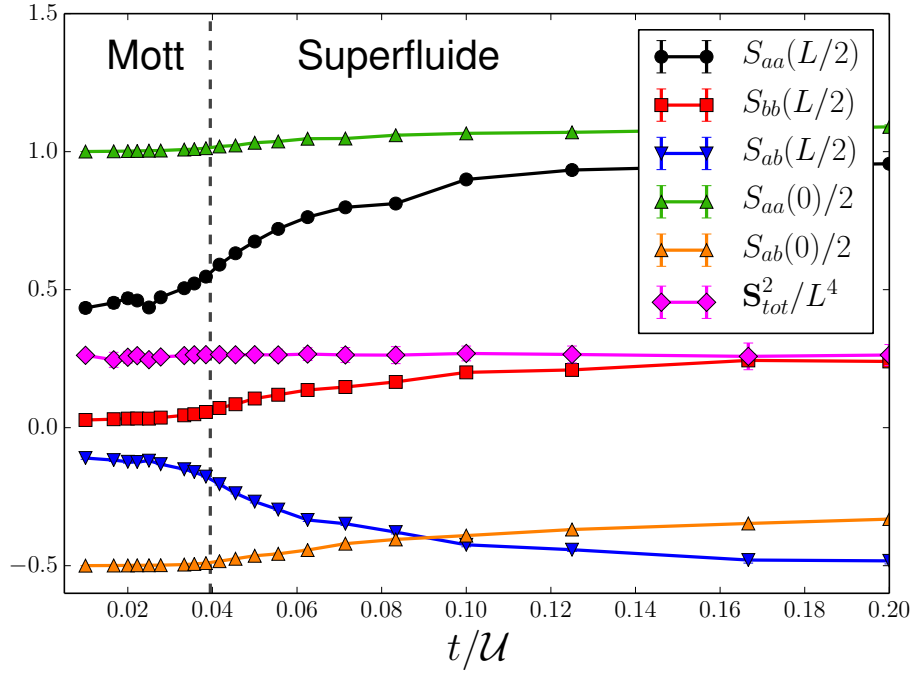


FIGURE 3.20 – Corrélations magnétiques en fonction de t/\mathcal{U} pour $\rho = 2$ et $\mathcal{J}/\mathcal{U} = 0.05$. La ligne en pointillés délimite la phase isolante de la phase superfluide. Le même ordre magnétique est présent dans les deux phases, que l'on soit dans un régime de fortes ou faibles interactions. Ce comportement est celui qui avait été décrit dans la figure 3.12. Le spin total a une valeur constante $S_{\text{tot}}^2/L^4 \simeq 1/4$.

3.4.4 Effets thermiques

Nous étudions dans cette dernière partie l'influence des fluctuations thermiques sur les propriétés (magnétiques et de transport) des différentes phases. Pour cela, nous analyserons, de manière générale, les mêmes grandeurs que dans l'étude à température nulle, mais en fonction de $\beta = 1/kT$, pour des valeurs d'interactions t/U et J/U fixées.

Le comportement d'un système décrit par le modèle de Bose-Hubbard bi-dimensionnel en fonction de la température est très bien connu, et le diagramme de phase d'un tel système dans le plan $(t/U, kT/U)$ présente trois zones [Pollet, Lode and Kollath, Corinna and Van Houcke, Kris and Troyer, Matthias 2008, Capogrosso-Sansone 2008] : une zone superfluide, une zone isolante, et une troisième zone appelée liquide normal de Bose (LNB).

Pour un système bidimensionnel, les fluctuations thermiques détruisent tout ordre à longue portée : le condensat de Bose-Einstein n'existe qu'à température nulle. Cependant, un quasi-ordre à longue portée pourra s'établir et le système pourra donc adopter une phase superfluide. Cette phase superfluide disparaîtra quand kT sera suffisamment élevé et le système adoptera donc une phase LNB, phase compressible tout comme la phase superfluide mais qui n'exhibe aucune cohérence de phase, comme le montre l'évolution des fonctions de Green, dans le superfluide, puis dans le LNB de la figure 3.23. La théorie prédit que la transition entre SF et LNB est la classe d'universalité de BKT.

De la même manière, une phase de Mott n'existe qu'à température nulle (peu importe la dimension) : en dehors de cette limite, on parlera de « quasi » phase de Mott. Comme pour la phase superfluide, quand la température dépasse une valeur critique, on observe une transition entre le quasi-Mott et le LNB. En fait, il convient de parler de *crossover* plutôt que de transition : ce passage n'implique aucune brisure de symétrie, et aucune modification dans le comportement des fonctions de corrélations. On observera uniquement un changement de comportement entre une phase très peu compressible et compressible.

3.4.4.1 Propriétés de transport

Étudions dans un premier temps l'extension de la phase superfluide en fonction de la température. Afin de trouver la température critique kT_c à laquelle ρ_s atteint une valeur nulle, nous avons à notre disposition trois différentes méthodes.

Tout d'abord, nous pouvons utiliser une extrapolation linéaire de ρ_s en fonction de $1/L$ pour différentes valeurs de β . Ensuite, nous pouvons utiliser le critère de Nelson et Kosterlitz [Nelson 1977] qui stipule que $\rho_s(T_c) = kT_c/\pi t$. Cela nous permet de calculer la température $T_c(L)$ à laquelle nos courbes coupent $kT/\pi t$ pour différentes valeurs de L , avant de d'extrapoler à $1/L \rightarrow 0$ (Fig. 3.21). Enfin, nous pouvons utiliser une méthode récente proposée par HSIEH *et al.* [Hsieh 2013]. Celle-ci consiste à combiner la relation de Nelson avec une correction logarithmique $F_i(L)$ de la densité superfluide qui ne fait intervenir qu'un seul paramètre C , qui se base sur

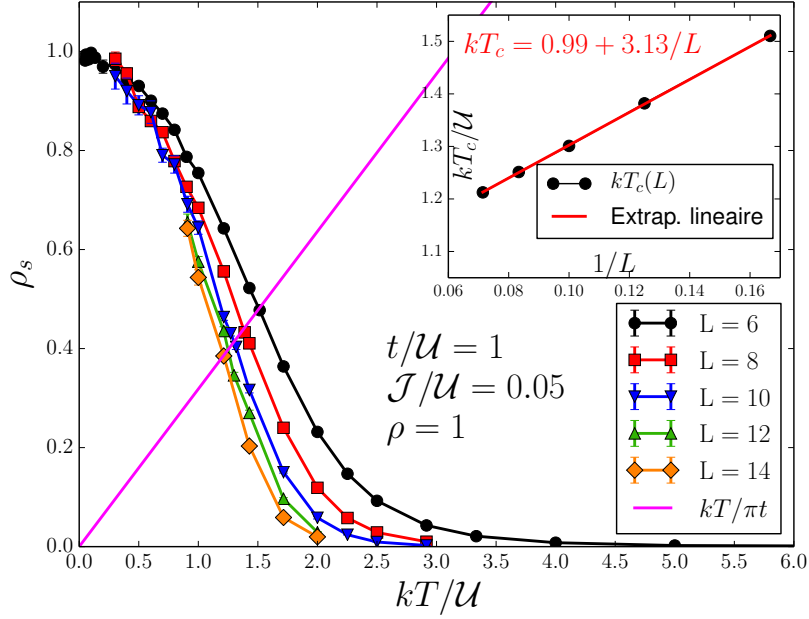


FIGURE 3.21 – Densité superfluide, ρ_s , en fonction de T pour différentes tailles L avec $t/\mathcal{U} = 1$ and $\mathcal{J}/\mathcal{U} = 0.05$. Nous repérons l'intersection entre les courbes et $kT/\pi t$ pour obtenir $T_c(L)$. Ensuite, nous extrapolons linéairement (voir l'insert) la valeur de $T_c(L)$ en $1/L \rightarrow 0$ afin d'estimer la température de transition que l'on retrouve sur la figure 3.25.

deux tailles uniquement, comme le montre la figure 3.22.

$$F_1(L) = 1 + \frac{g}{2 \ln(L) + C}, \quad (3.53)$$

$$F_2(L) = 1 + \frac{g}{2 \ln(L) + C + \ln(C/2 + \ln(L))}, \quad (3.54)$$

$$(3.55)$$

avec g facteur de correction [Hasenbusch 2005], tel que $g = 1.00202783$, et C le paramètre ajustable pour satisfaire l'équation :

$$\frac{\rho_s(T_c, L_1)}{F_i(L_1)} = \frac{\rho_s(T_c, L_2)}{F_i(L_2)} = f \frac{kT_c}{\pi}, \quad (3.56)$$

avec $f = 0.99982471$, facteur de renormalisation que l'on obtient numériquement voire analytiquement dans certains cas particuliers [Melko 2004].

Les trois méthodes donnent des résultats similaires, dans la limite des barres d'erreurs et des tailles dont nous disposons. Par souci de simplicité, nous utiliserons uniquement la deuxième pour dresser le diagramme de phase. La figure 3.21 montre le cas de $t/\mathcal{U} = 1$: l'extrapolation nous permet de déterminer la température

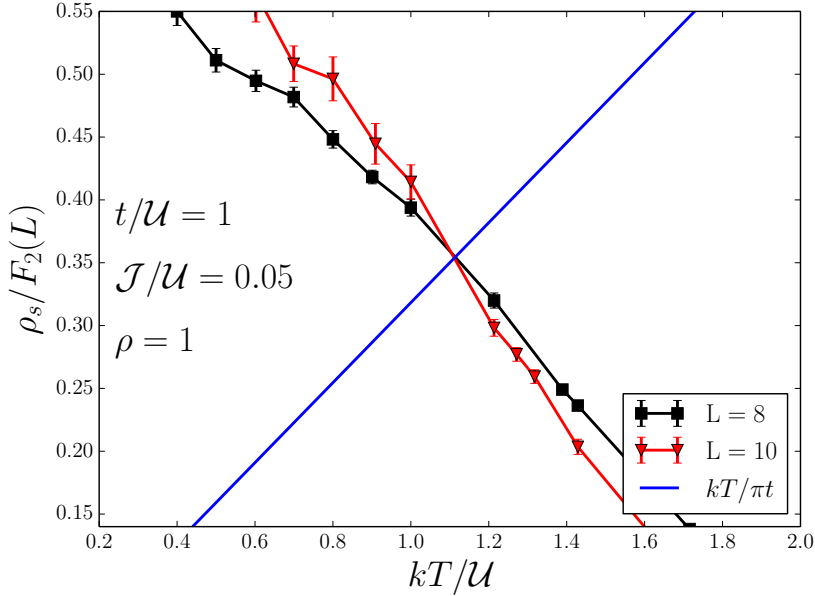


FIGURE 3.22 – Exemple de la technique de fit présenté dans [Hsieh 2013]. Les 3 courbes se croisent exactement au niveau de la température critique de transition entre phase superfluide et liquide de Bose normal.

critique de la transition en $kT_c = 0.99$. Nous effectuerons ces tracés pour plusieurs valeurs de t/U bien choisies afin de délimiter la zone occupée par la phase superfluide dans le plan $(t/U, kT/U)$.

Étudions maintenant l'influence de la température dans un régime où le système est initialement dans sa phase isolante, à température nulle. Comme nous l'avons précisé, on observera un *crossover* entre quasi-phase de Mott et NBL et non une transition de phase. De ce fait, nous ne disposons d'aucun critère exact afin de déterminer de manière claire la température de ce *crossover*. Pour cela, nous choisirons donc un facteur arbitraire. Nous avons calculé puis tracé (voir figure 3.24), pour différentes valeurs de t/U , la fluctuation locale du nombre de particules, donnée par $\kappa = \langle n_{a,i}^2 \rangle - \langle n_{a,i} \rangle^2$. À basse température, celle-ci présente un plateau, puis elle augmente avec la température. La température kT_c du *crossover* entre quasi-Mott et LNB est définie comme la température à laquelle la compressibilité locale a varié de 5% par rapport à sa valeur initiale. Nous avons vérifié que cette définition est valide en comparant avec une mesure de la densité en fonction du potentiel et nous trouvons que les plateaux disparaissent à cette température.

Ces différentes analyses combinées (critère de Nelson et variation de la fluctuation locale du nombre de particules) nous permettent de tracer le diagramme de phase pour $\rho = 1$ et $\rho = 2$ dans le plan $(t/U, kT/U)$, présenté sur la figure 3.25. Les points à $kT = 0$ sont les points de transition quantique entre isolant de Mott

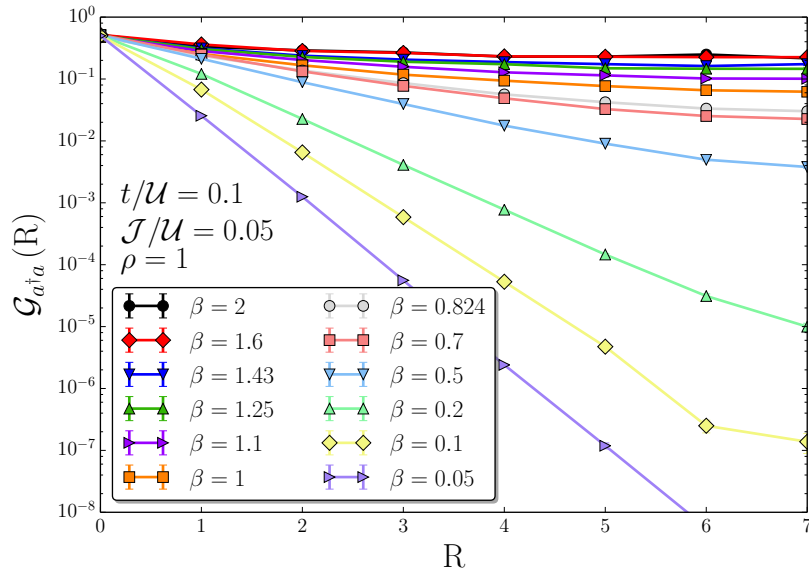


FIGURE 3.23 – Fonction de Green (3.34) à une particule pour différentes températures. Dans la phase SF, elle décroît en loi de puissance, tandis que dans le LNB, elle décroît exponentiellement : aucune cohérence de phase n'existe. Seule la fonction de Green 3.34 a été représentée, les autres suivent le même comportement.

et phase superfluide (qui est aussi condensée). Nous les avons déterminé lors de l'étude à température nulle de la sous-section 3.4.2 (page 71), et valent $t/\mathcal{U}_c = 0.079$ pour $\rho = 1$ et $t/\mathcal{U}_c = 0.039$ pour $\rho = 2$.

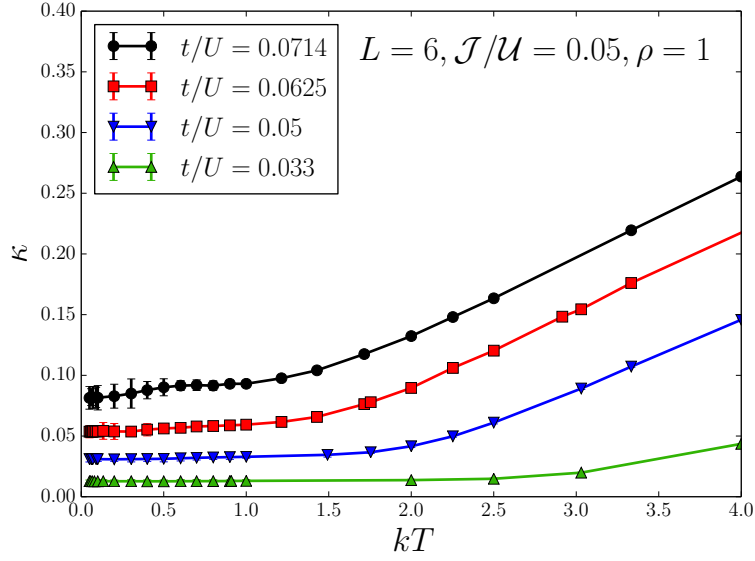


FIGURE 3.24 – Fluctuation locale de la densité $\kappa = \langle n_{a,i}^2 \rangle - \langle n_{a,i} \rangle^2$ en fonction de kT pour différentes valeurs de t/U . On observe que κ est presque constant à faible kT dans la région du quasi-Mott. Nous définissons la température du *crossover* comme la température à laquelle κ atteint une valeur de plus de 5% de sa valeur minimale.

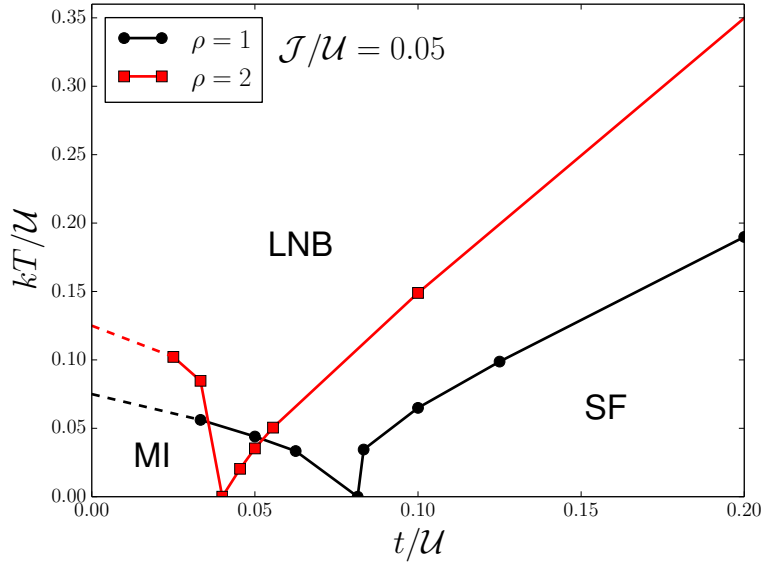


FIGURE 3.25 – Diagrammes de phase pour $\rho = 1$ et $\rho = 2$ en fonction de t/U et kT/U à $J/U = 0.05$. Il y a trois différentes régions : la région du quasi-Mott (notée MI), le liquide de Bose normal ainsi que la région superfluide. La limite SF/LNB est une transition de type BKT, tandis que la limite quasi-MI/LNB est un *crossover* entre régimes faiblement et fortement compressibles.

3.4.4.2 Propriétés magnétiques

Intéressons nous maintenant à l'influence de la température sur les propriétés magnétiques. Contrairement à l'étude des propriétés de transport, nous nous limiterons à des systèmes de taille $L = 6$, étant donné la qualité des données pour des tailles supérieures.

Dans la phase de Mott de densité $\rho = 1$, aucun ordre magnétique n'est présent à température nulle comme nous l'avons trouvé dans la sous-section 3.4.3 (page 76). Ce comportement ne sera bien entendu pas modifié pour des températures non nulles. Pour $\rho = 2$, toujours dans la phase de Mott, le couplage ferromagnétique existant à température nulle disparaît très vite, à $kT/\mathcal{U} \simeq 0.03$ pour notre système de taille $L = 6$, comme le montre la figure 3.26. En effet, les couplages qui mènent à un ordre ferromagnétique (provenant des mouvements anticorrélés d'échange de spin) sont faibles, et donc relativement faciles à détruire. De plus, dans une limite de fortes interactions, le système est décrit par un modèle de Heisenberg, on ne s'attend donc pas à observer un ordre magnétique à température finie dans la limite thermodynamique.

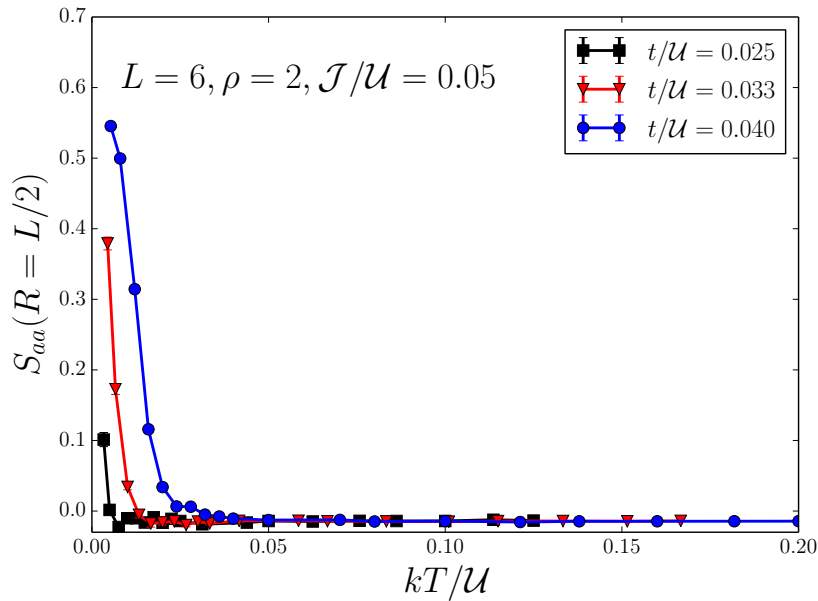


FIGURE 3.26 – Corrélations magnétiques dans la couche a à longue distance dans la phase de Mott à $\rho = 2$, en fonction de la température, pour plusieurs valeurs de t/\mathcal{U} . Celles-ci tombent rapidement vers 0.

Le comportement de la phase superfluide est quant à lui beaucoup plus intéressant et inattendu. En effet, l'aimantation totale part de sa valeur initiale à $kT = 0$, puis augmente avec la température, avant de diminuer jusqu'à des valeurs nulles dans les régimes de haute température (voir Fig. 3.27).

Cette augmentation de la magnétisation totale est en fait due à une diminution de $|S_{ab}|$ (et de S_{bb}) plus rapide que celle de S_{aa} . En effet, le couplage entre les bosons et les spins est relativement faible : $\mathcal{J} = 0.05\mathcal{U}$, avec $t/\mathcal{U} = 0.2$ dans le cas de la figure 3.27. Ainsi, les excitations thermiques peuvent aisément briser ce couplage : les corrélations antiferromagnétiques entre particules a et b disparaissent, ainsi que les corrélations indirectes entre les spins b , qui sont maintenant désordonnés. Les deux couches a et b étant maintenant découplées, il ne reste plus que les bosons a qui, devenus indépendants, forment un superfluide ferromagnétique qui résulte en une magnétisation totale plus grande.

Encore une fois, le mécanisme n'est pas parfaitement clair, mais trouve évidemment son origine dans la capacité des bosons a à se mouvoir sur le réseau, seul mécanisme qui peut coupler des particules distantes. Ce magnétisme provenant donc uniquement des bosons a sera brisé à une température supérieure à celle nécessaire pour détruire le couplage entre particules a et b (on est dans le cas où $t > \mathcal{J}$). En effet, on observe que S_{ab} et S_{bb} sont presque nulles à $kT = 1$ tandis que S_{aa} devient nulle au delà de $kT = 3$.

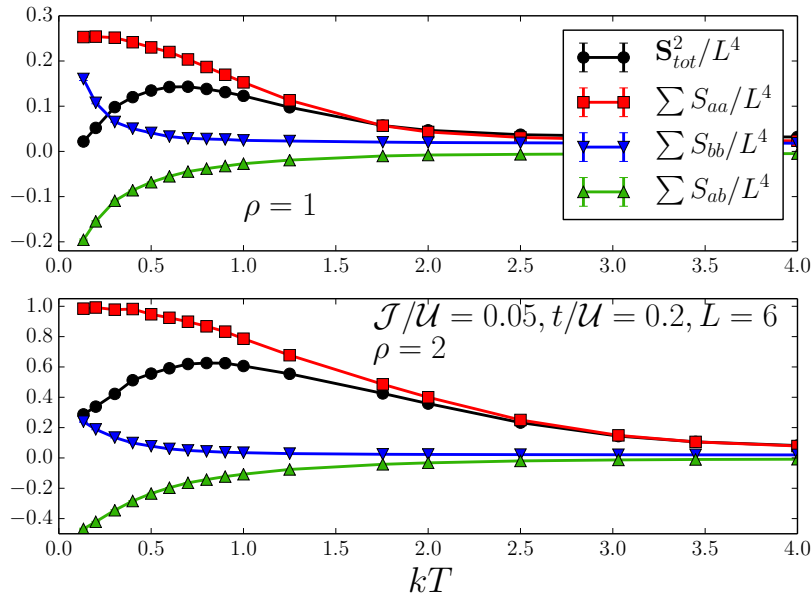


FIGURE 3.27 – Magnétisation totale du système (S_{tot}) et corrélations magnétiques intra-espèces (S_{aa} , S_{bb}) puis inter-espèces (S_{ab}) pour $\rho = 1$ (en haut) et $\rho = 2$ (en bas) dans la phase superfluide. S_{tot} part de sa valeur initiale (nulle pour $\rho = 1$, 0.25 pour $\rho = 2$) à $kT = 0$ puis augmente avec la température. Tandis que les bosons a se découplent des spins b quand $kT > \mathcal{J}$, S_{bb} et S_{ab} tendent plus rapidement que S_{aa} vers 0, d'où l'augmentation de l'aimantation totale.

Cependant, d'après le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg [Mermin 1966, Hohenberg 1967, Mermin 1968], une magnétisation non nulle ne devrait pas exister à température finie dans un système à deux dimensions. Nous avons donc regardé

l'évolution de la magnétisation totale en fonction de la taille du système pour différentes températures (Fig. 3.28) afin de vérifier qu'elle tend vers 0.

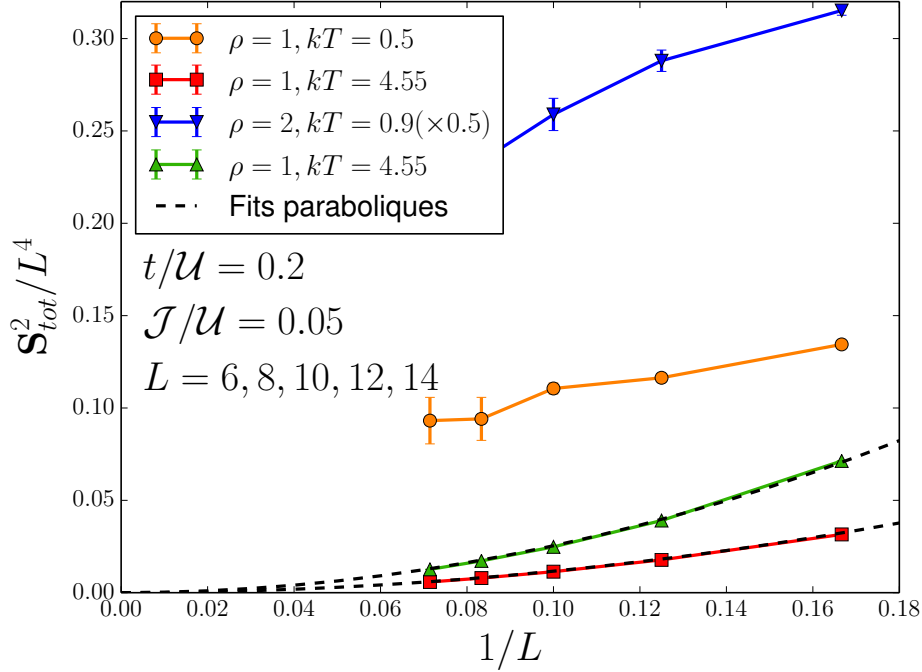


FIGURE 3.28 – Extrapolation de la magnétisation en fonction de la taille du système. À haute température ($kT = 4.55$), la magnétisation extrapole à zéro. Aux températures où nous observons le pic de la magnétisation dans la Fig. 3.27, l'extrapolation de la magnétisation ne semble pas tendre vers zéro. Les données pour $\rho = 2, kT = 0.9$ ont été divisées par 2 pour une meilleure lecture.

Dans un régime de haute température ($kT = 4.55$), la magnétisation totale tend en effet vers 0, $S_{\text{tot}}^2/L^4 \propto 1/L^2$ et nous pouvons faire des régressions paraboliques en très bon accord pour $\rho = 1$ et $\rho = 2$. En revanche, pour un régime de température intermédiaire ($kT = 0.9$), près du maxima de S_{tot}^2 observé au niveau de la figure 3.27, on n'observe pas de décroissance claire de la magnétisation en fonction de la taille. Les données obtenues pour $L = 12, 14$ ont d'importantes barres d'erreurs, il est donc difficile de conclure dans la limite thermodynamique, bien que le comportement ici observé ne semble pas correspondre à une décroissance de la magnétisation totale.

Notre interprétation de ce résultat pour le moins surprenant est que, dans la phase superfluide, nous avons un quasi-ordre à longue portée pour les différentes fonctions de Green. Ainsi, nous nous attendons donc aussi à avoir un quasi-ordre à longue portée pour les corrélations magnétiques entre bosons. Ceci expliquerait les valeurs étonnamment élevées de S_{tot}^2 pour de petits systèmes. Un comporte-

ment similaire a déjà été observé pour un autre modèle de bosons de spin $1/2$ à température finie [de Forges de Parny 2012].

3.5 Conclusion

Ce premier chapitre concernant mes travaux de recherche fut l'objet de l'étude d'un modèle de Bose-Hubbard à deux bandes : le modèle de Kondo bosonique sur réseau. L'étude fut numérique et traité uniquement via un algorithme de Monte-Carlo quantique, appelé « Fonctions de Green Stochastiques » (SGF). Cet algorithme fournit des résultats numériquement exacts, et permet une étude précise du système, étant donné qu'il fournit un grand nombre de fonctions de corrélations.

Nous résumons ici les principaux résultats :

Pour $\mathcal{J}/U = 0.05$ et $\rho = 1$, la phase de Mott est composée d'un nuage de singulets formés entre les bosons de la couche a et spins de la couche b . Aucune orientation magnétique n'est privilégiée, la phase de Mott est paramagnétique. Quand on diminue les interactions sur site à densité fixée ou quand on change la densité à interactions fixées, le système subit une transition de phase vers un condensat de Bose-Einstein, qui a bien entendu la caractéristique d'être superfluide. Cette transition est du second ordre, ce qui vient contredire la prédiction de champ moyen, où la transition à densité constante est du premier ordre pour un tel ratio \mathcal{J}/U . Cette phase présente un ordre magnétique à longue portée : ferromagnétique dans les deux couches a et b et antiferromagnétique entre ces deux couches. Lorsque l'on augmente le ratio \mathcal{J}/U , cela renforce le caractère isolant du système et la transition entre phase de Mott et phase superfluide devient de plus en plus douce. Les effets thermiques viennent immédiatement détruire la phase de Mott, qui n'existe qu'à température nulle, et l'augmentation des effets thermiques entraîne un *crossover* entre quasi-phase de Mott et liquide de Bose normal. De même, le condensat disparaît dès que l'on est en dehors de la limite de température nulle. Toutefois, la phase superfluide persiste et, à plus haute température, une transition dans la classe d'universalité de BKT entre phase superfluide et liquide de Bose normal a lieu. L'agitation thermique vient peu à peu détruire les corrélations magnétiques existantes au sein du système en commençant par les corrélations dans la couche b et entre les deux couches a et b , puis dans la couche a .

Pour $\mathcal{J}/U = 0.05$ et $\rho = 2$, des mouvements anticorrélés existent dans la phase de Mott, ce qui se traduit par l'existence d'un ordre magnétique, bien que l'on soit dans la phase isolante : ferromagnétique dans les deux couches, et antiferromagnétique entre les deux couches. De la même manière, on observe une transition de phase entre un état isolant et un état superfluide, qui est elle aussi

du second ordre.

La température a exactement le même effet que pour $\rho = 1$. Cependant, on peut noter que les corrélations magnétiques sont détruites très rapidement par les fluctuations thermiques dans la quasi phase de Mott.

Enfin, rappelons le comportement particulier du spin total du système : pour $\rho = 1, 2$ celui-ci garde une valeur constante ($\mathbf{S}_{\text{tot}}^2/L^4 = 0$ pour $\rho = 1$, $\mathbf{S}_{\text{tot}}^2/L^4 = 1/4$ pour $\rho = 2$) dans chacun des deux régimes, isolant et superfluide.

Pour terminer, nous pouvons discuter de différentes perspectives vers lesquelles nous pourrions nous orienter. Rappelons que le modèle de Kondo originel concerne des particules qui n'interagissent pas. Une première chose à faire pourrait être d'étudier un système où l'interaction sur site \mathcal{U} est nulle, où les seules échelles d'énergies seraient kT , t et \mathcal{J} . Ensuite, les systèmes réels ne comportent pas une impureté sur chaque nœud du réseau, mais un nombre d'impuretés plus ou moins important distribuées aléatoirement sur le réseau. Afin de s'approcher du vrai modèle de Kondo, puis de le revisiter avec des particules bosoniques, il pourrait être intéressant de faire une étude de désordre où l'on fixerait arbitrairement le nombre de particules b qui seraient ensuite aléatoirement réparties.

Bibliographie

- [Anderson 1958] P. W. Anderson. *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*. Phys. Rev., vol. 109, pages 1492–1505, Mar 1958. (Cit  en page 56.)
- [Anderson 1961] P. W. Anderson. *Localized Magnetic States in Metals*. Phys. Rev., vol. 124, pages 41–53, Oct 1961. (Cit  en page 44.)
- [Assaad 2002] F. F. Assaad. *Depleted Kondo lattices: Quantum Monte Carlo and mean-field calculations*. Phys. Rev. B, vol. 65, page 115104, Feb 2002. (Cit  en page 50.)
- [Batrouni 2000] G. G. Batrouni et R. T. Scalettar. *Phase Separation in Supersolids*. Phys. Rev. Lett., vol. 84, pages 1599–1602, Feb 2000. (Cit  en page 72.)
- [Blandin 1959] A. Blandin et J. Friedel. *Propri t s magn tiques des alliages dilu s. Interactions magn tiques et antiferromagn tisme dans les alliages du type m tal noble-m tal de transition*. J. Phys. Radium, vol. 20, pages 160–168, 1959. (Cit  en page 44.)
- [Capogrosso-Sansone 2008] Barbara Capogrosso-Sansone,  bnem G ne   S yler, Nikolay Prokof'ev et Boris Svistunov. *Monte Carlo study of the two-dimensional Bose-Hubbard model*. Phys. Rev. A, vol. 77, page 015602, Jan 2008. (Cit  en page 80.)
- [Cl ment 2009] D. Cl ment, N. Fabbri, L. Fallani, C. Fort et M. Inguscio. *Multi-band spectroscopy of inhomogeneous Mott-insulator states of ultracold bosons*. New Journal of Physics, vol. 11, no. 10, page 103030, 2009. (Cit  en pages 50, 57 et 143.)
- [Cronenwett 1998] Sara M. Cronenwett, Tjerk H. Oosterkamp et Leo P. Kouwenhoven. *A Tunable Kondo Effect in Quantum Dots*. Science, vol. 281, no. 5376, pages 540–544, 1998. (Cit  en page 44.)
- [Damski 2003] B. Damski, J. Zakrzewski, L. Santos, P. Zoller et M. Lewenstein. *Atomic Bose and Anderson Glasses in Optical Lattices*. Phys. Rev. Lett., vol. 91, page 080403, Aug 2003. (Cit  en page 56.)
- [de Forges de Parny 2011] L. de Forges de Parny, F. H bert, V. G. Rousseau, R. T. Scalettar et G. G. Batrouni. *Ground-state phase diagram of spin- $\frac{1}{2}$ bosons in a two-dimensional optical lattice*. Phys. Rev. B, vol. 84, page 064529, Aug 2011. (Cit  en pages 7 et 70.)
- [de Forges de Parny 2012] L. de Forges de Parny, F. H bert, V. G. Rousseau et G. G. Batrouni. *Finite temperature phase diagram of spin-1/2 bosons in two-dimensional optical lattice*. Eur. Phys. J. B, vol. 85, no. 5, page 169, 2012. (Cit  en page 88.)
- [de Haas 1934] W.J. de Haas, J. de Boer et G.J. van d n Berg. *The electrical resistance of gold, copper and lead at low temperatures*. Physica, vol. 1, no. 7, pages 1115 – 1124, 1934. (Cit  en page 44.)
- [Doniach 1977] S. Doniach. *The Kondo lattice and weak antiferromagnetism*. Physica B+C, vol. 91, pages 231 – 234, 1977. (Cit  en page 47.)

- [Duan 2004] L.-M. Duan. *Controlling ultracold atoms in multi-band optical lattices for simulation of Kondo physics*. EPL (Europhysics Letters), vol. 67, no. 5, page 721, 2004. (Cité en pages 57 et 61.)
- [Fazekas 1991] P. Fazekas et E. Müller-Hartmann. *Magnetic and non-magnetic ground states of the Kondo lattice*. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, vol. 85, no. 2, pages 285–300, 1991. (Cité en pages 49 et 57.)
- [Fazekas 1997] P. Fazekas et K. Itai. *Collective Kondo effect in the Anderson-Hubbard lattice*. Physica B : Condensed Matter, vol. 230–232, no. 0, pages 428 – 430, 1997. Proceedings of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems. (Cité en page 49.)
- [Feldbacher 2002] M. Feldbacher, C. Jurecka, F. F. Assaad et W. Brenig. *Single-hole dynamics in the half-filled two-dimensional Kondo-Hubbard model*. Phys. Rev. B, vol. 66, page 045103, Jul 2002. (Cité en page 49.)
- [Fisher 1989] Matthew P. A. Fisher, Peter B. Weichman, G. Grinstein et Daniel S. Fisher. *Boson localization and the superfluid-insulator transition*. Phys. Rev. B, vol. 40, pages 546–570, Jul 1989. (Cité en pages 6, 16, 51 et 56.)
- [Flottat 2015] T. Flottat, F. Hébert, V. G. Rousseau, R. T. Scalettar et G. G. Batrouni. *Bosonic Kondo-Hubbard model*. Phys. Rev. B, vol. 92, page 035101, Jul 2015. (Cité en pages 18 et 57.)
- [Foss-Feig 2011] Michael Foss-Feig et Ana Maria Rey. *Phase diagram of the bosonic Kondo-Hubbard model*. Phys. Rev. A, vol. 84, page 053619, Nov 2011. (Cité en pages 61, 66, 72 et 76.)
- [Friedel 1952] J. Friedel. *XIV. The distribution of electrons round impurities in monovalent metals*. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, vol. 43, no. 337, pages 153–189, 1952. (Cité en page 48.)
- [Friedel 1958] J. Friedel. *Metallic alloys*. Il Nuovo Cimento (1955-1965), vol. 7, no. 2, pages 287–311, 1958. (Cité en page 44.)
- [Góral 2002] K. Góral, L. Santos et M. Lewenstein. *Quantum Phases of Dipolar Bosons in Optical Lattices*. Phys. Rev. Lett., vol. 88, page 170406, Apr 2002. (Cité en page 56.)
- [Gutzwiller 1963] Martin C. Gutzwiller. *Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals*. Phys. Rev. Lett., vol. 10, pages 159–162, Mar 1963. (Cité en page 50.)
- [Hasenbusch 2005] Martin Hasenbusch. *The two-dimensional XY model at the transition temperature: a high-precision Monte Carlo study*. Journal of Physics A : Mathematical and General, vol. 38, no. 26, page 5869, 2005. (Cité en page 81.)
- [Hewson 1993] Alexander Cyril Hewson. *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge University Press, 1993. Cambridge Books Online. (Cité en pages 44 et 57.)

- [Hohenberg 1967] P. C. Hohenberg. *Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions*. Phys. Rev., vol. 158, pages 383–386, Jun 1967. (Cité en pages 14, 86 et 114.)
- [Horak 1998] Peter Horak, Jean-Yves Courtois et Gilbert Grynberg. *Atom cooling and trapping by disorder*. Phys. Rev. A, vol. 58, pages 3953–3962, Nov 1998. (Cité en page 56.)
- [Pollet, Lode and Kollath, Corinna and Van Houcke, Kris and Troyer, Matthias 2008] Pollet, Lode and Kollath, Corinna and Van Houcke, Kris and Troyer, Matthias. *Temperature changes when adiabatically ramping up an optical lattice*. New Journal of Physics, vol. 10, no. 6, page 065001, 2008. (Cité en page 80.)
- [Hsieh 2013] Yun-Da Hsieh, Ying-Jer Kao et Anders W Sandvik. *Finite-size scaling method for the Berezinskii–Kosterlitz–Thouless transition*. Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment, vol. 2013, no. 09, page P09001, 2013. (Cité en pages 80 et 82.)
- [Huang 1957] Kerson Huang et C. N. Yang. *Quantum-Mechanical Many-Body Problem with Hard-Sphere Interaction*. Phys. Rev., vol. 105, pages 767–775, Feb 1957. (Cité en page 51.)
- [Hubbard 1963] J. Hubbard. *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*. Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, vol. 276, no. 1365, pages 238–257, 1963. (Cité en pages 6 et 50.)
- [Kanamori 1963] Junjiro Kanamori. *Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals*. Progress of Theoretical Physics, vol. 30, no. 3, pages 275–289, 1963. (Cité en page 50.)
- [Kasuya 1956] Tadao Kasuya. *A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener’s Model*. Progress of Theoretical Physics, vol. 16, no. 1, pages 45–57, 1956. (Cité en page 47.)
- [Kondo 1964] Jun Kondo. *Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys*. Progress of Theoretical Physics, vol. 32, no. 1, pages 37–49, 1964. (Cité en page 44.)
- [Krutitsky 2004] K. V. Krutitsky et R. Graham. *Spin-1 bosons with coupled ground states in optical lattices*. Phys. Rev. A, vol. 70, page 063610, Dec 2004. (Cité en page 57.)
- [Kuklov 2003] A. B. Kuklov et B. V. Svistunov. *Counterflow Superfluidity of Two-Species Ultracold Atoms in a Commensurate Optical Lattice*. Phys. Rev. Lett., vol. 90, page 100401, Mar 2003. (Cité en page 70.)
- [Landig 2016] Renate Landig, Lorenz Hruby, Nishant Dogra, Manuele Landini, Rafael Mottl, Tobias Donner et Tilman Esslinger. *Quantum phases from competing short- and long-range interactions in an optical lattice*. Nature, vol. 532, pages 476–479, Apr 2016. (Cité en pages 56, 146 et 147.)

- [Mandel 2003] Olaf Mandel, Markus Greiner, Artur Widera, Tim Rom, Theodor W. Hänsch et Immanuel Bloch. *Coherent Transport of Neutral Atoms in Spin-Dependent Optical Lattice Potentials*. Phys. Rev. Lett., vol. 91, page 010407, Jul 2003. (Cité en page 57.)
- [Melko 2004] R. G. Melko, A. W. Sandvik et D. J. Scalapino. *Aspect-ratio dependence of the spin stiffness of a two-dimensional XY model*. Phys. Rev. B, vol. 69, page 014509, Jan 2004. (Cité en page 81.)
- [Mermin 1966] N. D. Mermin et H. Wagner. *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*. Phys. Rev. Lett., vol. 17, pages 1133–1136, Nov 1966. (Cité en pages 14, 86 et 114.)
- [Mermin 1968] N. D. Mermin. *Crystalline Order in Two Dimensions*. Phys. Rev., vol. 176, pages 250–254, Dec 1968. (Cité en pages 14, 86 et 114.)
- [Müller 2007] Torben Müller, Simon Fölling, Artur Widera et Immanuel Bloch. *State Preparation and Dynamics of Ultracold Atoms in Higher Lattice Orbitals*. Phys. Rev. Lett., vol. 99, page 200405, Nov 2007. (Cité en pages 50, 57 et 143.)
- [Nelson 1977] David R. Nelson et J. M. Kosterlitz. *Universal Jump in the Superfluid Density of Two-Dimensional Superfluids*. Phys. Rev. Lett., vol. 39, pages 1201–1205, Nov 1977. (Cité en page 80.)
- [Nozières 1974] P. Nozières. *A “fermi-liquid” description of the Kondo problem at low temperatures*. Journal of Low Temperature Physics, vol. 17, no. 1, pages 31–42, 1974. (Cité en page 47.)
- [Nozières 1976] P. Nozières. *Applications de l’idée de renormalisation en Physique du solide*. J. Phys. Colloques, vol. 37, pages C1–271–C1–282, 1976. (Cité en page 47.)
- [Park 2002] Jiwoong Park, Abhay N. Pasupathy, Jonas I. Goldsmith, Connie Chang, Yuval Yaish, Jason R. Petta, Marie Rinkoski, James P. Sethna, Hector D. Abruna, Paul L. McEuen et Daniel C. Ralph. *Coulomb blockade and the Kondo effect in single-atom transistors*. Nature, vol. 417, pages 722–725, Jun 2002. (Cité en page 44.)
- [Ruderman 1954] M. A. Ruderman et C. Kittel. *Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons*. Phys. Rev., vol. 96, pages 99–102, Oct 1954. (Cité en page 47.)
- [Schrieffer 1966] J. R. Schrieffer et P. A. Wolff. *Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians*. Phys. Rev., vol. 149, pages 491–492, Sep 1966. (Cité en page 49.)
- [Shirer 2012] Kent R. Shirer, Abigail C. Shockley, Adam P. Dioguardi, John Crocker, Ching H. Lin, Nicholas apRoberts Warren, David M. Nisson, Peter Klavins, Jason C. Cooley, Yi-feng Yang et Nicholas J. Curro. *Long range order and two-fluid behavior in heavy electron materials*. Proceedings of the

- National Academy of Sciences, vol. 109, no. 45, pages E3067–E3073, 2012. (Cité en page 50.)
- [Theumann 2001] Alba Theumann, B. Coqblin, S. G. Magalhães et A. A. Schmidt. *Spin-glass freezing in Kondo-lattice compounds*. Phys. Rev. B, vol. 63, page 054409, Jan 2001. (Cité en page 48.)
- [Tsunetsugu 1997] Hirokazu Tsunetsugu, Manfred Sigrist et Kazuo Ueda. *The ground-state phase diagram of the one-dimensional Kondo lattice model*. Rev. Mod. Phys., vol. 69, pages 809–864, Jul 1997. (Cité en pages 44 et 49.)
- [Wang 2006] Ling Wang, K. S. D. Beach et Anders W. Sandvik. *High-precision finite-size scaling analysis of the quantum-critical point of $S = 1/2$ Heisenberg antiferromagnetic bilayers*. Phys. Rev. B, vol. 73, page 014431, Jan 2006. (Cité en page 50.)
- [Wilson 1975] Kenneth G. Wilson. *The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*. Rev. Mod. Phys., vol. 47, pages 773–840, Oct 1975. (Cité en page 47.)
- [Wirth 2011] Georg Wirth, Matthias Olschlager et Andreas Hemmerich. *Evidence for orbital superfluidity in the P-band of a bipartite optical square lattice*. Nat Phys, vol. 7, pages 147–153, Feb 2011. (Cité en pages 50, 57 et 143.)
- [Yanagisawa 1995] Takashi Yanagisawa et Yukihiro Shimoi. *Ground State of the Kondo-Hubbard Model at Half Filling*. Phys. Rev. Lett., vol. 74, pages 4939–4942, Jun 1995. (Cité en page 49.)
- [Yosida 1957] Kei Yosida. *Magnetic Properties of Cu-Mn Alloys*. Phys. Rev., vol. 106, pages 893–898, Jun 1957. (Cité en page 47.)

Modèle de Rabi sur réseau

Sommaire

4.1	Introduction	96
4.2	Limite à un seul site : le modèle de Rabi	100
4.2.1	Obtention du Hamiltonien	101
4.2.2	Approximation de l'onde tournante	103
4.2.3	Étude numérique	104
4.3	Modèle de Rabi sur réseau 1D	108
4.3.1	Hamiltoniens et propriétés critiques	109
4.3.2	Propriétés de phase et diagramme de phase	112
4.3.3	Équivalence avec le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau	126
4.3.4	Vers le modèle de Dicke sur réseau	133
4.4	Conclusion	137
	Bibliographie	139

4.1 Introduction

Le modèle de Rabi a été introduit par Isidor RABI il y a 80 ans [Rabi 1936, Rabi 1937], afin de décrire la dynamique d'un spin dans un champ magnétique tournant. Dans ce modèle semi-classique, seul le spin était traité de manière quantique. On peut néanmoins traiter le champ lui aussi quantiquement, et en faire un modèle purement quantique. Cela fait du modèle de Rabi un exemple relativement simple de système quantique en interaction et celui-ci s'appliquera à la description de tout système à deux niveaux couplé à un mode d'un champ bosonique.

Nous avons largement parlé des systèmes pouvant être décrit par ce modèle dans la sous-section 1.1.2 (page 7) du chapitre 1 : un système à deux niveaux peut être un atome à deux niveaux, piégé dans une cavité, qui interagit avec un mode du champ électromagnétique autorisé par la cavité. Ou encore, un qbit placé dans un résonateur linéaire et interagissant avec un champ micro-onde est décrit par le modèle de Rabi. La figure 4.1 rappelle différents systèmes décrits par le modèle de Rabi.

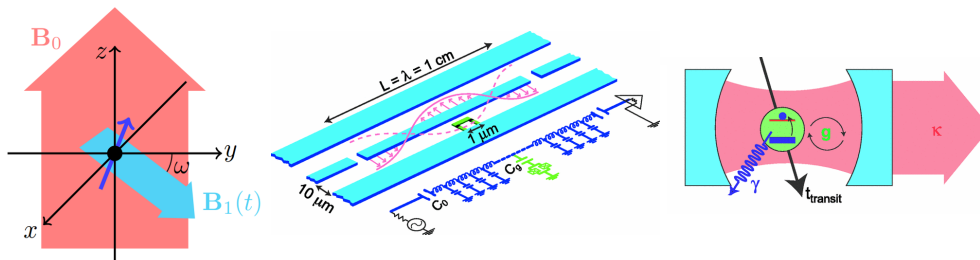


FIGURE 4.1 – Différents systèmes décrits par le modèle de Rabi : un spin dans un champ magnétique tournant, un atome à deux niveaux piégé dans une cavité puis un qbit dans un guide d'onde. Schémas provenant de [Blais 2004].

Cependant, malgré la simplicité et la place centrale du modèle de Rabi en physique quantique, celui-ci est longtemps resté insoluble analytiquement. Il n'existait que des solutions approximatives [Irish 2007, Larson 2007, Bishop 1999], jusqu'à ce que BRAAK propose pour la première fois [Braak 2011] une méthode de résolution exacte basée sur la représentation de Bargmann [Bargmann 1961]. Suite à ses travaux, d'autres méthodes de résolution ont été proposées, certaines dérivant de l'approche de BRAAK [Chen 2012] ou encore via une approche perturbative [Yu 2012].

Le Hamiltonien de Rabi (R) est donné par :

$$\mathcal{H}_R = \omega_l a^\dagger a + \frac{1}{2} \omega_s \sigma_z + g \sigma_x (a^\dagger + a), \quad (4.1)$$

$$\text{ou encore } \mathcal{H}_R = \omega_l a^\dagger a + \omega_s \sigma^+ \sigma^- + g(\sigma^+ + \sigma^-)(a^\dagger + a), \quad (4.2)$$

où a^\dagger et a sont les opérateurs création et annihilation pour l'oscillateur harmonique quantifié décrivant le champ bosonique d'énergie ω_l ; $\sigma_i (i = x, y, z)$ les matrices de Pauli et $\sigma^\pm = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$; ω_s l'énergie de transition entre les deux états du système à deux niveaux; g la force d'interaction. Cette dernière, qui a différentes interprétations dépendantes du système expérimental, correspond à la demi fréquence de Rabi du vide. Nous définissons le désaccord δ (aussi appelé *detuning*) tel que $\delta = \omega_s - \omega_l$. Pour une meilleure compréhension du système, on peut séparer en deux parties l'interaction entre système à deux niveaux et champ électromagnétique. La partie rotative, donnée par les opérateurs $\sigma^- a^\dagger$ et $\sigma^+ a$, crée (détruit) un photon en désexcitant (excitant) l'atome. La partie contre-rotative, donnée quant à elle par les opérateurs $\sigma^+ a^\dagger$ et $\sigma^- a$, crée (détruit) une excitation photonique et atomique simultanément.

La difficulté dans la résolution du modèle de Rabi vient du fait qu'il est compliqué de trouver une quantité conservée. Notamment, le nombre d'excitations n au sein du système, défini par l'opérateur $n = a^\dagger a + \sigma^+ \sigma^-$ ne commute pas avec le Hamiltonien et n'est donc pas une quantité conservée. Notons que pour des systèmes de CQED, les excitations sont plutôt appelées polaritons de cavité. Dans la suite du chapitre, nous préférons utiliser la dénomination d'excitations. Ainsi, jusqu'aux travaux de BRAAK [Braak 2011], les résultats exacts étaient numériques et issus de diagonalisation exacte dans un espace de Hilbert tronqué à une dimension finie. En 1960, JAYNES et CUMMINGS avaient cependant proposé une solution [Jaynes 1963], qui consiste à négliger certains termes du Hamiltonien afin de se trouver dans une situation où l'on peut le résoudre analytiquement. Cette approximation, que l'on appelle « approximation de l'onde tournante » (RWA pour *Rotating Wave Approximation*), consiste à supprimer les termes contre-rotatifs donnés par $a\sigma^-$ et $a^\dagger\sigma^+$, du Hamiltonien. En effet, ceux-ci couplent des états de nombre d'excitations différentes et mettent en jeu des énergies relativement importantes $\omega_s + \omega_l$. Les transitions mises en jeu sont donc moins probables vis-à-vis des transitions engendrées par les processus rotatifs, qui eux mettent en jeu des énergies de l'ordre de $\omega_s - \omega_l$.

Cette approximation est valide sous les conditions suivantes :

- le système est proche de la résonance, ce qui implique que $\omega_l \simeq \omega_s$, et on a $\omega_s - \omega_l \ll \omega_s + \omega_l$,
- $g \ll \omega_l, \omega_s$.

Sous ces conditions, et dans le cas où nous considérons un système sans pertes, nous sommes dans le régime de couplage fort que nous avons introduit au chapitre 1 (page 7). Désormais, nous nous focaliserons sur des systèmes de CQED et donc de l'interaction d'un atome à deux niveaux $|f\rangle$ et $|e\rangle$ (fondamental et excité) avec un mode du champ de la cavité. Les concepts mis en jeu seront naturellement extensibles aux autres systèmes décrits par le modèle de Rabi. Les conditions stipulées précédemment étant vérifiées dans les premiers systèmes de CQED, le Hamiltonien de Jaynes-Cummings (JC) fournit une bonne description de ces systèmes et s'écrit :

$$\mathcal{H}_{JC} = \omega_l a^\dagger a + \frac{1}{2} \omega_s \sigma_z + g(a^\dagger \sigma_- + \sigma^+ a). \quad (4.3)$$

Ici, le nombre d'excitations au sein du système, commute avec \mathcal{H}_{JC} et devient donc une quantité conservée. Notons que le modèle de Jaynes-Cummings présente la même symétrie $U(1)$ que le modèle de Bose-Hubbard que nous avons cité à plusieurs reprises dans les précédents chapitres. Ainsi, on peut résoudre analytiquement le Hamiltonien de JC, celui-ci devenant diagonal par bloc dans une infinité de sous-espaces à deux dimensions $(|e, n\rangle, |f, n+1\rangle)$.

Les récents progrès expérimentaux permettant d'atteindre des valeurs de plus en plus élevées pour g , le régime de couplage ultra-fort ($g \simeq \omega_l$) est devenu accessible [Niemczyk 2010, Fedorov 2010]. L'approximation de l'onde tournante n'est dans ce cas plus valide, et le modèle de Jaynes-Cummings ne fournit pas une description valide de ces systèmes. Il est donc crucial de pouvoir résoudre analytiquement le modèle de Rabi afin d'extraire sa physique fondamentale. Dans le cas d'un couplage ultra-fort, la symétrie $U(1)$ associée au modèle de Jaynes-Cummings et à la conservation du nombre d'excitations devient une symétrie Z_2 . On peut toutefois définir un opérateur parité tel que :

$$\mathcal{P} = e^{i\pi n}, \text{ avec } n = a^\dagger a + \sigma^+ \sigma^-, \quad (4.4)$$

qui, lui, commute avec le Hamiltonien de Rabi \mathcal{H}_R . Ce dernier couple donc des états ayant la même parité ± 1 et l'espace de Hilbert se divise en deux sous espaces de dimension infinie, H_+ (impair) et H_- (pair). La figure 4.2 représente les différents couplages possibles dans ces deux sous espaces : couplages entre états pairs dans H_+ , et états impairs dans H_- . Les couplages rotatifs couplent des états de même parité, mais aussi de même nombre d'excitations, et sont autorisés dans le modèle de Jaynes-Cummings contrairement aux couplages contre-rotatifs.

Regardons l'action de cet opérateur sur les différents degrés de liberté du système :

$$\mathcal{P}^\dagger a \mathcal{P} = -a \quad \mathcal{P}^\dagger a^\dagger \mathcal{P} = -a^\dagger \quad (4.5)$$

$$\mathcal{P}^\dagger \sigma_x \mathcal{P} = -\sigma_x \quad \mathcal{P}^\dagger \sigma_z \mathcal{P} = \sigma_z \quad (4.6)$$

Les opérateurs a et σ_x sont impairs sous \mathcal{P} , ce qui fait que leur valeur moyenne est nulle, quelques soient les valeurs de couplage g/ω_l . De ce fait, la symétrie Z_2

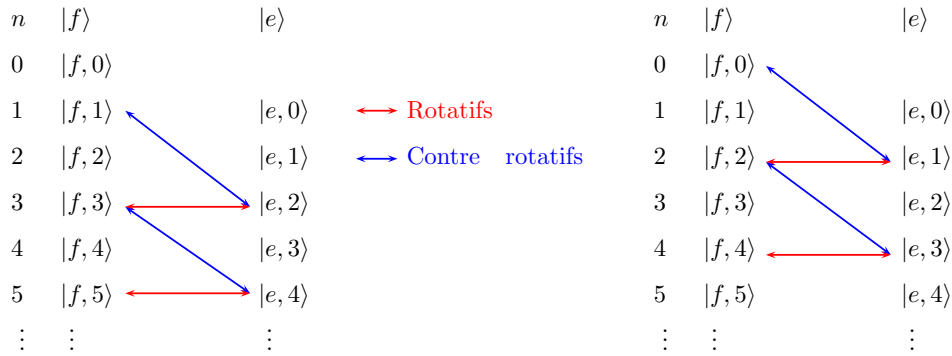


FIGURE 4.2 – Couplages rotatifs (représentés par les flèches rouges) et contre-rotatifs (représentés par les flèches bleus) dans H_+ (à gauche) et H_- (à droite).

n'est jamais brisée, ce qui est logique vu que le modèle de Rabi est de dimension zéro.

La section 4.2 suivante nous permettra de revenir plus en détail sur le modèle de Rabi. Celle-ci nous permettra de présenter quelques unes de ses caractéristiques, et de les comparer à celles du modèle de Jaynes-Cummings. De plus, nous comparerons certaines grandeurs obtenues numériquement avec les résultats de la référence [Yu 2012].

Le centre d'intérêt de cette thèse repose sur des systèmes sur réseau. Des systèmes de CQED sur réseau, initialement réalisés par HARTMANN *et al.* [Hartmann 2006] couplent justement plusieurs cavités opérant dans un régime de couplage fort. La conception de tels systèmes a ouvert la voie à l'étude de nombreux problèmes quantiques à N -corps, comme nous l'avons déjà discuté dans le chapitre 1 (page 7). Le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau (JCR) sera d'ailleurs le modèle le plus simple décrivant un réseau de cavités couplées. Ces dernières contiennent un système à deux niveaux couplé à un unique mode du champ électromagnétique. Le recouvrement des modes de cavités rend le déplacement des photons entre cavités possible. Ces systèmes exhibent de fortes non linéarités, qui provoquent un phénomène particulier appelé *photon blockade* [Birnbbaum 2005] : la fréquence de résonance de la cavité est modifiée, ce qui empêche un autre photon de pénétrer dans cette cavité. Ainsi, ces systèmes pourront présenter une transition de phase entre un état cohérent où toutes les cavités sont en phase et un état incohérent où le nombre d'excitations par cavité est quantifié. Ce comportement rappelle fortement la transition entre état superfluide (SF) et isolant de Mott (MI) observé dans le modèle de Bose-Hubbard.

Ces comportements seront fortement modifiés, voire supprimés, quand les cavités opèrent dans un régime de couplage ultra-fort. En effet, le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau devient inadapté à la description de ces systèmes. Il est plus pertinent de les décrire avec le modèle de Rabi sur réseau. Comme nous allons le voir par la suite, les termes contre-rotatifs, non présents dans le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau, modifient profondément la physique de ces systèmes. Nos connaissances de ce modèle se limitent à des approches approximatives type champ moyen [Schiró 2012, Schiró 2013] ou perturbative [Zheng 2011]. L'étude en champ moyen de SCHIRÓ *et al.* a montré que le modèle de Rabi sur réseau ne présenterait pas de transition MI-SF mais plutôt une transition entre un état cohérent et incohérent qui ressemble à la transition superradiante du modèle de Dicke [Dicke 1954]. Ce dernier décrit un système de N atomes à deux niveaux couplés avec un seul mode du champ électromagnétique. Pour une valeur d'interaction g/ω_l suffisamment élevée, on observe une transition superradiante dans la limite thermodynamique où $N \rightarrow \infty$.

La superradiance est un comportement qui est l'objet d'intenses investigations, aussi bien théoriques [Gross 1982, Rehler 1971] qu'expérimentales [Goban 2015, Tighineanu 2016]. Ce phénomène, issu du comportement collectif de N atomes, se traduit par une intensité d'un rayonnement émis lors de la désexcitation des atomes proportionnelle à N^2 (plutôt qu'à N , ce à quoi l'on s'attendrait).

La description donnée par Dicke était semi-classique : seuls les atomes étaient traités de manière quantique. TAVIS et CUMMINGS ont par la suite généralisé ce modèle à une description purement quantique [Tavis 1968, Tavis 1969]. Celui-ci est donc appelé modèle de Tavis-Cummings, mais par souci de simplicité, quand nous mentionnerons à nouveau le modèle de Dicke, nous parlerons bien entendu de sa version quantique introduite par TAVIS et CUMMINGS.

La section 4.3 (page 108) de ce chapitre sera justement dédiée à l'étude numérique du modèle de Rabi sur réseau, ainsi qu'à la comparaison avec le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau, qui lui, a été largement étudié. Ces études combineront deux approches : l'une sera faite de manière numériquement exacte, avec l'algorithme SGF, tandis que l'autre sera basée sur une approche de champ moyen.

4.2 Limite à un seul site : le modèle de Rabi

La figure 4.3 représente une cavité contenant un atome à deux niveaux, avec une énergie de transition entre l'état fondamental $|f\rangle$ et l'état excité $|e\rangle$ qui vaut ω_s . Ce système à deux niveaux interagit, au travers de g , avec un mode du champ d'énergie ω_l .

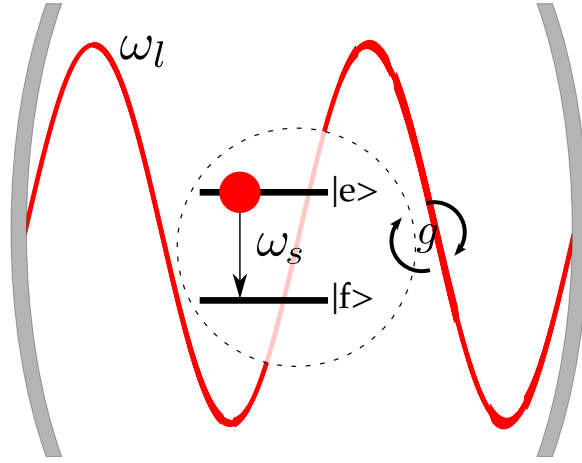


FIGURE 4.3 – Schématisation d'un système d'électrodynamique quantique en cavité, décrit par le modèle de Rabi. Le système à deux niveaux (ici représenté par un atome à deux niveaux), interagit au travers de g avec un mode d'énergie w_l du champ électromagnétique (ici représenté en rouge).

4.2.1 Obtention du Hamiltonien

De manière la plus générale possible, le Hamiltonien d'un atome interagissant avec un champ électromagnétique s'écrit :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_a + \mathcal{H}_R + \mathcal{H}_{a,R}. \quad (4.7)$$

\mathcal{H}_a décrit l'atome isolé, \mathcal{H}_R le rayonnement électromagnétique, et $\mathcal{H}_{a,R}$ l'interaction entre ces deux derniers.

4.2.1.1 Hamiltonien de la partie atomique

Le Hamiltonien d'un atome isolé est donné par :

$$\mathcal{H}_a = \sum_i E_i |i\rangle \langle i|, \quad (4.8)$$

avec E_i les niveaux énergétiques de l'atome. Sous l'hypothèse d'un atome à deux niveaux, nous considérons uniquement l'état fondamental $|f\rangle$ et le premier état excité $|e\rangle$ de l'atome :

$$\mathcal{H}_a = E_f |f\rangle \langle f| + E_e |e\rangle \langle e|, \quad (4.9)$$

qui se réécrit finalement, en supposant un écart énergétique entre $|f\rangle$ et $|e\rangle$ qui vaut ω_s :

$$\mathcal{H}_a = \frac{\omega_s}{2} (|e\rangle \langle e| - |f\rangle \langle f|) = \frac{\omega_s}{2} \sigma_z. \quad (4.10)$$

4.2.1.2 Hamiltonien de la partie bosonique

Le Hamiltonien décrivant le champ électromagnétique s'écrit :

$$\mathcal{H}_R = \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}). \quad (4.11)$$

Comme nous nous intéressons au cas d'un atome couplé à un seul mode l du champ, il en vient directement que l'on peut décomposer \mathcal{H}_R en deux :

$$\mathcal{H}_R = \omega_l (a_l^\dagger a_l + \frac{1}{2}) + \sum_{\mathbf{k} \neq l} \omega_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}), \quad (4.12)$$

et négliger le second terme. On peut de plus supprimer le terme $1/2$ qui induit juste un décalage énergétique, on obtient donc finalement :

$$\mathcal{H}_R = \omega_l a_l^\dagger a_l. \quad (4.13)$$

4.2.1.3 Hamiltonien d'interaction $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ en jauge de Coulomb

Le Hamiltonien d'interaction entre l'atome et le champ s'écrit [Aspect 2003] :

$$\mathcal{H}_{a,R} = - \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} \mathbf{p}_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha}) + \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} (\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha}))^2. \quad (4.14)$$

Le potentiel vecteur $\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha})$ se réduit à sa partie transverse vu que nous sommes en jauge de Coulomb, et s'écrit :

$$\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha}) = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\omega_{\mathbf{k}}} (a_{\mathbf{k}}^\dagger \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} + a_{\mathbf{k}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha}}), \quad (4.15)$$

où \mathbf{p}_{α} est l'opérateur impulsion d'une particule α de masse m_{α} constituant l'atome et $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}}$ est le vecteur polarisation associé au mode \mathbf{k} . On considère que le champ électromagnétique est constant au niveau de l'atome, et donc que sa longueur d'onde est grande devant la taille de l'atome, ce qui se traduit par : $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{\alpha} \ll 1$. On peut donc effectuer l'approximation des grandes longueurs d'ondes et remplacer $\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_{\alpha})$ par sa valeur $\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_0)$, où \mathbf{r}_0 est le vecteur position du centre de masse confondu avec le noyau atomique. De plus, on rappelle que l'on considère l'interaction avec un seul mode l du champ :

$$\mathcal{H}_{a,l} = - \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}}{m_{\alpha}} p_{\alpha} \mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_0) + \sum_{\alpha} \frac{q_{\alpha}^2}{2m_{\alpha}} \mathbf{A}_{\perp}^2(\mathbf{r}_0), \quad (4.16)$$

avec :

$$\mathbf{A}_{\perp}(\mathbf{r}_0) = A_{\omega_l} \boldsymbol{\varepsilon}_l (a_l^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0} + a_l e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0}). \quad (4.17)$$

Le terme quadratique en $\mathbf{A}_l(\mathbf{r}_0)$ est un scalaire qui n'agit que sur le rayonnement, que nous choisissons de négliger. Quand le champ est traité de manière classique, il existe une équivalence entre le Hamiltonien $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ en jauge de Coulomb et le

Hamiltonien dipolaire électrique $\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$ en jauge de Göppert-Mayer, et l'on peut passer de l'un à l'autre à l'aide d'une transformation unitaire. Quand le champ est traité de manière quantique, on a la généralisation de cette transformation de jauge, sous la transformation unitaire $T = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{d} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R})\right)$.

Sous cette transformation, le Hamiltonien d'interaction se réécrit :

$$\mathcal{H}_{a,l} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}_0), \quad (4.18)$$

avec $\mathbf{E}_\perp(\mathbf{r}_0) = E_{\omega_l} \boldsymbol{\varepsilon}_l (a_l^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0} + a_l e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0}) = E_{\omega_l} \boldsymbol{\varepsilon}_l (a_l^\dagger + a_l)$ en prenant \mathbf{r}_0 comme origine. L'opérateur dipôle atomique \mathbf{d} s'écrit, dans la base des états propres de l'atome :

$$\mathbf{d} = \sum_{i,j} |i\rangle \langle i| \mathbf{d} |j\rangle \langle j| = |f\rangle \mathbf{d}_{fe} \langle e| + |e\rangle \mathbf{d}_{ef} \langle f| = \mathbf{d}(|f\rangle \langle e| + |e\rangle \langle f|) \quad (4.19)$$

où nous considérons un atome à deux niveaux $|f\rangle$ et $|e\rangle$, les éléments de matrice $\langle e| \mathbf{d} |e\rangle$ et $\langle f| \mathbf{d} |f\rangle$ étant nul (\mathbf{d} opérateur impair), et $\mathbf{d}_0 = \mathbf{d}_{fe} = \mathbf{d}_{ef}$ considéré réel. Les opérateurs $|f\rangle \langle e|$ et $|f\rangle \langle f|$ correspondent respectivement aux opérateurs σ^- et σ^+ , et font passer un atome de son état excité (fondamental) à son état fondamental (excité). On a de plus $\sigma^- + \sigma^+ = \sigma_x$. Le Hamiltonien d'interaction se réécrit sous sa forme finale :

$$\mathcal{H}_{a,l} = g \sigma_x (a_l^\dagger + a_l), \quad (4.20)$$

Avec $g = -E_{\omega_l} \mathbf{d} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$, constante de couplage entre l'atome et le mode du champ. Cette constante g peut aussi s'écrire : $g = \sqrt{\mathbf{d}_0^2 \omega_l / \varepsilon V_{mode}}$. Le couplage sera d'autant plus fort que le volume de confinement du champ V_{mode} sera faible, et que l'élément de matrice dipolaire sera élevé.

En sommant les différents Hamiltoniens obtenus sous les précédentes hypothèses, on obtient finalement le Hamiltonien de Rabi \mathcal{H}_R qui s'écrit :

$$\mathcal{H}_R = \omega_l a^\dagger a + \frac{1}{2} \omega_s \sigma_z + g \sigma_x (a^\dagger + a) \quad (4.21)$$

$$\text{ou encore } \mathcal{H}_R = \omega_l a^\dagger a + \omega_s \sigma^+ \sigma^- + g(\sigma^+ + \sigma^-)(a^\dagger + a), \quad (4.22)$$

où l'on a supprimé l'indice l du mode du champ pour une meilleure lisibilité.

4.2.2 Approximation de l'onde tournante

Nous revenons dans cette partie sur l'approximation de l'onde tournante, afin de vérifier les conditions sous lesquelles celle-ci est valide. Nous partons de l'hypothèse que g est en effet petit devant les autres échelles énergétiques ω_l et ω_s , nous sommes donc dans un régime de couplage faible.

On peut décomposer le Hamiltonien de Rabi sous la forme $\mathcal{H}_R = \mathcal{H}_0 + \mathcal{W}$, avec

$\mathcal{W} \ll \mathcal{H}_0$, et $\mathcal{H}_0 = \omega_l a^\dagger a + \omega_s \sigma^+ \sigma^-$, $\mathcal{W} = g(\sigma^+ a + \sigma^- a^\dagger + \sigma^+ a^\dagger + \sigma^- a)$, puis nous traitons \mathcal{W} comme une perturbation.

La théorie des perturbations nous permet notamment de calculer des probabilités de transitions entre un état initial i et final f , donnée par la formule suivante :

$$P_{i \rightarrow f} \propto \left| \frac{\langle \phi_f | \mathcal{W} | \phi_i \rangle}{(E_f - E_i)} \right|^2 \quad (4.23)$$

Ainsi, en appliquant l'équation 4.23 aux quatre différents processus possibles, on calcule les probabilités de transitions associées qui sont données par :

$$P_{|f,n\rangle \rightarrow |e,n-1\rangle} \propto \left| \frac{\langle e, n-1 | \mathcal{W} | f, n \rangle}{(E_{|e,n-1\rangle} - E_{|f,n\rangle})} \right|^2 \sim \left| \frac{g}{\omega_s - \omega_l} \right|^2 \quad (4.24)$$

$$P_{|e,n\rangle \rightarrow |f,n+1\rangle} \propto \left| \frac{\langle f, n+1 | \mathcal{W} | e, n \rangle}{(E_{|f,n+1\rangle} - E_{|e,n\rangle})} \right|^2 \sim \left| \frac{g}{\omega_s - \omega_l} \right|^2 \quad (4.25)$$

$$P_{|f,n\rangle \rightarrow |e,n+1\rangle} \propto \left| \frac{\langle e, n+1 | \mathcal{W} | f, n \rangle}{(E_{|e,n+1\rangle} - E_{|f,n\rangle})} \right|^2 \sim \left| \frac{g}{\omega_s + \omega_l} \right|^2 \quad (4.26)$$

$$P_{|e,n\rangle \rightarrow |f,n-1\rangle} \propto \left| \frac{\langle f, n-1 | \mathcal{W} | e, n \rangle}{(E_{|f,n-1\rangle} - E_{|e,n\rangle})} \right|^2 \sim \left| \frac{g}{\omega_s + \omega_l} \right|^2 \quad (4.27)$$

Les probabilités de transitions 4.24 et 4.25 sont associés aux processus rotatifs, tandis que les expressions 4.26 et 4.27 sont les probabilités de transitions associées aux processus contre-rotatifs. Dans le cas où $\delta = \omega_s - \omega_l \ll \omega_s + \omega_l$, les processus contre-rotatifs n'interviennent que très peu vis à vis des processus rotatifs, on peut donc les négliger. L'approximation de l'onde tournante est donc validée, sous réserve que $g \ll \omega_l$ et $\omega_s - \omega_l \ll \omega_s + \omega_l$.

4.2.3 Étude numérique

Cette partie est dédiée à l'étude numérique du modèle de Rabi, afin de souligner certaines de ses caractéristiques nécessaire à la compréhension du modèle sur réseau.

Nous étudierons préférentiellement l'impact de la force de couplage g . Pour cela, nous utiliserons une technique de diagonalisation exacte, en nous restreignant à un nombre maximal d'excitations $n_{max} = 400$, ce qui tronque l'espace de Hilbert à une dimension $d = 2(n_{max} + 1) = 802$. Par ailleurs, nous confronterons quelques grandeurs calculées analytiquement avec les résultats de YU *et al.* [Yu 2012] aux résultats issus de la diagonalisation exacte. L'approche perturbative qu'ils utilisent permet d'obtenir des expressions qui donne directement l'énergie ou le nombre

d'excitations dans l'état fondamental.

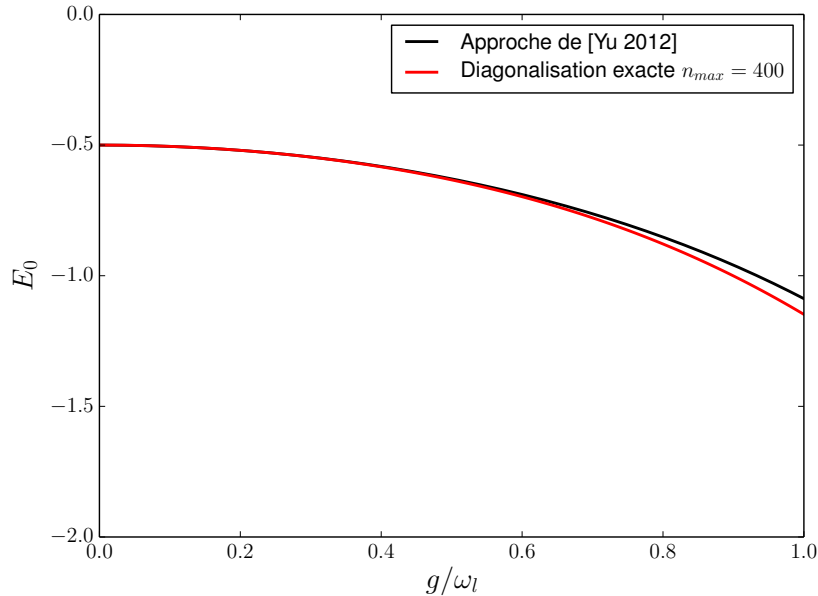


FIGURE 4.4 – Énergie de l'état fondamental du modèle de Rabi en fonction de g/ω_l , obtenue par une expression issue de la référence [Yu 2012] ainsi que par une méthode de diagonalisation exacte.

La figure 4.4 suit l'évolution de l'énergie de l'état fondamental du modèle de Rabi en fonction de g/ω_l . On voit que l'approche analytique de [Yu 2012] fournit des résultats en bon accord avec ceux de la diagonalisation exacte, malgré un écart qui commence à devenir significatif pour de plus grandes valeurs de g/ω_l . Cet écart est logique car nous sommes donc dans une zone où les termes contre-rotatifs interviennent dans les processus de transition de manière beaucoup plus importante. L'approximation utilisée dans la référence [Yu 2012], qui consiste à négliger les termes d'ordre supérieur à 1 pour a et a^\dagger devient de moins en moins justifiée.

Ensuite, nous avons calculé numériquement puis tracé (voir Fig. 4.5) le nombre d'excitations en fonction de g/ω_l . Pour le modèle de Rabi, on voit que celui-ci augmente très fortement. Cette tendance est à garder en mémoire, car elle pourra éventuellement entraîner des problèmes de convergence, notamment quand on étudiera le système sur réseau où le nombre d'excitations total pourra devenir très important. Au contraire, pour le modèle de Jaynes-Cummings, le nombre d'excitations est quantifié, et passe de zéro à une excitation. Ce comportement reflète directement la différence de symétrie entre les deux modèles.

Enfin, la figure 4.6 compare le nombre d'excitations photonique, obtenue analytiquement et par diagonalisation exacte pour le modèle de Rabi. Comme pour

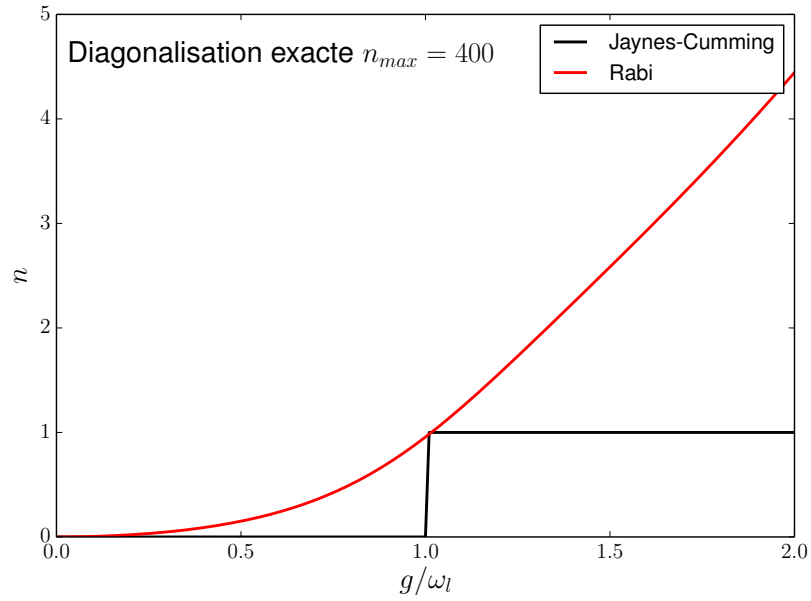


FIGURE 4.5 – Nombre d’excitations pour les modèles de Rabi et de Jaynes-Cummings en fonction de g/ω_l , obtenus par diagonalisation exacte.

l’énergie, l’écart commence à devenir significatif pour les grandes valeurs de g/ω_l , ici de manière plus marquée, du fait de l’approximation utilisée dans [Yu 2012]. Leur approche perturbative décrit de manière plutôt inexacte la physique du modèle de Rabi quand on atteint des régimes tels que $g/\omega_l \sim 0.4$.

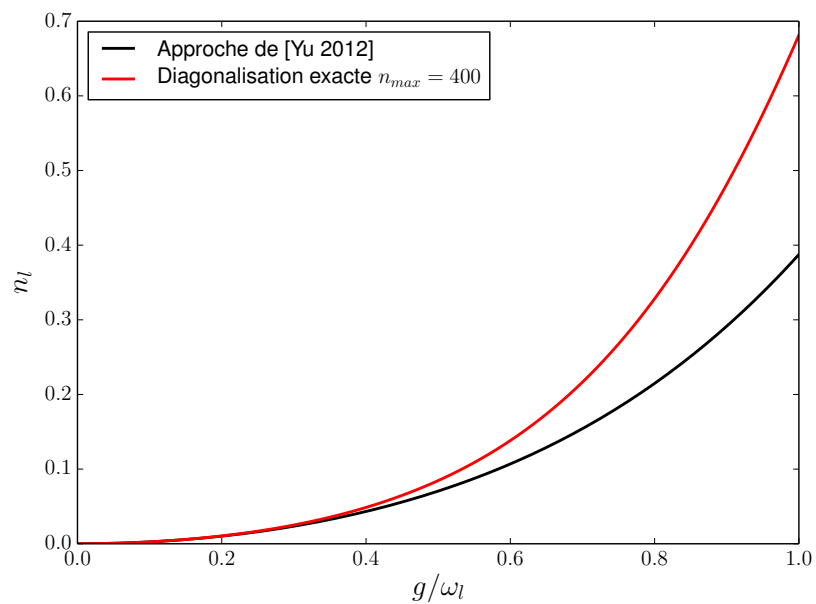


FIGURE 4.6 – Nombre d’excitations photoniques en fonction de g/ω_l , obtenue par une expression issue de la référence [Yu 2012] ainsi que par une méthode de diagonalisation exacte.

4.3 Modèle de Rabi sur réseau 1D

Nous étudions dans cette section le modèle de Rabi sur réseau, dans le cas d'un réseau unidimensionnel contenant L sites. Un système schématisé par la figure 4.7 est décrit par ce modèle. Chaque nœud du réseau est occupé par une cavité de la figure 4.3, celle-ci opérant dans un régime de couplage ultra-fort, et contenant un atome à deux niveaux équivalent à un spin $1/2$. Chaque cavité est décrite par le Hamiltonien de Rabi 4.22, présenté dans la section 4.2 (page 100) précédente, et est couplée à un seul mode du champ électromagnétique. Enfin, les photons peuvent se mouvoir le long du réseau par effet tunnel, en ne considérant les déplacements qu'entre plus proches voisins.

On s'attachera tout d'abord à vérifier les travaux de la référence [Schiró 2013], en utilisant notre algorithme de Monte-Carlo quantique. Schiró *et al.* prédisent deux phases. Une phase incohérente, que l'on appellera isolant de Rabi (RI), est juste un ensemble de systèmes à deux niveaux qui ne présentent aucun comportement collectif. Au contraire, la phase cohérente, qui brise la symétrie Z_2 , a la caractéristique d'être superradiante et ferroélectrique : les systèmes à deux niveaux se polarisent tandis que le champ de photons devient cohérent.

Nous approfondirons aussi ces résultats, en étudiant différentes fonctions de Green, afin de mieux caractériser les propriétés des différentes phases. De plus, nous explorerons l'équivalence entre les modèles de Rabi et de Jaynes-Cummings sur réseau plus en détail. Pour cela, nous procéderons à des analyses exactes grâce aux simulations de Monte-Carlo quantique mais nous réutiliserons aussi une approche de champ moyen.

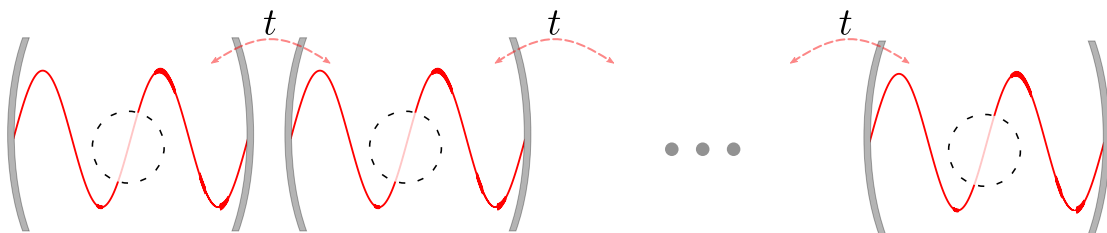


FIGURE 4.7 – Schématisation du modèle de Rabi sur réseau unidimensionnel. Plusieurs cavités, comme celles présentées sur la figure 4.3 sont couplées et les photons peuvent se déplacer entre sites plus proches voisins, par recouvrement des modes de cavité.

Présentons maintenant les différents Hamiltoniens sur lesquels nous allons nous concentrer lors de notre étude, ainsi que leurs propriétés.

4.3.1 Hamiltoniens et propriétés critiques

Nous commençons par le Hamiltonien de Rabi sur réseau (RR), qui régit le système présenté sur la figure 4.7. Celui-ci est donné par :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{RR} = & - t \sum_i (a_i + a_i^\dagger)(a_{i+1} + a_{i+1}^\dagger) \\ & + g \sum_i (\sigma_i^- + \sigma_i^+)(a_i + a_i^\dagger) \\ & + \omega_s \sum_i \sigma_i^+ \sigma_i^- + \omega_l \sum_i a_i^\dagger a_i. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Afin d'étudier plus facilement les effets des termes contre-rotatifs, on réécrit le Hamiltonien sous une forme plus générale, en séparant les termes qui couplent des états de densité différentes (termes contre-rotatifs, indicés par « cr ») des termes couplant les états de même densité (termes rotatifs, indicés par « r ») :

$$\mathcal{H}_{RR} = - t_r \sum_i (a_i a_{i+1}^\dagger + \text{h.c.}) - t_{cr} \sum_i (a_i a_{i+1} + \text{h.c.}) \quad (4.29)$$

$$+ g_r \sum_i (\sigma_i^+ a_i + \sigma_i^- a_i^\dagger) + g_{cr} \sum_i (\sigma_i^+ a_i^\dagger + \sigma_i^- a_i) \quad (4.30)$$

$$+ \omega_s \sum_i \sigma_i^+ \sigma_i^- + \omega_l \sum_i a_i^\dagger a_i. \quad (4.31)$$

L'opérateur a_i (a_i^\dagger) décrit la destruction (création) d'un photon sur la i -ème cavité. L'opérateur σ_i décrit le système à deux niveaux, où σ_i^+ (σ_i^-) fait passer l'atome de l'état fondamental à l'état excité (de l'état excité à l'état fondamental). Explicitons maintenant les différents termes :

- Le terme 4.29 décrit le déplacement des photons sur le réseau. La partie rotative, détruit (créé) un photon au site i pour le recréer (détruire) au site $i + 1$, tandis que la partie contre-rotative détruit (créé) simultanément deux excitations photoniques sur deux sites voisins.
- Le terme 4.30 décrit la partie interaction entre système à deux niveaux et champ électromagnétique. La partie rotative crée (détruit) un photon en désexcitant (excitant) un atome, tandis que la partie contre-rotative crée (détruit) une excitation photonique et atomique simultanément.
- Le terme 4.31, qui est diagonal, décrit l'énergie des excitations photoniques et atomiques. Dans ce qui suit, nous définirons le désaccord δ tel que $\delta = \omega_s - \omega_l$.

Discutons maintenant de la symétrie de cet Hamiltonien. L'ajout des termes cinétiques ne modifie pas la symétrie Z_2 du modèle de Rabi. Nous rappelons que cette symétrie implique une non conservation du nombre total d'excitation dans le

système, et on a $[N, \mathcal{H}_{RR}] \neq 0$, où $N = N_s + N_l$, N_s et N_l étant respectivement le nombre d'atomes excités $\sum_i \sigma_i^+ \sigma_i^-$ et le nombre de photons $\sum_i a_i^\dagger a_i$. Sous l'approximation de l'onde tournante, le Hamiltonien de Rabi sur réseau se réduit au Hamiltonien de Jaynes-Cummings sur réseau (JCR) qui garde une symétrie $U(1)$, et conserve donc le nombre de particules. Il aura donc le même comportement critique que le modèle de Bose-Hubbard, que nous avons largement exploré dans le chapitre 3. Celui-ci s'écrit (nous en profitons par ailleurs pour rappeler le Hamiltonien de Bose-Hubbard à une seule espèce de bosons) :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{JCR} = & -t_r \sum_i (a_i a_{i+1}^\dagger + \text{h.c.}) + g_r \sum_i (\sigma_i^+ a_i + \sigma_i^- a_i^\dagger) \\ & + \omega_s \sum_i \sigma_i^+ \sigma_i^- + \omega_l \sum_i a_i^\dagger a_i, \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$\mathcal{H}_{BH} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + \text{h.c.}) + \frac{\mathcal{U}}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \mu \sum_i n_i. \quad (4.33)$$

Dans un régime de couplage fort $t/g(\mathcal{U}) \ll 1$ et pour une densité d'excitations entière, le système adopte une phase de Mott, où le nombre d'excitations par site est égal à la densité. À l'inverse, le système adopte une phase superfluide où les photons sont délocalisés dans le système dans un régime de couplage faible $t/g(\mathcal{U}) \gg 1$.

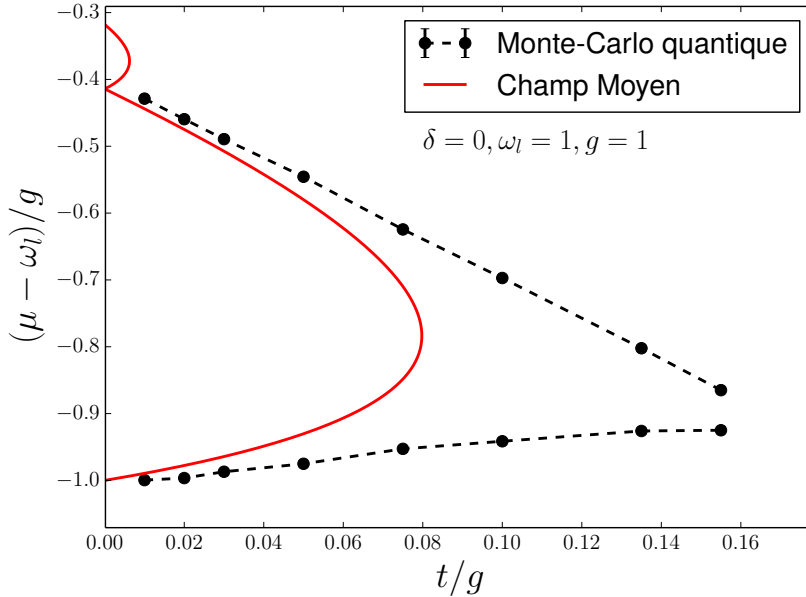


FIGURE 4.8 – Diagrammes de phase, obtenu en champ moyen et en Monte-Carlo quantique ($L = 20, \beta\omega_l = 20$) pour le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau. On observe le même comportement que pour le modèle de Bose-Hubbard : des phases de Mott avec un nombre d'excitations entier, entourées par une phase superfluide.

La figure 4.8 montre le diagramme de phase du modèle de Jaynes-Cummings sur réseau dans le plan $(t/g, (\mu - \omega_l)/g)$. On remarque la forte similitude avec le diagramme de phase du modèle de Bose-Hubbard (voir Fig. 3.5 page 55), présenté dans la section 3.2 du chapitre 3.

Comme nous allons le voir dans la suite, l'approche de champ moyen permet d'obtenir de bons résultats qualitatifs, et ce beaucoup plus rapidement que notre algorithme SGF. Afin d'obtenir facilement des résultats sur les modèles présentés précédemment, et de les comparer plus en détail, nous reprenons l'approche de la référence [Schiró 2013], et nous discriminerons deux cas : $t = t_r = t_{cr}$ et $t = t_r, t_{cr} = 0$. Pour le détail du calcul de l'obtention du Hamiltonien de champ moyen, nous renvoyons le lecteur vers la partie dédiée à la théorie de champ moyen à page 28 du chapitre 2.

4.3.1.1 Hamiltonien de champ moyen pour $t = t_r = t_{cr}$

Ici, l'approche présentée dans le chapitre 2 est légèrement modifiée. En effet, le paramètre d'ordre n'est pas défini comme $\psi_0 = \langle a_i^\dagger \rangle^* = \langle a_i \rangle$, mais comme $\psi_0 = \langle a_i^\dagger + a_i \rangle$, qui est réel par définition. On réécrit la partie cinétique du Hamiltonien de RR, puis on néglige les termes quadratiques dans les fluctuations :

$$\mathcal{H}_i^c = - t(a_i^\dagger + a_i)(a_{i+1}^\dagger + a_{i+1}) \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} &\simeq - t((a_i^\dagger + a_i)\langle a_{i+1}^\dagger + a_{i+1} \rangle + \langle a_i^\dagger + a_i \rangle(a_{i+1}^\dagger + a_{i+1})) \\ &\quad - \langle a_i^\dagger + a_i \rangle \langle a_{i+1}^\dagger + a_{i+1} \rangle. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Suite à cette approximation, le Hamiltonien de Rabi sur réseau se réduit à un premier Hamiltonien de champ moyen qui s'écrit :

$$\mathcal{H}_{RR}^{CM1} = -2t\psi_0(a_i + a_i^\dagger) + t\psi_0^2 + H_R, \quad (4.36)$$

avec H_R donné par l'expression 4.2. Nous diagonaliserons numériquement ce Hamiltonien afin de définir la limite entre phase incohérente ($\psi_0 = 0$) et cohérente ($\psi_0 \neq 0$) et calculer différentes observables tels que les nombres d'excitations.

4.3.1.2 Hamiltoniens de champ moyen pour $t = t_r, t_{cr} = 0$

Dans le cas où les termes contre-rotatifs pour la partie cinétique du Hamiltonien de Rabi sur réseau sont nuls, le paramètre d'ordre est défini de la même manière que dans l'approche du chapitre 2, et on a $\psi_0 = \langle a_i^\dagger \rangle^* = \langle a_i \rangle$, qui est supposé réel. En effet, les termes contre-rotatifs étant nul, le terme cinétique retrouve une invariance par rotation de phase. Sous cette forme, on obtient un second Hamiltonien de champ moyen :

$$\mathcal{H}_{RR}^{CM2} = -2t\psi_0(a + a^\dagger) + 2t\psi_0^2 + H_R. \quad (4.37)$$

Nous nous intéresserons à l'état fondamental de cet Hamiltonien surtout lorsque nous comparerons les modèles de Rabi et Jaynes-Cummings sur réseau, afin d'étudier l'influence des termes contre-rotatifs des interactions sur site uniquement. Le Hamiltonien de champ moyen pour le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau s'écrit, quant à lui :

$$\mathcal{H}_{JCR}^{CM} = -2t\psi_0(a + a^\dagger) + 2t\psi_0^2 + H_{JC}, \quad (4.38)$$

avec H_{JC} donné par l'expression 4.3.

4.3.2 Propriétés de phase et diagramme de phase

Nous explorons dans cette partie le diagramme de phase ainsi que les propriétés de phase de notre système, en commençant avec une étude numérique via l'algorithme SGF. Nous considérerons tout d'abord le cas où l'on fixe le désaccord $\delta = 0$, $g_r = g_{cr} = g$ et $t_r = t_{cr} = t$. Nous poserons $\omega_l = \omega_s = 1$ afin de fixer l'échelle d'énergie. Nous nous placerons bien entendu dans une limite de température nulle. Pour cela, nous fixerons $\beta = L/\omega_l$, où $1/\beta \ll t, g, \omega_{l,s}$ ce qui nous permet de nous affranchir de tous les effets thermiques et donc d'étudier l'évolution de notre système quand seules les fluctuations quantiques interviennent. Pourtant, nous nous sommes rendus compte qu'une valeur de $\beta\omega_l$ fixée à 20 suffisait pour atteindre la limite de température nulle. En effet, ce système ayant une symétrie discrète, tout comme des modèles d'Ising, le spectre énergétique présente des gaps indépendants de la taille. Nous étudierons des systèmes de tailles $L = 10, 15, 20, 25, 30$.

4.3.2.1 Plan systématique d'une étude complète

L'étude du système sera déduite de l'analyse des quantités ou données présentés ci-dessous :

- Diagramme de phase dans le plan $(t/\omega_l, g/\omega_l)$ ou $(t/g, (\mu - \omega_l)/g)$, obtenu grâce à des techniques de *finite size scaling* des données acquises par les simulations de Monte-Carlo quantique ou de champ moyen.
- Fonctions de Green à un corps pour les photons et les atomes. Ces fonctions renseignent sur les corrélations qui existent dans le système. Leur évolution en fonction de la distance R donne une signature claire de la phase adoptée par le système. Dans un système unidimensionnel à symétrie discrète, nous nous attendons à observer une décroissance exponentielle dans la phase isolante, incohérente, ce qui valide l'absence d'ordre à longue portée. Dans la phase cohérente, nous nous attendons à observer une saturation des valeurs de ces fonctions à un plateau, ce qui témoigne d'une cohérence de phase

parfaite et donc d'un système qui adopte une phase condensée.

$$\mathcal{G}_{a^\dagger a}(R) = \frac{1}{2L} \sum_i \langle a_i^\dagger a_{i+R} + \text{h.c.} \rangle \quad (4.39)$$

$$\mathcal{G}_{\sigma^+ \sigma^-}(R) = \frac{1}{2L} \sum_i \langle \sigma_i^+ \sigma_{i+R}^- + \text{h.c.} \rangle \quad (4.40)$$

$$\mathcal{G}_{a^\dagger \sigma^-}(R) = \frac{1}{2L} \sum_i \langle a_i^\dagger \sigma_{i+R}^- + \text{h.c.} \rangle \quad (4.41)$$

$$\mathcal{G}_{a^\dagger a^\dagger}(R) = \frac{1}{2L} \sum_i \langle a_i^\dagger a_{i+R}^\dagger + \text{h.c.} \rangle \quad (4.42)$$

$$\mathcal{G}_{\sigma^+ \sigma^+}(R) = \frac{1}{2L} \sum_i \langle \sigma_i^+ \sigma_{i+R}^+ + \text{h.c.} \rangle \quad (4.43)$$

$$\mathcal{G}_{a^\dagger \sigma^+}(R) = \frac{1}{2L} \sum_i \langle a_i^\dagger \sigma_{i+R}^+ + \text{h.c.} \rangle \quad (4.44)$$

Par exemple, l'expression 4.39 représente la valeur moyenne de la probabilité de détruire un photon a au site i et de la recréer à une distance R .

- Densité de photons $n_l = N_l/L$, densité d'atomes excités $n_s = N_s/L$, et densité d'excitations totale $n = n_l + n_s$.
- La fraction condensée pour les photons \mathcal{C}_l , qui sera le paramètre d'ordre pour la cohérence des photons. Celle-ci correspond à la transformée de Fourier de la fonction de Green à un corps 4.39 d'impulsion nulle et s'écrit :

$$\mathcal{C}_l = \frac{1}{N_l} \sum_R \mathcal{G}_{a^\dagger a}(R) \quad (4.45)$$

- La combinaison linéaire de différentes fonctions de Green pour les atomes permet d'obtenir les corrélations spin-spin à longue distance selon l'axe x , qui s'écrit :

$$\mathcal{C}_s = \frac{1}{2L} \sum_i \langle \sigma_i^x \sigma_{i+L/2}^x \rangle \quad (4.46)$$

4.3.2.2 Transition entre état incohérent et état cohérent

Afin de commencer notre étude, nous traçons, à g/ω_l constant ($g/\omega_l = 0.75$ dans le cas suivant), l'évolution de la fraction condensée des photons \mathcal{C}_l (équation 4.45) en fonction de t/ω_l (voir Fig. 4.9). Nous observons, comme l'avait prédit Schiró *et al.* [Schiró 2013], que le système subit une évolution d'un état incohérent, à faible t , jusqu'à un champ cohérent à grandes valeurs de t qui vient briser la symétrie Z_2 . Dans l'état incohérent, on voit que \mathcal{C}_l est différent de zéro, alors que l'on s'attend à une valeur nulle quand $t/\omega_l \rightarrow 0$. Il s'agit en fait d'effets de taille finie : au fur et à mesure que l'on augmente la taille, la valeur de \mathcal{C}_l tend vers zéro dans l'état

incohérent.

Dans la phase cohérente, la fraction condensée atteint la valeur limite de l'unité : tous les photons sont condensés. Cette caractéristique est de premier abord frappante, car ce comportement est atypique pour un système unidimensionnel, où l'on s'attend à une phase superfluide mais pas condensée. En fait, ce comportement provient de la symétrie Z_2 du Hamiltonien, qui est une symétrie discrète et non continue. Dans ce cas, le théorème de Mermin-Wagner-Hohenberg [Hohenberg 1967, Mermin 1966, Mermin 1968] autorise une condensation de Bose-Einstein, et donc une cohérence de phase parfaite, à $T = 0$.

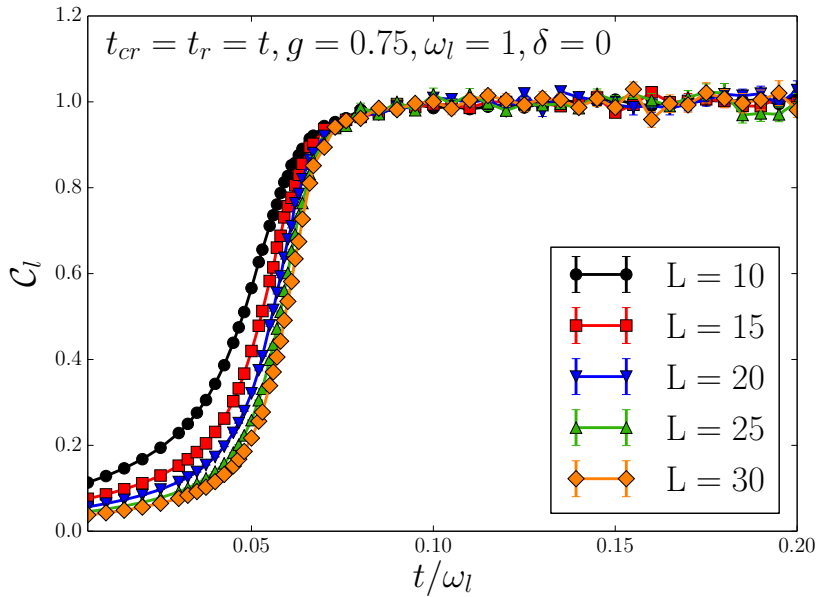


FIGURE 4.9 – Fraction condensée des photons \mathcal{C}_l en fonction de t/ω_l pour un désaccord δ nul pour différentes tailles. Le système subit une transition de phase entre un état incohérent (isolant de Rabi) et un état cohérent (phase superradiante).

Ce comportement est aussi visible sur les fonctions de Green : dans la phase cohérente, celles-ci atteignent un plateau à longue distance, au lieu d'une décroissance en loi de puissance généralement observée dans des systèmes unidimensionnels, comme le montre la figure 4.10.

Les corrélations spin-spin à longue distance suivent le même comportement que la fraction condensée. Tandis que les photons deviennent cohérents, les spins se couplent au champ électromagnétique et deviennent ferromagnétiques. Dans le contexte d'atomes pour les systèmes à deux niveaux, il convient plutôt de parler de ferroélectricité : les atomes se polarisent. Une fois encore, on observe un ordre à longue portée (voir figure 4.11) où les corrélations spin-spin à longue distance tendent vers leur valeur maximale de $1/4$ pour de grandes valeurs de t/ω_l .

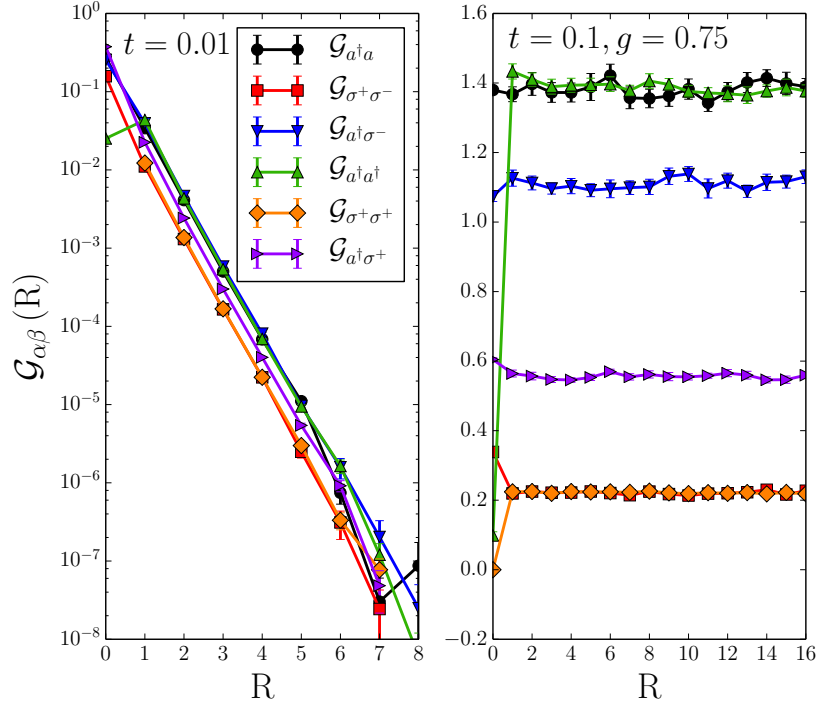


FIGURE 4.10 – Fonctions de Green en fonction de la distance dans la phase incohérente (à gauche) et cohérente (à droite). Dans la phase incohérente, toutes les fonctions de Green décroissent exponentiellement, tandis que dans la phase cohérente, celles-ci atteignent un plateau.

Nous regardons aussi l'évolution du nombre d'excitations au sein du système en fonction de t/ω_l (voir figure 4.12). On observe un comportement singulier, associé au fait que le nombre d'excitations ne soit pas conservé. En effet, ce dernier ne sature pas mais semble augmenter indéfiniment avec t/ω_l . À de grandes valeurs de t/ω_l , on suppose donc que la très grande densité d'excitations implique que le système se comporte en fait comme en champ moyen, supposition que nous utiliserons plus tard.

Nous avons ensuite répété l'étude de ces différentes grandeurs, pour plusieurs valeurs de g/ω_l ou de t/ω_l (coupes horizontales ou verticales du diagramme de phase dans le plan $(t/\omega_l, g/\omega_l)$), et celles-ci se comportent de manière qualitativement identiques. Cette étude préliminaire confirme donc l'existence des deux phases (cohérente et incohérente), sans mettre en évidence d'autres phases, comme par exemple des phases de Mott avec un nombre d'excitations constant, que l'on retrouve dans le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau.

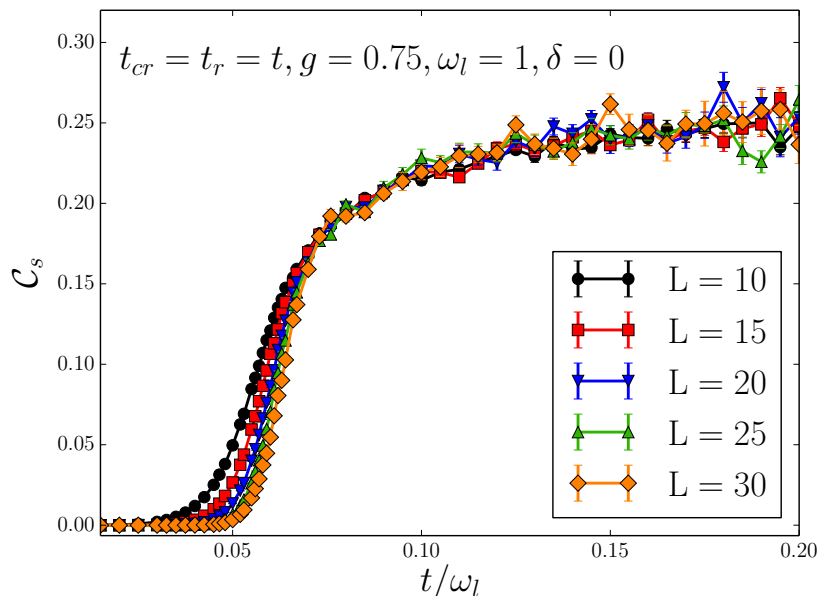


FIGURE 4.11 – Corrélations spin-spin C_s à longue distance $R = L/2$ en fonction de t/ω_l à désaccord nul pour différentes tailles. Lorsque le champ électromagnétique devient cohérent, le système devient ferroélectrique.

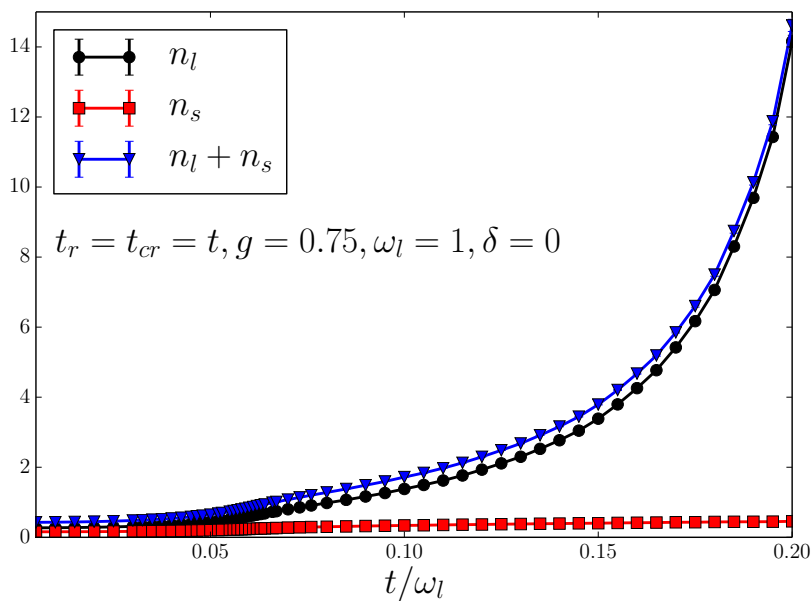


FIGURE 4.12 – Évolution de la densité de photons n_l , de la densité d'atomes excités n_s et de la densité d'excitation totale en fonction de t/ω_l .

Afin de déterminer de manière précise le point de transition entre ces deux phases, nous allons utiliser une technique de *finite size scaling*. Nous savons que ce modèle quantique unidimensionnel possède une symétrie Z_2 . Ses propriétés critiques sont donc dans la classe d'universalité du modèle d'Ising classique bidimensionnel, du fait de l'équivalence entre un système quantique de dimension d avec un système classique de dimension $d + 1$.

Pour le modèle de Rabi sur réseau, le paramètre d'ordre est $\langle a \rangle = \sqrt{C_l}$. Au point critique, nous nous attendons donc que le paramètre d'ordre suive une loi en $L^{-\tilde{\beta}/\nu}$ avec $\tilde{\beta} = 1/8$ et $\nu = 1$ les exposants critiques du modèle d'Ising classique 2D. $\tilde{\beta}$ est appelé l'exposant critique de magnétisation, tandis que ν est l'exposant critique de la longueur de corrélation. La notation $\tilde{\beta}$ est utilisée afin de ne pas confondre avec l'inverse de la température β . Ainsi, $C_l L^{2\tilde{\beta}/\nu}$ ne dépend pas de la taille du système au point de transition.

Cette technique nous permet de déterminer le point critique $t_c(g_c)$ dans le cas de coupes horizontales (verticales) du diagramme de phase dans le plan $(t/\omega_l, g/\omega_l)$. Un exemple, pour la même valeur de $g = 0.75$, est présentée sur la figure 4.13. En rééchelonnant le paramètre de transition tel que $(t - t_c)L^{1/\nu}/\omega_l$, on observe le recouvrement des courbes pour différentes tailles dans la région critique comme le montre la figure 4.14. En faisant cette analyse pour différentes valeurs de t et g , nous pouvons déterminer la ligne de transition entre les régions cohérente et incohérente, dans le plan $(t/\omega_l, g/\omega_l)$.

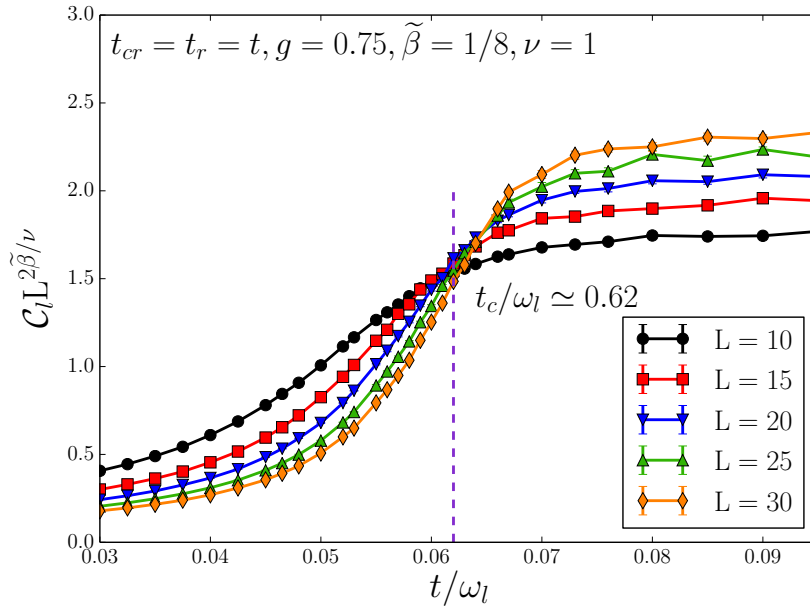


FIGURE 4.13 – *Finite size scaling* à la transition entre état incohérent et cohérent. Nous utilisons les exposants critiques de la classe d’universalité d’Ising 2D et on observe un croisement des courbes au point de transition $\frac{t_c}{\omega_l} (\frac{g}{\omega_l})$. Pour $g/\omega_l = 0.75$, la transition est localisée en $t_c/\omega_l \simeq 0.062$.

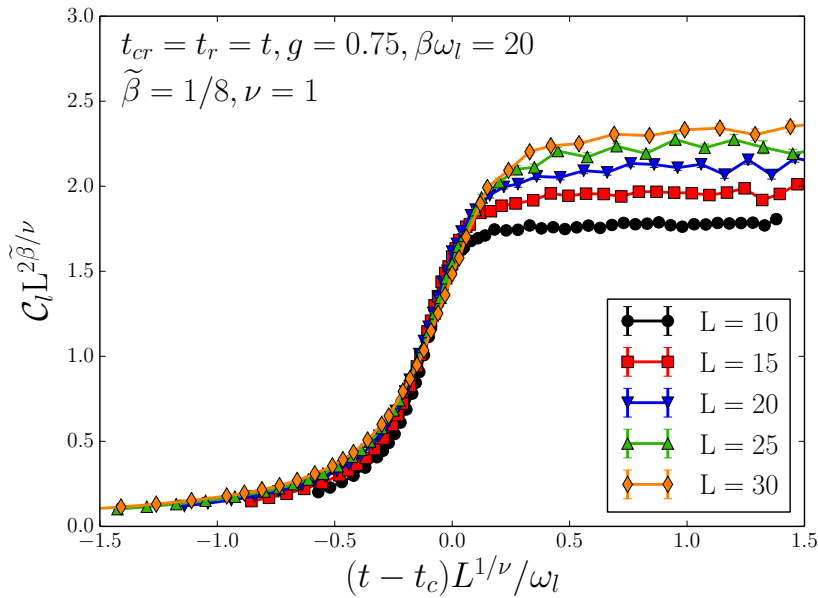


FIGURE 4.14 – *Collapse* des données de la figure 4.13, avec t/ω_l rééchelonné.

4.3.2.3 Phase instable

Afin d'analyser le modèle plus finement, nous pouvons l'étudier dans certaines limites. La limite où $t = 0$ correspond au modèle de Rabi et a déjà été étudié dans la section 4.2 (page 100). On peut aussi l'étudier dans une limite où $g = 0$, le Hamiltonien se réduit alors à :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{g=0} = & - t_r \sum_i (a_{i+1}^\dagger a_i + \text{h.c.}) - t_{cr} \sum_i (a_{i+1} a_i + \text{h.c.}) \\ & + \omega_l \sum_i a_i^\dagger a_i + \omega_s \sum_i \sigma_i^+ \sigma_i^- . \end{aligned} \quad (4.47)$$

Dans cette limite, le Hamiltonien devient quadratique, on peut donc le diagonaliser en utilisant une transformation de Bogoliubov. Le terme ω_s induisant uniquement un décalage en énergie, nous considérons que ce dernier est nul.

Réécrivons $\mathcal{H}_{g=0}$ dans l'espace des impulsions k avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} a_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{ikj} a_j \\ a_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{-ikj} a_j^\dagger \\ a_j = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikj} a_{-k} \\ a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikj} a_k^\dagger \end{array} \right. \quad (4.48)$$

L'indice j correspond à l'indiciage des sites du réseau, afin de ne pas faire de confusion avec i , l'unité imaginaire. Le Hamiltonien se réécrit, dans l'espace des impulsions k par :

$$\mathcal{H}_{g=0} = \sum_k \left[a_k^\dagger a_k (\omega_l - 2t_r \cos k) - (a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + a_k a_{-k}) t_{cr} \cos k \right]. \quad (4.49)$$

Effectuons maintenant la transformation de Bogoliubov. Les opérateurs a_k^\dagger et a_k sont définis tels que :

$$a_k = u_k \alpha_k - v_k \alpha_{-k}^\dagger, \quad (4.50)$$

$$a_k^\dagger = u_k \alpha_k^\dagger - v_k \alpha_{-k}, \quad (4.51)$$

où $u_k = u_{-k}$ et $v_k = v_{-k}$.

Les opérateurs α_k et α_k^\dagger obéissent aux règles de commutation bosonique ($[\alpha_k, \alpha_{k'}^\dagger] = \delta_{kk'}$), donc il s'ensuit que $u_k^2 - v_k^2 = 1$. On peut donc paramétriser u_k et v_k tels que :

$$u_k = \cosh \phi_k, \quad (4.52)$$

$$v_k = \sinh \phi_k. \quad (4.53)$$

Ainsi, le Hamiltonien se réécrit sous une forme diagonale telle que :

$$\mathcal{H}_{Bog.} = \sum_k (\varepsilon_k \alpha_k^\dagger \alpha_k + C_k), \quad (4.54)$$

avec :

$$\varepsilon_k = \cosh 2\phi_k (\omega_l - 2t_r \cos k) + 2t_{cr} \sinh 2\phi_k \cos k, \quad (4.55)$$

$$C_k = \sinh^2 \phi_k (\omega_l - 2t_r \cos k) + \sin 2\phi_k t_{cr} \cos k, \quad (4.56)$$

$$\tanh 2\phi_k = \frac{-2t_{cr} \cos k}{\omega_l - 2t_r \cos k}. \quad (4.57)$$

Intéressons nous maintenant au cas où $t_r = t_{cr} = t$, et approfondissons notre étude de l'état fondamental, c'est à dire pour $k = 0$. Nous avons :

$$-1 < \tanh 2\phi_0 < 1, \quad (4.58)$$

$$-1 < \frac{-2t}{\omega_l - 2t} < 1. \quad (4.59)$$

Le numérateur de 4.59 étant toujours strictement négatif, procédons à une étude en fonction du signe du dénominateur.

(i) Dénominateur négatif :

$$-1 < \frac{-2t}{\omega_l - 2t} \rightarrow t/\omega_l < 1/4,$$

$$\frac{-2t}{\omega_l - 2t} < 1 \rightarrow \omega_l > 0.$$

(ii) Dénominateur positif :

$$-1 < \frac{-2t}{\omega_l - 2t} \rightarrow t/\omega_l > 1/2,$$

$$\frac{-2t}{\omega_l - 2t} < 1 \rightarrow \omega_l < 0.$$

Le cas (ii) implique un coefficient de saut t négatif, tout comme l'énergie des photons ω_l , et ne nous intéresse pas dans le cadre de cette étude car nous considérons des coefficients de saut t définis positif. Au contraire, le cas (i) implique une énergie des photons positive, mais aussi que t/ω_l doit avoir une valeur inférieure à $1/4$. Ainsi, la précédente transformation n'est pas définie pour $t/\omega_l > 1/4$: au delà de cette valeur, nous considérerons que le Hamiltonien de Rabi sur réseau ne donne pas une bonne description du modèle, le système est dans une phase que nous qualifierons d'instable. Un même raisonnement conduit à une valeur limite de $t/\omega_l < 1/2$ dans le cas où $t_{cr} = 0$.

Intéressons nous maintenant à l'extension de cette partie instable en dehors de la limite où $g = 0$. Pour cela, nous ferons une analyse de champ moyen simplifiée, où l'approximation utilisée est encore plus grossière que celle présentée dans le chapitre 2 : cette fois, on remplace tous les opérateurs bosoniques a_i (a_i^\dagger) par ϕ (ϕ^*) dans \mathcal{H}_{RR} (Hamiltonien 4.28), en négligeant complètement les fluctuations. Cette approche d'états cohérents devrait justement être valide dans la phase cohérente (phase dans laquelle on suppose se trouver) où le nombre de photons est suffisamment important pour négliger les fluctuations. Le Hamiltonien se réduit à un troisième Hamiltonien de champ moyen qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{RR}^{CM3} = & \omega_s \sigma_i^+ \sigma_i^- + \omega_l |\phi|^2 + g (\sigma_i^+ + \sigma_i^-) (\phi + \phi^*) \\ & - 2t_r |\phi|^2 - 2t_{cr} (\phi^2 + (\phi^*)^2). \end{aligned} \quad (4.60)$$

On diagonalise ensuite analytiquement cet Hamiltonien, ce qui nous permet d'obtenir une expression pour la densité de photons, qui s'écrit :

$$n_l = |\phi|^2 = \frac{g^2}{(\omega_l - 2t_r - 2t_{cr})^2} - \frac{\omega_s^2}{16g^2}. \quad (4.61)$$

L'expression 4.61 se réduit à $n_l \simeq g^2/(\omega_l - 2t_r - 2t_{cr})^2$ pour $\phi \gg 1$, où l'approximation est valide. Ce nombre de photons diverge pour $\omega_l = 2(t_r + t_{cr})$, et le système devient donc instable pour ω_l plus petit que cette limite. Il est important de spécifier que de telles instabilités ont déjà été observées dans des systèmes photoniques, dans le cas où le potentiel chimique est suffisamment grand [Koch 2009]. Puisque ω_l joue ici ce rôle de potentiel chimique et que le nombre d'excitations n'est pas conservé, il est logique de retrouver ce genre de limite de stabilité. Celle-ci est indépendante de g et semble donc être une ligne verticale du diagramme de phase dans le plan $(t/\omega_l, g/\omega_l)$, située en $t/\omega_l = 1/4$.

Nous avons donc effectué des simulations de Monte-Carlo pour étudier la divergence du nombre de photons quand on s'approche de la zone d'instabilité, afin de confirmer cette limite de manière exacte. Pour un faible nombre de photons, on observe un désaccord relativement important : en effet, l'approximation de champ moyen n'est pas valide dans cette zone. Au contraire, pour des grandes

valeurs de n_l on observe la tendance prédite par le champ moyen. Cependant, il est numériquement très difficile de s'approcher du point de divergence, comme le montre les figures 4.15 (cas $t = t_r = t_{cr}$) et 4.16 (cas $t = t_r$ et $t_{cr} = 0$). En effet, pour des durées de simulation raisonnables, l'algorithme devient inefficace quand le nombre de photons par site devient trop important (typiquement une dizaine voire une vingtaine de photons par site), mais on observe toujours une région où le comportement prédit par le champ moyen est observé, ce qui confirme que le système devient instable au delà d'une certaine valeur de t/ω_l (1/4 pour le cas $t = t_r = t_{cr}$, 1/2 pour le cas $t = t_r$ et $t_{cr} = 0$).

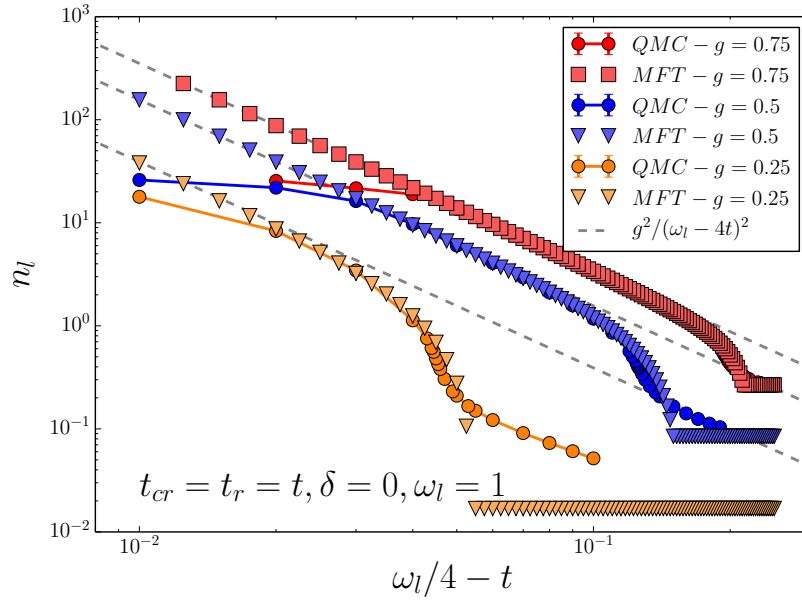


FIGURE 4.15 – Divergences attendues pour la densité de photons n_l , obtenues par champ moyen et par simulation de Monte-Carlo, quand $t \rightarrow \omega_l/4$.

4.3.2.4 Diagramme de phase

Comme nous l'avons mentionné précédemment, la technique de *finite size scaling* nous permet de déterminer les points de transition entre phase incohérente et cohérente, et donc le diagramme de phase dans le plan $(t/\omega_l, g/\omega_l)$ présenté sur les figures 4.17 ($t_r = t_{cr} = t$) et 4.18 ($t_r = t$ et $t_{cr} = 0$).

Nous avons aussi refait le calcul perturbatif sur le Hamiltonien de champ moyen de la référence [Schiró 2013], afin de comparer les deux approches. Les résultats du champ moyen fournissent une description qualitativement correcte de la ligne de transition, surtout quand le nombre de photons est important, donc dans les zones où t/ω_l et g/ω_l sont élevés. En effet, dans ces zones, le nombre de photons au sein du système est tellement important qu'on peut supposer qu'ils se comportent quasiment comme un champ classique et que l'approche de champ moyen, où l'on

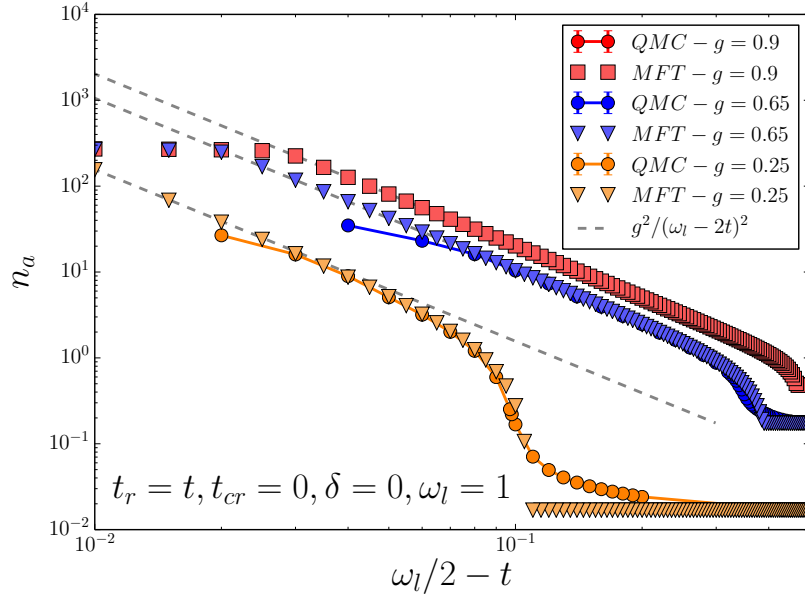


FIGURE 4.16 – Divergences attendues pour la densité de photons n_l , obtenues par champ moyen et par simulation de Monte-Carlo, quand $t \rightarrow \omega_l/2$.

néglige les fluctuations, est complètement pertinente.

Qualitativement, ces deux diagrammes de phase sont très similaires. La différence provient uniquement de la présence ou non du terme contre-rotatif pour le saut des photons. Celui-ci participe à la délocalisation de ces derniers, on observe donc logiquement que la phase isolante occupe une place beaucoup plus importante au sein de l'espace des paramètres dans le cas où le terme t_{cr} est nul.

4.3.2.5 Influence du désaccord δ

Afin de terminer cette partie de l'étude du modèle de Rabi sur réseau, nous regardons l'influence du désaccord sur la physique du système. Étant donné que l'approche de champ moyen fournit des résultats qualitativement corrects, nous utiliserons cette technique plutôt que de refaire une lourde étude avec l'algorithme de Monte-Carlo quantique pour chaque valeur de désaccord. Cependant, on peut discuter intuitivement du résultat auquel on s'attend. Un désaccord positif favorise les photons, et donc par suite l'extension de la phase cohérente, tandis qu'un désaccord négatif favorise les atomes, donc la phase isolante. La figure 4.19 montre le diagramme de phase pour différents désaccord, et confirme donc le précédent raisonnement.

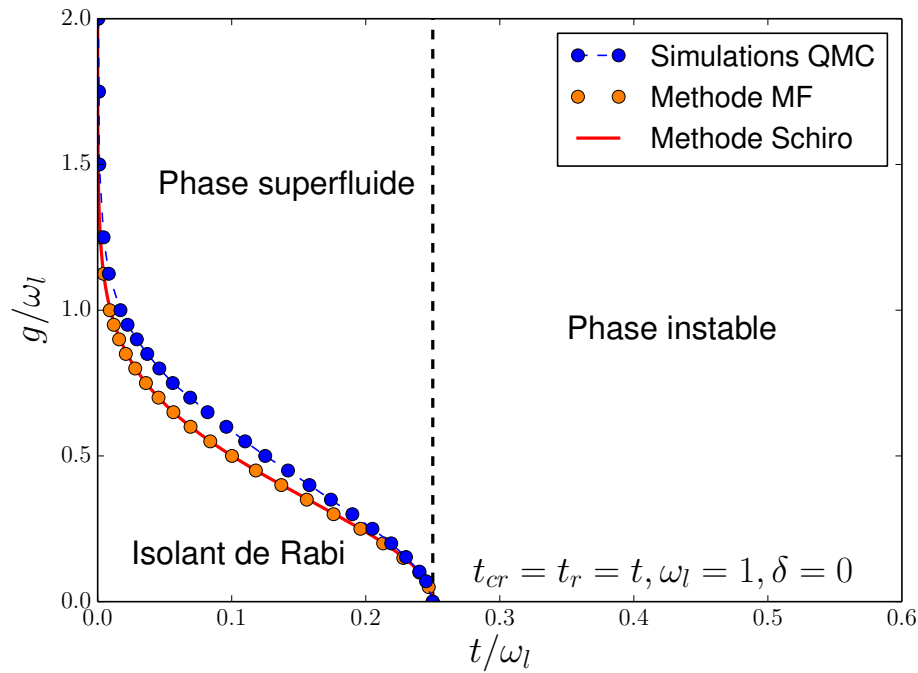


FIGURE 4.17 – Diagramme de phase du modèle de Rabi sur réseau à température nulle, $\delta = 0$ et $t_r = t_{cr} = t$. On observe 3 phases : une phase instable pour $t/\omega_l > 1/4$, puis une phase cohérente (superradiante) et incohérente (isolante). Chaque point de la courbe bleue est obtenu via la technique de *finite size scaling* discutée précédemment, pour les tailles $L = 10, 15, 20, 25, 30$. Les points oranges sont obtenus par l’approche de champ moyen, tandis que la courbe rouge est obtenue via l’approche de la référence [Schiró 2013].

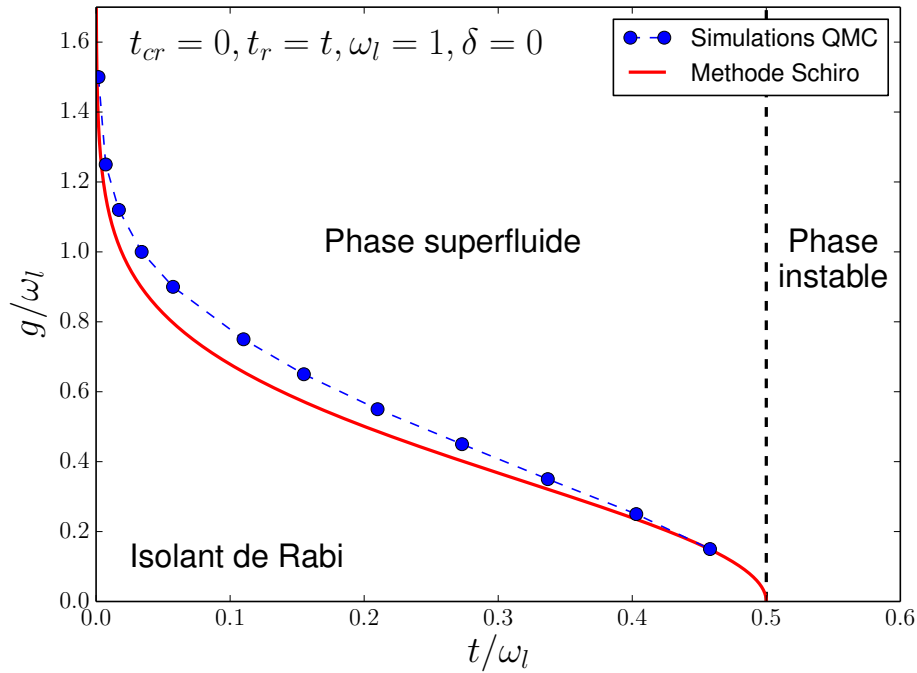


FIGURE 4.18 – Diagramme de phase du modèle de Rabi sur réseau à température nulle, $\delta = 0$, $t_r = t$ et $t_{cr} = 0$. Celui-ci est obtenu en utilisant les mêmes méthodes que pour la figure 4.17. L’absence des termes contre-rotatifs pour les photons favorise l’importance de la phase incohérente dans l’espace des paramètres.

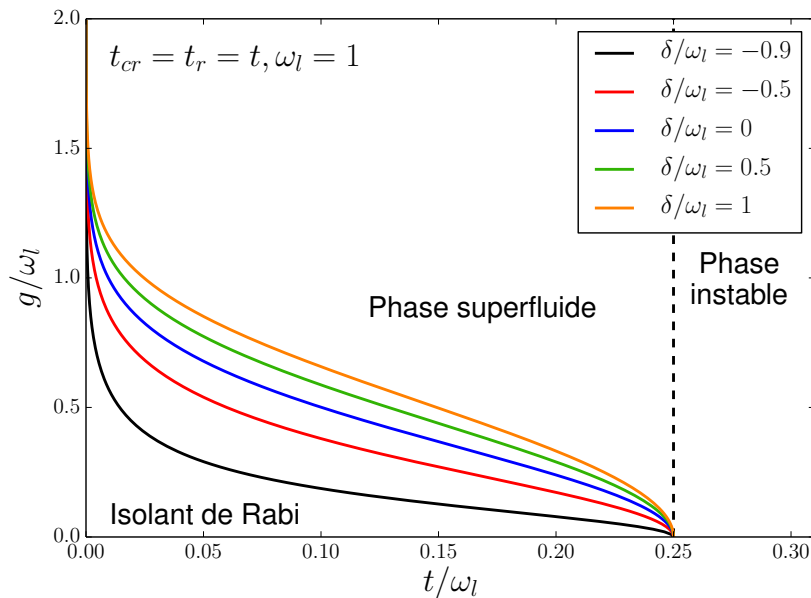


FIGURE 4.19 – Diagramme de phase obtenu en champ moyen du modèle de Rabi sur réseau à température nulle et $t_r = t_{cr} = t$, pour différents désaccords δ .

4.3.3 Équivalence avec le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau

Dans la section précédente, nous avons trouvé que les termes contre-rotatifs, souvent négligés auparavant, jouent un rôle majeur dans la physique des systèmes opérant dans un régime de couplage ultra-fort. Nous attendions ce résultat dans le sens où les valeurs de g que nous utilisons dans nos simulations sont relativement élevées ($g \simeq \omega_l$). En effet, si l'on regarde la figure 4.20, qui compare les diagrammes de phase des modèles de Rabi et Jaynes-Cummings sur réseau dans le plan $(t/\omega_l, g/\omega_l)$: on s'aperçoit que ceux-ci s'éloignent vite l'un de l'autre au fur et à mesure que l'on augmente g/ω_l .

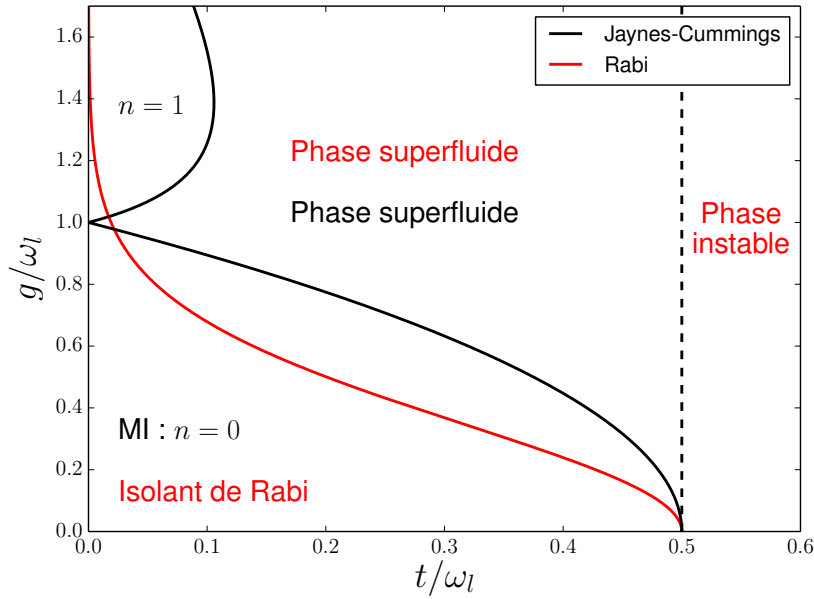


FIGURE 4.20 – Diagramme de phase obtenu en champ moyen des modèles de Rabi et Jaynes-Cummings sur réseau à température nulle, $t = t_r$, $t_{cr} = 0$, et $\delta = 0$.

Dans ce qui suit, nous nous attacherons à explorer différentes voies pour lesquelles les modèles de Rabi et de Jaynes-Cummings sur réseau deviennent équivalents, et donc de retrouver les phases de Mott et superfluide caractéristiques de ce modèle dans le plan $(t/g, (\mu - \omega_l)/g)$, plan qui est usuellement utilisé lors des études du modèle de Jaynes-Cummings sur réseau. Nous utiliserons une approche exacte, avec l'algorithme de Monte-Carlo quantique, afin de faire des coupes du diagramme de phase à t/g constant, et une approche de champ moyen pour justement déterminer ces diagrammes de phase. Cependant, nous restreindrons notre étude au cas où $t_{cr} = 0$, afin d'étudier l'influence des termes contre-rotatifs de l'interaction entre système à deux niveaux et champ électromagnétique uniquement.

Nous étudierons l'influence de deux paramètres : le couplage contre-rotatif g_{cr} ainsi que le désaccord δ .

4.3.3.1 Influence du rapport g_{cr}/g_r

Nous étudions ici les effets des termes contre-rotatifs g_{cr} . Pour cela, nous suivons l'évolution de n_l (figure 4.21) via des simulations de Monte-Carlo quantique, en fonction de ω_l , pour différentes valeurs de g_{cr}/g_r (tous les autres paramètres étant maintenus constants). Nous nous focaliserons sur le cas d'un désaccord nul. Pour $g_{cr} = 0$, le modèle se réduit au modèle de Jaynes-Cummings sur réseau et on observe le plateau usuel qui témoigne de l'existence d'une phase de Mott (ici de densité $n = 1$) incompressible, que celui-ci soit traité dans l'ensemble canonique ou grand-canonique. Ensuite, pour de petits rapports tels que $g_{cr}/g_r = 0.01$, on voit que le modèle de Rabi sur réseau donne des résultats similaires, presque identiques à ceux du modèle de Jaynes-Cummings sur réseau. Cependant, pour $g_{cr}/g_r = 0.1$, on voit que la phase de Mott est complètement détruite. Ainsi, les termes contre-rotatifs impactent très vite le système et modifient profondément sa physique, même si ceux-ci sont d'un ordre de grandeur inférieur.

Nous regarderons aussi l'allure des diagrammes de phase obtenus en champ moyen dans le plan $(t/g, (\mu - \omega_l)/g)$, pour différentes valeurs de g_{cr}/g_r (voir figure 4.22). Ici, les différents lobes de Mott pour le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau sont aussi perdus, mais pour des rapports de g_{cr}/g_r plus grands, au-delà de 0.1.

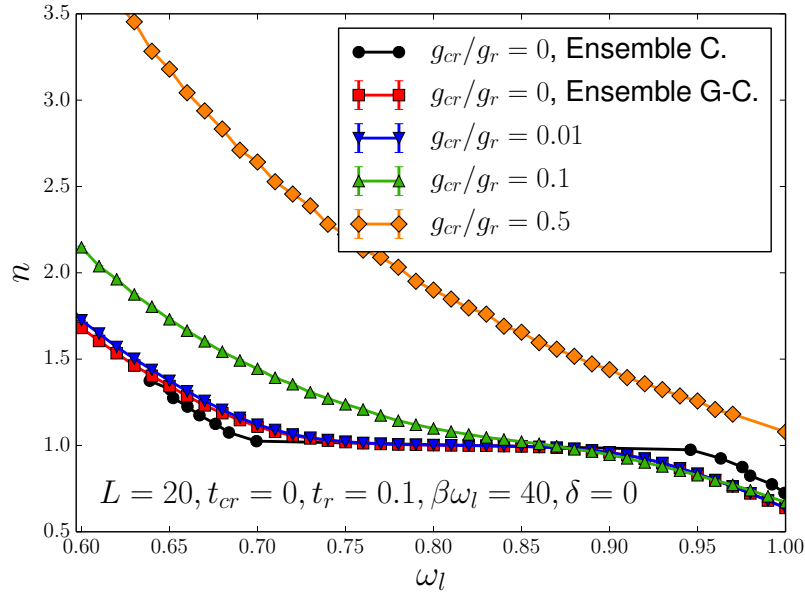


FIGURE 4.21 – Nombre d'excitations n en fonction de ω_l pour différentes valeurs de g_{cr} à t_r et g_r fixé, pour les modèles de Rabi et Jaynes-Cummings sur réseau, pour des systèmes de taille $L = 20$. Les deux modèles donnent des résultats similaires pour $g_{cr}/g_r = 0.01$, mais le plateau de Mott est détruit au delà.

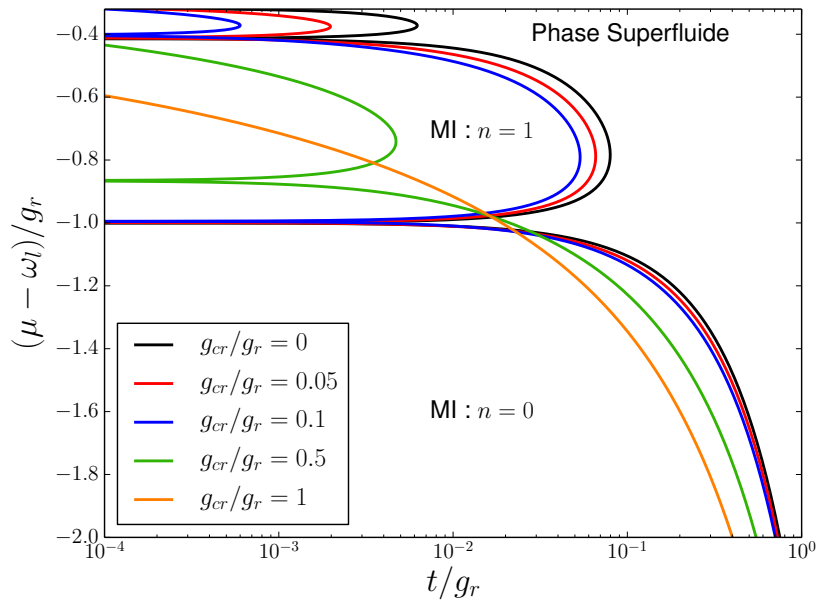


FIGURE 4.22 – Diagrammes de phase du modèle de Rabi sur réseau obtenus en champ moyen, pour des rapports de g_{cr}/g_r allant de 0 (limite de Jaynes-Cummings) à 1.

4.3.3.2 Influence du désaccord δ

Commençons par comparer les diagrammes de phase des modèles de Jaynes-Cummings et de Rabi sur réseau, obtenus par une approche de champ moyen, dans le plan $(t/g, (\mu - \omega_l)/g)$, avec μ le potentiel chimique. Pour le modèle de Jaynes-Cummings, nous poserons $g_{cr} = 0$, $g_r = g$, $\omega_s = 1$, et nous ferons varier μ , qui agira comme un potentiel chimique effectif pour les photons dans l'ensemble grand-canonique. Pour le modèle de Rabi, $g_r = g_{cr} = g$, $\omega_s = 1$, et nous ferons aussi varier μ . La notion d'ensemble canonique et grand-canonique pour le modèle de Rabi n'est pas vraiment pertinente dans le sens où le Hamiltonien ne conserve pas le nombre de particules. Il n'est donc pas obligatoire d'utiliser un potentiel chimique μ pour le modèle de Rabi sur réseau, étant donné que ω_l joue déjà ce rôle. Nous l'emploierons toutefois pour une comparaison plus aisée des deux modèles. Comme nous faisons une étude en fonction du désaccord $\delta = \omega_s - \omega_l$, chaque diagramme sera déterminé avec une valeur de ω_l différente. Le premier cas, pour un désaccord nul, est présenté sur la figure 4.23. Les deux modèles présentent deux diagrammes de phase complètement différents : le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau exhibe plusieurs phases de Mott, tandis que le modèle de Rabi sur réseau montre seulement une phase cohérente et incohérente (qui est aussi compressible), comme nous l'avons déjà discuté. Il est important de noter que si l'on augmente le désaccord, c'est à dire si $\omega_s > \omega_l$, la partie photonique est favorisée, ce qui mène à des différences similaires entre les deux modèles qui conservent un comportement qualitativement différent.

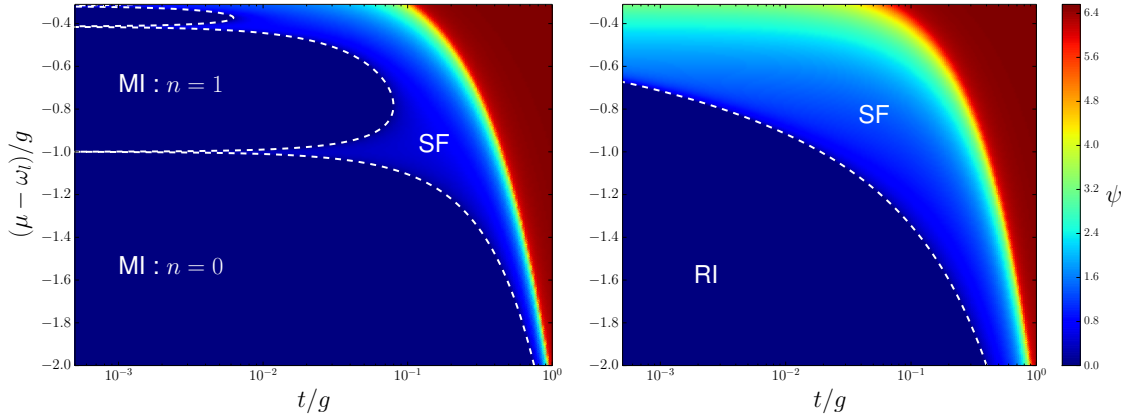


FIGURE 4.23 – Diagramme de phase, obtenu en champ moyen, pour les modèles de Rabi et Jaynes-Cummings sur réseau, pour $\delta = 0$. Les diagrammes sont très différents : l'un exhibe plusieurs phases de Mott de différentes densités, tandis que l'autre montre seulement une phase cohérente et incohérente. L'échelle de couleur représente la valeur du paramètre d'ordre, qui est nul dans la phase incohérente et non nul dans la phase cohérente.

Cependant, si l'on s'intéresse à un cas de figure où l'on introduit un désaccord négatif, les deux systèmes deviennent de plus en plus équivalents au fur et à mesure que l'on diminue ce désaccord. Cette équivalence n'est vraie que dans une certaine zone de l'espace des paramètres : pour les deux modèles, on observera une région sans excitation (phase de Mott à $n = 0$), ainsi qu'une phase de Mott à $n = 1$. Cependant, pour le modèle de Rabi, aucune phase de Mott à $n = 2$ n'est observée. Nous reviendrons sur l'absence des phases de Mott pour $n > 1$ dans la sous-section suivante.

Afin de confirmer cette prédiction, obtenue sous approximation, nous avons effectué une coupe, avec notre algorithme de Monte-Carlo quantique, du diagramme de phase à désaccord négatif $\delta/g = -10$, pour une valeur de $t/g = 0.1$ (voir Figure 4.25). On observe des comportements similaires, c'est à dire un plateau qui témoigne de l'incompressibilité et donc d'une phase de Mott. On peut toutefois noter que l'étendue de la phase de Mott pour le modèle de Rabi sur réseau est moins importante que celle du modèle de Jaynes-Cummings sur réseau.

On peut expliquer cette équivalence de la manière suivante : le désaccord négatif permet de favoriser la partie atomique des excitations, qui se comportent justement comme une phase de Mott. En effet, dans le Hamiltonien, les atomes interviennent uniquement dans la partie d'interaction avec le champ électromagnétique, au même titre que les impuretés du modèle de Kondo sur réseau étudié dans le précédent chapitre. Nous concluons donc que, pour des valeurs importantes de g , les termes contre-rotatifs peuvent être négligés seulement si l'on se trouve dans le cas d'un désaccord suffisamment négatif pour dépasser le couplage entre les états ayant différentes densités d'excitations, et donc retrouver une physique équivalente à celle du modèle de Jaynes-Cummings sur réseau.

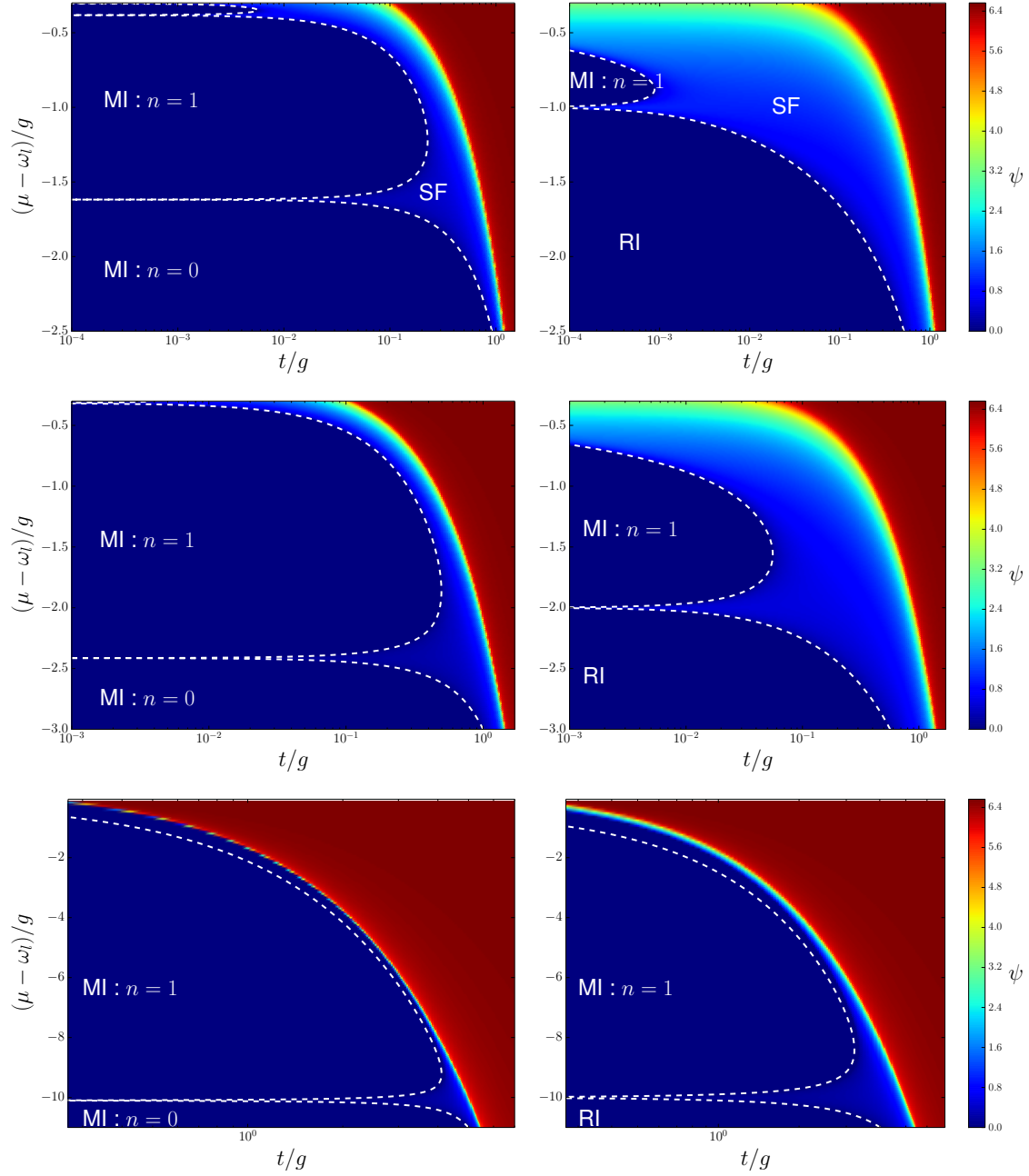


FIGURE 4.24 – Diagramme de phase, obtenu en champ moyen, pour les modèles de Rabi (à droite) et Jaynes-Cummings (à gauche) sur réseau, pour $\delta/g = -1, -2, -10$ (de haut en bas). Au fur et à mesure que l'on diminue le désaccord vers des valeurs négatives, les deux modèles deviennent de plus en plus équivalents.

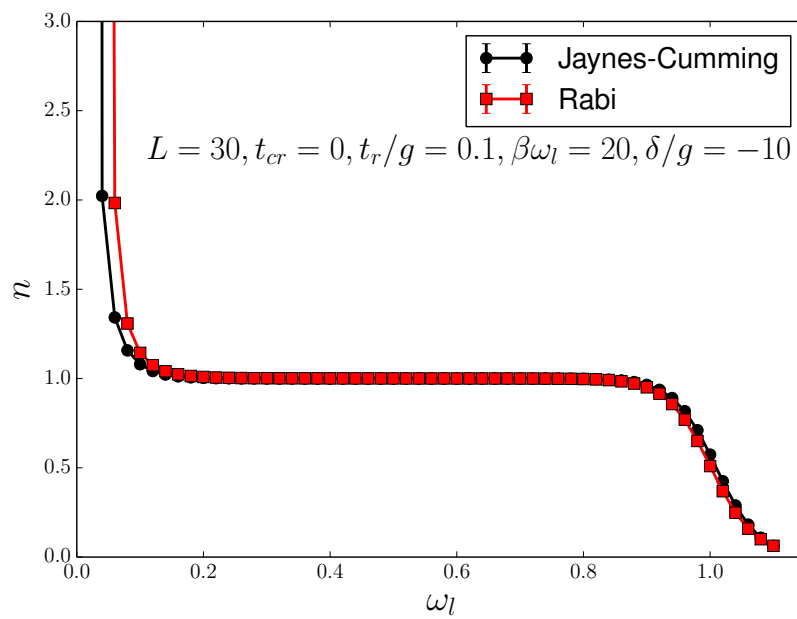


FIGURE 4.25 – Densité d’excitations n en fonction de ω_l , à $t/g = 0.1$ et $\delta/g = -10$ obtenue par des simulations de Monte-Carlo quantique, pour un système de taille $L = 30$. Pour les deux modèles, on observe les plateaux de Mott de densité $n = n_s + n_l = 1$, mais pas de plateaux à $n = 2$.

4.3.4 Vers le modèle de Dicke sur réseau

Pour terminer ce chapitre, nous explorons une extension du modèle de Rabi sur réseau. Cette extension sera traitée uniquement par une approche de champ moyen. Dans le modèle initial, nous avons considéré le cas d'un unique système à deux niveaux occupant chaque cavité. On peut donc se poser la question suivante : comment la physique est-elle modifiée dans le cas où nous considérons 2, 3, p atomes à deux niveaux par site ?

Nous nous sommes concentrés sur les cas simples de 2 puis 3 atomes par site. Bien que cela soit un abus de langage, par souci de simplicité, nous utiliserons l'appellation d'Hamiltonien de Rabi et de Jaynes-Cummings à p atomes. Ainsi, les Hamiltoniens sur site (de Rabi et de Jaynes-Cummings) se réécrivent, avec p le nombre de système à deux niveaux :

$$\mathcal{H}_R = \omega_l a^\dagger a + g \sum_p (\sigma_p^- + \sigma_p^+) (a + a^\dagger) + \omega_s \sum_p \sigma_p^+ \sigma_p^-, \quad (4.62)$$

$$\mathcal{H}_{JC} = \omega_l a^\dagger a + g \sum_p (a^\dagger \sigma_p^- + a \sigma_p^+) + \omega_s \sum_p \sigma_p^+ \sigma_p^-. \quad (4.63)$$

De la même manière, notre intérêt réside ici dans l'étude de l'équivalence des modèles sur réseau obtenus avec et sans l'approximation de l'onde tournante. Pour cela, nous retracerons les diagrammes de phases dans le plan $(t/g, (\mu - \omega_l)/g)$, pour différents désaccords négatifs, là où l'on peut s'attendre à ce que les modèles soient équivalents. Pour le modèle de Jaynes-Cummings à p atomes, une étude de DMRG [Rossini 2007] a montré un résultat intéressant : pour une valeur de p donnée, il existe une valeur limite du désaccord δ_0 , telle qu'en dessous de cette valeur, la phase de Mott à p excitations par site est grandement favorisée. Rossini *et al.* estime cette valeur à $\delta_0 \sim -\sqrt{p}$.

4.3.4.1 Deux atomes $p = 2$

La figure 4.26 montre les diagrammes de phase, obtenus en champ moyen, du modèle de Rabi ainsi que du modèle de Jaynes-Cummings à 2 atomes sur réseau. Tout d'abord, nous retrouvons le résultat de [Rossini 2007] : quand on a un désaccord suffisamment négatif, ici $\delta/g = -5$, la taille du lobe de Mott à $n = 2$ excitations est beaucoup plus important que celles des autres lobes, le lobe de Mott à $n = 1$ a déjà pratiquement disparu. Ensuite, on observe un comportement pour le moins inattendu : nous retrouvons une équivalence entre les deux modèles, mais pour la phase de Mott correspondant au nombre d'atomes présents pour chaque cavité, c'est-à-dire pour $n = 2$. Ce résultat est confirmé quand on fait une coupe du diagramme de phase pour une valeur de t/g donnée, et que l'on trace le nombre d'excitations en fonction de $(\mu - \omega_l)/g$, comme le montre la figure 4.27 : seul le plateau à $n = 2$ excitations est présent pour le modèle de Rabi à 2 atomes sur réseau.

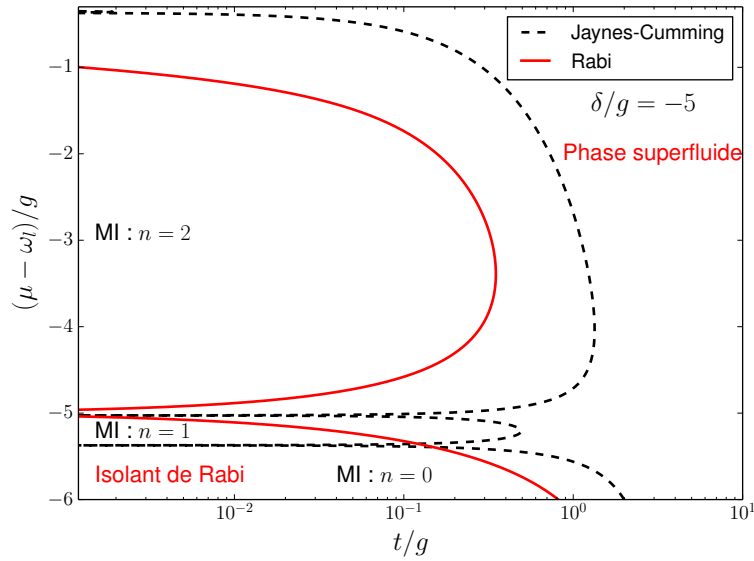


FIGURE 4.26 – Diagrammes de phase, obtenus en champ moyen, pour les modèles de Rabi et Jaynes-Cummings à 2 atomes sur réseau. Pour le modèle de Jaynes-Cummings, on observe la succession des lobes de Mott, où le lobe $n = 2$ est largement favorisé, tandis que pour le modèle de Rabi, on observe uniquement le lobe $n = 2$.

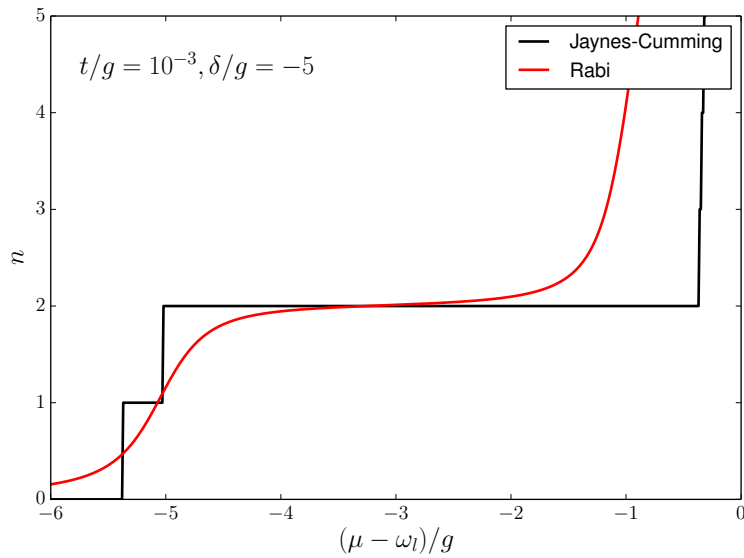


FIGURE 4.27 – Coupe de la figure 4.26 pour $t/g = 10^{-3}$. On observe les différents plateaux de Mott à $n = 1, 2$ (avec le second lobe favorisé) pour le modèle de Jaynes-Cummings à 2 atomes sur réseau, et uniquement le plateau à $n = 2$ pour le modèle de Rabi à 2 atomes sur réseau.

4.3.4.2 Trois atomes $p = 3$

De la même manière, on retrouve sur les figures 4.28 et 4.29 les mêmes résultats que pour le cas précédent : le lobe de Mott à $n = 3$ est prépondérant dans le modèle de Jaynes-Cummings à 3 atomes sur réseau, tandis que le modèle de Rabi à 3 atomes sur réseau exhibe uniquement un lobe de Mott à $n = 3$ excitations.

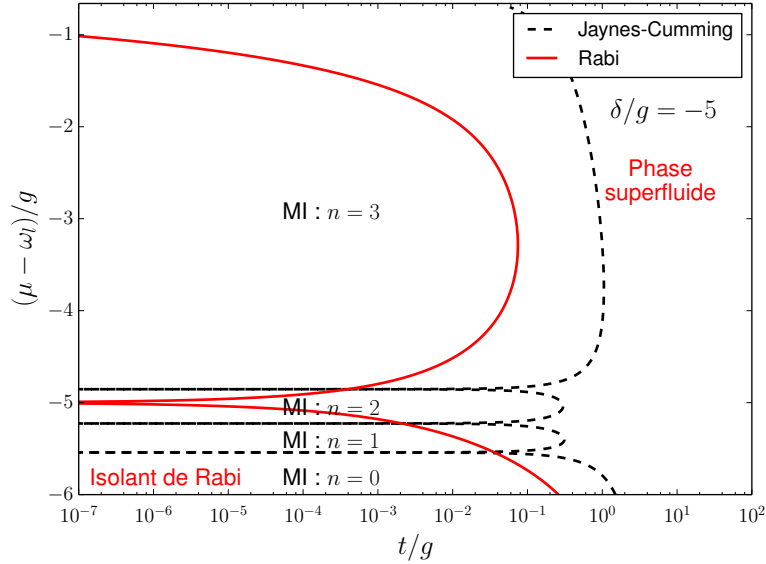


FIGURE 4.28 – Diagrammes de phase, obtenus en champ moyen, pour les modèles de Rabi et Jaynes-Cummings à 3 atomes sur réseau. On observe le même comportement qualitatif que pour la figure 4.26 : le modèle de Rabi est équivalent au modèle de Jaynes-Cummings uniquement pour le lobe $n = 3$.

Ces deux cas semblent montrer que le modèle de Rabi sur réseau n'exhibe jamais de comportement où seulement une partie des atomes sont dans leur état excité, contrairement au modèle de Jaynes-Cummings. On observera toujours un lobe de Mott qui correspond à une excitation par atome. On pourrait généraliser au cas de p atomes où, dans le cas d'un désaccord suffisamment négatif, on retrouve une équivalence entre les deux modèles pour le lobe de Mott numéro p , celui qui correspond à une excitation par atome.

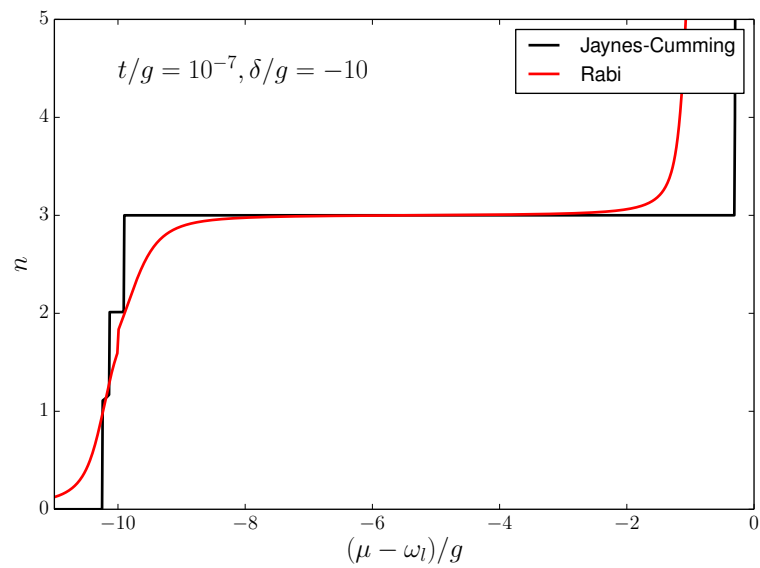


FIGURE 4.29 – Coupe pour une valeur de désaccord $\delta/g = -10$ à $t/g = 10^{-6}$. On observe les différents plateaux de Mott à $n = 1, 2, 3$ (avec le troisième lobe favorisé) pour le modèle de Jaynes-Cummings à 3 atomes, et uniquement le plateau à $n = 3$ pour le modèle de Rabi à 3 atomes.

4.4 Conclusion

Ce chapitre était dédié à l'étude du modèle de Rabi sur réseau. Nous avons de nouveau traité ce système via des simulations de Monte-Carlo quantique, mais aussi par une théorie de champ moyen. Nous rappelons que l'algorithme que nous utilisons fournit des résultats numériquement exacts, alors que la théorie de champ moyen fournit des résultats approchés, qui sont cependant en bon accord qualitatif pour ce modèle-ci.

Le but premier de cette étude était de traiter ce modèle de manière exacte, ce qui n'avait jamais été fait auparavant, mais aussi de le comparer à un modèle approché, dont la physique est très bien connue : le modèle de Jaynes-Cummings sur réseau [Koch 2009, Schmidt 2009]. Pour cela, nous avons étudié l'influence des termes contre-rotatifs qui entraînent une forte fluctuation du nombre de photons, et de quelle manière ils modifient la physique de ces modèles.

Nous résumons ici les principaux résultats :

Pour un désaccord δ nul, on observe que, pour des valeurs importantes des termes contre-rotatifs, la physique des deux modèles est complètement différente. Les lobes de Mott ainsi que la symétrie $U(1)$ associés au modèle de Jaynes-Cummings sur réseau sont détruits dans le modèle de Rabi sur réseau. La symétrie devient une symétrie discrète Z_2 , on observe donc une transition dans la classe d'universalité du modèle d'Ising 2D entre un état incohérent et cohérent. Nous avons vérifié cette hypothèse en calculant les exposants critiques qui correspondent à ceux du modèle d'Ising classique bidimensionnel. Nous avons aussi mis en évidence une région instable dans l'espace des paramètres, où l'ajout d'un photon dans le système vient toujours diminuer son énergie interne. Ces résultats sont en bon accord qualitatif avec l'approche de champ moyen effectuée auparavant par Schiró *et al* [Schiró 2013].

Afin d'aller plus loin, nous avons aussi exploré différentes manières pour lesquelles les deux modèles deviennent équivalents, et que le modèle de Rabi sur réseau commence à développer des phases de Mott, comportement typique du modèle de Jaynes-Cummings sur réseau.

La première, qui semble évidente, est de diminuer suffisamment (deux ordres de grandeurs) les valeurs des termes contre-rotatifs vis à vis des termes rotatifs. L'autre, beaucoup moins intuitive, est d'introduire un désaccord négatif. Cependant, pour le cas du désaccord négatif, on observe une équivalence pour le lobe de Mott à zéro et une excitation seulement. Nous avons donc exploré avec une approche de champ moyen des modèles à deux puis trois atomes par site, et nous avons trouvé une équivalence entre les deux modèles uniquement pour le lobe à zéro excitation, et pour le lobe à un nombre d'excitations correspondant au nombre

d'atomes par site.

La description donnée par le modèle de Rabi est cependant incomplète. En effet, dans la sous-section 4.2.1 (page 102), nous l'avons obtenu en négligeant la partie quadratique en $\mathbf{A}_l(\mathbf{r}_0)$ dans l'expression du Hamiltonien d'interaction donné par l'expression 4.17. Ce terme, appelé terme « diamagnétique » s'écrit $H_{A^2} = D(a + a^\dagger)^2$. D est de la forme $D \propto g^2/\omega_s$, ce qui le rend non négligeable quand le couplage g augmente et que l'on s'approche du rapport $g/\omega_{l,s} \simeq 1$. Ce régime est appelé régime de couplage fort profond [Casanova 2010]. Bien que cela semble contre-intuitif, mais ce terme entraîne un découplage entre les parties lumière et matière [De Liberato 2014], ce qui va fortement modifier la ligne de transition entre état incohérent et état cohérent brisant la symétrie Z_2 . En effet, à grand g/ω_l , le champ moyen prédit que la ligne de transition est repoussée à des valeurs de t/ω_l plus importantes, nécessaires pour atteindre un état cohérent [Schiró 2012].

Un autre aspect à prendre en compte dans notre étude est que nous nous éloignons bien évidemment des systèmes expérimentaux. En effet, nous négligeons dans notre approche la présence de phénomènes dissipatifs, vu que nous étudions le système à l'équilibre. Afin de les prendre en compte, il faudrait ajouter un terme de perte et de gain (afin de compenser ces pertes) pour la cavité, termes qui doivent bien entendu être faibles devant g afin de rester en situation de couplage fort ou ultra-fort. À l'équilibre, nous attendons, dans une certaine gamme de paramètres, la formation d'un condensat de Bose-Einstein de photons. Par contre, en dehors de cet équilibre, une cohérence de phase apparaît au travers de l'effet laser. Notre problème est que l'algorithme de Monte-Carlo quantique ne permet pas d'étudier des Hamiltoniens non hermitiens, et donc des systèmes hors équilibre. Cependant, on peut se poser la question, suite à l'inclusion dans le Hamiltonien des termes de pertes/gains, qui seraient hermitiens conjugués, si l'on ne s'approche pas d'une situation hors équilibre, et donc de systèmes réels.

Bibliographie

- [Aspect 2003] Alain Aspect, Claude Fabre et Gilbert Grynberg. *Optique quantique 1 : Lasers*, Sep 2003. (Cit  en page 102.)
- [Bargmann 1961] V. Bargmann. *On a Hilbert space of analytic functions and an associated integral transform part I*. Communications on Pure and Applied Mathematics, vol. 14, no. 3, pages 187–214, 1961. (Cit  en page 96.)
- [Birnbaum 2005] K. M. Birnbaum, A. Boca, R. Miller, A. D. Boozer, T. E. Northup et H. J. Kimble. *Photon blockade in an optical cavity with one trapped atom*. Nature, vol. 436, pages 87–90, Jul 2005. (Cit  en pages 11 et 99.)
- [Bishop 1999] R.F. Bishop, N.J. Davidson, R.M. Quick et D.M. van der Walt. *Variational results for the Rabi Hamiltonian*. Physics Letters A, vol. 254, no. 3, pages 215 – 224, 1999. (Cit  en page 96.)
- [Blais 2004] Alexandre Blais, Ren-Shou Huang, Andreas Wallraff, S. M. Girvin et R. J. Schoelkopf. *Cavity quantum electrodynamics for superconducting electrical circuits: An architecture for quantum computation*. Phys. Rev. A, vol. 69, page 062320, Jun 2004. (Cit  en pages 9 et 96.)
- [Braak 2011] D. Braak. *Integrability of the Rabi Model*. Phys. Rev. Lett., vol. 107, page 100401, Aug 2011. (Cit  en pages 96 et 97.)
- [Casanova 2010] J. Casanova, G. Romero, I. Lizuain, J. J. Garc a-Ripoll et E. Solano. *Deep Strong Coupling Regime of the Jaynes-Cummings Model*. Phys. Rev. Lett., vol. 105, page 263603, Dec 2010. (Cit  en pages 9 et 138.)
- [Chen 2012] Qing-Hu Chen, Chen Wang, Shu He, Tao Liu et Ke-Lin Wang. *Exact solvability of the quantum Rabi model using Bogoliubov operators*. Phys. Rev. A, vol. 86, page 023822, Aug 2012. (Cit  en page 96.)
- [De Liberato 2014] Simone De Liberato. *Light-Matter Decoupling in the Deep Strong Coupling Regime: The Breakdown of the Purcell Effect*. Phys. Rev. Lett., vol. 112, page 016401, Jan 2014. (Cit  en pages 9 et 138.)
- [Dicke 1954] R. H. Dicke. *Coherence in Spontaneous Radiation Processes*. Phys. Rev., vol. 93, pages 99–110, Jan 1954. (Cit  en page 100.)
- [Fedorov 2010] A. Fedorov, A. K. Feofanov, P. Macha, P. Forn-D az, C. J. P. M. Harmans et J. E. Mooij. *Strong Coupling of a Quantum Oscillator to a Flux Qubit at Its Symmetry Point*. Phys. Rev. Lett., vol. 105, page 060503, Aug 2010. (Cit  en pages 10, 98 et 145.)
- [Goban 2015] A. Goban, C.-L. Hung, J. D. Hood, S.-P. Yu, J. A. Muniz, O. Painter et H. J. Kimble. *Superradiance for Atoms Trapped along a Photonic Crystal Waveguide*. Phys. Rev. Lett., vol. 115, page 063601, Aug 2015. (Cit  en page 100.)
- [Gross 1982] M. Gross et S. Haroche. *Superradiance: An essay on the theory of collective spontaneous emission*. Physics Reports, vol. 93, no. 5, pages 301 – 396, 1982. (Cit  en page 100.)

- [Hartmann 2006] Michael J. Hartmann, Fernando G. S. L. Brandao et Martin B. Plenio. *Strongly interacting polaritons in coupled arrays of cavities*. Nat Phys, vol. 2, pages 849–855, Dec 2006. (Cité en pages 8 et 99.)
- [Hohenberg 1967] P. C. Hohenberg. *Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions*. Phys. Rev., vol. 158, pages 383–386, Jun 1967. (Cité en pages 14, 86 et 114.)
- [Irish 2007] E. K. Irish. *Generalized Rotating-Wave Approximation for Arbitrarily Large Coupling*. Phys. Rev. Lett., vol. 99, page 173601, Oct 2007. (Cité en page 96.)
- [Jaynes 1963] E. T. Jaynes et F. W. Cummings. *Comparison of quantum and semi-classical radiation theories with application to the beam maser*. Proceedings of the IEEE, vol. 51, no. 1, pages 89–109, Jan 1963. (Cité en pages 8 et 97.)
- [Koch 2009] Jens Koch et Karyn Le Hur. *Superfluid–Mott-insulator transition of light in the Jaynes-Cummings lattice*. Phys. Rev. A, vol. 80, page 023811, Aug 2009. (Cité en pages 121 et 137.)
- [Larson 2007] Jonas Larson. *Dynamics of the Jaynes–Cummings and Rabi models: old wine in new bottles*. Physica Scripta, vol. 76, no. 2, page 146, 2007. (Cité en page 96.)
- [Mermin 1966] N. D. Mermin et H. Wagner. *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*. Phys. Rev. Lett., vol. 17, pages 1133–1136, Nov 1966. (Cité en pages 14, 86 et 114.)
- [Mermin 1968] N. D. Mermin. *Crystalline Order in Two Dimensions*. Phys. Rev., vol. 176, pages 250–254, Dec 1968. (Cité en pages 14, 86 et 114.)
- [Niemczyk 2010] T. Niemczyk, F. Deppe, H. Huebl, E. P. Menzel, F. Hocke, M. J. Schwarz, J. J. Garcia-Ripoll, D. Zueco, T. Hummer, E. Solano, A. Marx et R. Gross. *Circuit quantum electrodynamics in the ultrastrong-coupling regime*. Nat Phys, vol. 6, pages 772–776, Oct 2010. (Cité en pages 10, 98 et 145.)
- [Rabi 1936] I. I. Rabi. *On the Process of Space Quantization*. Phys. Rev., vol. 49, pages 324–328, Feb 1936. (Cité en pages 9 et 96.)
- [Rabi 1937] I. I. Rabi. *Space Quantization in a Gyating Magnetic Field*. Phys. Rev., vol. 51, pages 652–654, Apr 1937. (Cité en pages 9 et 96.)
- [Rehler 1971] Nicholas E. Rehler et Joseph H. Eberly. *Superradiance*. Phys. Rev. A, vol. 3, pages 1735–1751, May 1971. (Cité en page 100.)
- [Rossini 2007] Davide Rossini et Rosario Fazio. *Mott-Insulating and Glassy Phases of Polaritons in 1D Arrays of Coupled Cavities*. Phys. Rev. Lett., vol. 99, page 186401, Oct 2007. (Cité en page 133.)
- [Schiró 2012] M. Schiró, M. Bordyuh, B. Öztop et H. E. Türeci. *Phase Transition of Light in Cavity QED Lattices*. Phys. Rev. Lett., vol. 109, page 053601, Aug 2012. (Cité en pages 9, 100 et 138.)

- [Schiró 2013] M. Schiró, M. Bordyuh, B. Öztop et H. E. Türeci. *Quantum phase transition of light in the Rabi–Hubbard model*. Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics, vol. 46, no. 22, page 224021, 2013. (Cité en pages 100, 108, 111, 113, 122, 124 et 137.)
- [Schmidt 2009] S. Schmidt et G. Blatter. *Strong Coupling Theory for the Jaynes-Cummings-Hubbard Model*. Phys. Rev. Lett., vol. 103, page 086403, Aug 2009. (Cité en page 137.)
- [Tavis 1968] Michael Tavis et Frederick W. Cummings. *Exact Solution for an N-Molecule—Radiation-Field Hamiltonian*. Phys. Rev., vol. 170, pages 379–384, Jun 1968. (Cité en page 100.)
- [Tavis 1969] Michael Tavis et Frederick W. Cummings. *Approximate Solutions for an N-Molecule-Radiation-Field Hamiltonian*. Phys. Rev., vol. 188, pages 692–695, Dec 1969. (Cité en page 100.)
- [Tighineanu 2016] Petru Tighineanu, Raphaël S. Daveau, Tau B. Lehmann, Harvey E. Beere, David A. Ritchie, Peter Lodahl et Søren Stobbe. *Single-Photon Superradiance from a Quantum Dot*. Phys. Rev. Lett., vol. 116, page 163604, Apr 2016. (Cité en page 100.)
- [Yu 2012] Lixian Yu, Shiqun Zhu, Qifeng Liang, Gang Chen et Suotang Jia. *Analytical solutions for the Rabi model*. Phys. Rev. A, vol. 86, page 015803, Jul 2012. (Cité en pages 96, 99, 104, 105, 106 et 107.)
- [Zheng 2011] Hang Zheng et Yasutami Takada. *Importance of counter-rotating coupling in the superfluid-to-Mott-insulator quantum phase transition of light in the Jaynes-Cummings lattice*. Phys. Rev. A, vol. 84, page 043819, Oct 2011. (Cité en page 100.)

Conclusion

Cette thèse portait sur l'étude de deux modèles de bosons itinérants sur réseau, localement couplés avec des spins $1/2$. Une richesse dans la physique de tels systèmes émerge du fait de ce couplage particulier. La compétition entre les différents termes des Hamiltoniens modélisant ces systèmes donne lieu à ce qu'on appelle des « transitions de phases quantiques », de même que ceux-ci exhibent de fortes corrélations. L'étude des phases (ainsi que des transitions entre ces dernières) que peuvent adopter ces systèmes est d'une importance capitale dans leur compréhension. Pour l'instant, à notre connaissance, très peu d'études exactes concernant ce genre de systèmes ont vu le jour.

C'est ce en quoi consistait notre approche : une étude numérique exacte, qui fournit une description précise de l'état fondamental du système. Pour cela, nous avons utilisé un algorithme de Monte-Carlo quantique appelé « Fonctions de Green Stochastiques » (SGF). Cet algorithme fournit des résultats exacts en dehors des erreurs statistiques mais sa grande force réside surtout dans le calcul des fonctions de Green à N -corps, qui permettent d'étudier l'ordre à longue portée qui peut émerger dans ces systèmes fortement corrélés. Une description de cet algorithme a été donnée dans le second chapitre (page 36) et de manière plus approfondie dans [Rousseau 2008a, Rousseau 2008b]. Conjointement, nous avons aussi utilisé une approche de champ moyen, elle aussi présentée au chapitre 2. Celle-ci consiste à approximer le Hamiltonien avant de le diagonaliser, dans notre cas de manière numérique. Bien que cette méthode soit approximative, elle présente l'avantage d'être facile à implémenter. De plus, dans certains cas, elle fournit des résultats en très bon accord avec les résultats de l'algorithme SGF, comme ce fut le cas pour le second modèle que nous avons étudié.

Le premier modèle, étudié dans le troisième chapitre (page 43), s'inscrit dans le domaine des atomes ultra-froids sur réseaux optiques. Celui-ci consiste en un modèle de Bose-Hubbard à deux bandes : une première bande contenant un seul boson de spin $1/2$ par site, couplée avec une seconde bande contenant un nombre non fixé de bosons (eux aussi de spin $1/2$) pouvant se mouvoir sur un réseau bidimensionnel carré. Le couplage \mathcal{J} est de nature antiferromagnétique, et les bosons itinérants ont de plus une interaction de répulsion \mathcal{U} sur site. Il s'agit en fait de la version bosonique du célèbre modèle de Kondo sur réseau. De tels systèmes sont aujourd'hui réalisables expérimentalement et permettent donc de réaliser des modèles de Bose-Hubbard multi-bandes [Müller 2007, Clément 2009, Wirth 2011].

Nous nous sommes concentrés sur le cas où le rapport entre interaction Kondo

et interaction de répulsion \mathcal{J}/U est fixé et vaut 0.05 puis nous nous sommes attachés à définir le diagramme de phase du système dans le plan $(t/U, \mu/U)$ et à étudier les propriétés de transport et magnétiques.

Nous avons obtenu un diagramme de phase très semblable à celui du modèle de Bose-Hubbard traditionnel, où l'on observe des lobes de Mott entourés d'une phase superfluide. Une différence est que la taille du premier lobe de Mott est fortement renforcée par l'interaction Kondo. Les différentes phases exhibent par ailleurs un caractère magnétique : paramagnétique pour la phase de Mott de densité 1 et ferromagnétique partout ailleurs. Nous avons aussi étudié la nature des transitions de phases brisant la symétrie $U(1)$ associée à ce modèle. Que la transition se fasse en modulant l'interaction t/U (à densité constante) ou en modulant μ/U (à interaction constante), celle-ci est du second ordre. Lorsqu'on augmente le ratio \mathcal{J}/U , cela renforce le caractère isolant du système et la transition entre phase de Mott et phase superfluide devient de plus en plus douce et reste du second ordre. On peut aussi rappeler le comportement particulier du spin total du système : celui-ci garde une valeur constante dans chacun des deux régimes, isolant et superfluide.

Enfin, nous avons étudié l'influence de la température sur ces différents comportements qui, en toute logique, vient détruire l'ordre à longue portée pouvant exister dans le système. Les propriétés de transport sont modifiées de façon très similaire à celle du modèle de Bose-Hubbard traditionnel : la phase de Mott est immédiatement détruite à température non nulle, de même que le BEC. Ceux-ci laissent leur place à un quasi-Mott ainsi qu'à une phase superfluide mais sans condensat. À plus haute température, on observe un *crossover* entre quasi-Mott et liquide normal de Bose (LNB) et une transition dans la classe d'universalité BKT entre phase superfluide et LNB. Le comportement en température des phases ordonnées magnétiquement est quant à lui plus particulier. La phase de Mott ferromagnétique perd son caractère magnétique très rapidement, contrairement à la phase superfluide où l'on a observé un regain dans la valeur du spin total : cela provient du fait que les corrélations magnétiques inter- et intra-espèces ne décroissent pas de la même manière avec la température.

Une direction possible d'investigation serait de varier le nombre d'impuretés dans le réseau, afin de revisiter de manière plus réaliste le modèle de Kondo. On pourrait de cette façon étudier de quelle manière le couplage $RKKY$ dépend de la distance entre impuretés, et comment ce dernier est affecté.

Le second modèle, quant à lui, s'inscrit dans un contexte d'électrodynamique quantique en cavité (ou sur circuit) sur réseau, dans un régime dit de « couplage ultra-fort ». Ici, on considère un sous-système composé d'un système à deux niveaux piégé dans une cavité, qui interagit avec un mode du champ électromagnétique. Plusieurs de ces sous-systèmes sont ensuite couplés sur un réseau unidimensionnel, et les quanta du champ électromagnétique peuvent se mouvoir entre cavités plus

proches voisines. Le système ainsi obtenu est décrit par le modèle de Rabi sur réseau. La force de l'interaction est telle que les processus à plusieurs photons (représentés par les termes appelés contre-rotatifs), habituellement négligés dans le régime de couplage fort, ne peuvent plus l'être si l'on veut correctement décrire le système. Pour l'instant, très peu d'études exactes de ce modèle ont été menées, celui-ci étant pourtant d'une importance capitale. En effet, de plus en plus de dispositifs expérimentaux permettent d'atteindre ce régime de couplage ultra-fort [Niemczyk 2010, Fedorov 2010, Anappara 2009, Todorov 2010].

Comme pour le premier modèle, nous nous sommes attachés à déterminer le diagramme de phase de ce système et à analyser les différentes phases que celui-ci adopte. Nous avons vérifié, via des techniques de *finite size scaling*, que le modèle est bien dans la classe d'universalité du modèle d'Ising bidimensionnel. Le modèle de Rabi sur réseau peut adopter trois phases : une phase incohérente, une phase cohérente ainsi qu'une phase instable. La phase incohérente est caractérisée par un réseau de cavités qui sont indépendantes tandis que lorsque le système adopte une phase cohérente, les cavités sont couplées au même mode du champ. De plus, les systèmes à deux niveaux se polarisent : il en résulte une phase ferroélectrique. Cette phase cohérente ressemble en tout point à la phase superradiante du modèle de Dicke, où un ensemble de systèmes à deux niveaux (non organisés sur un réseau) est couplé à un seul mode du champ électromagnétique.

Ensuite, nous avons exploré différentes manières par lesquelles le modèle de Rabi sur réseau devient équivalent au modèle de Jaynes-Cummings sur réseau, qui décrit la situation de couplage fort. Le modèle de Jaynes-Cummings a les mêmes propriétés critiques que le modèle de Bose-Hubbard et donc le même comportement : le diagramme de phase présentera des phases de Mott ainsi qu'une région superfluide. La première manière, qui semble évidente, est de diminuer suffisamment (de deux ordres de grandeur) les valeurs des termes contre-rotatifs vis à vis des termes rotatifs. L'autre, beaucoup moins intuitive, est d'introduire un décalage énergétique entre résonance atomique et mode du champ négatif. Dans ces deux cas, les deux modèles deviennent équivalents. Pour le cas du désaccord négatif, on observe une équivalence uniquement pour le lobe de Mott à zéro et à une excitation. Nous avons donc exploré des modèles étendus à deux puis trois atomes par site et nous avons trouvé une équivalence entre les deux modèles seulement pour le lobe à zéro excitation et pour le lobe à un nombre d'excitation correspondant au nombre d'atomes par site.

Cependant, notre approche néglige totalement les effets dissipatifs, inhérents à toute expérience. Il serait judicieux d'ajouter un terme de pompage et de perte pour la cavité, situation décrite par la théorie *input-output* [Gardiner 2004]. Ces termes doivent bien entendu être faibles devant g afin de rester en situation de couplage fort. À l'équilibre, nous attendons, dans une certaine gamme de paramètres, la formation d'un condensat de Bose-Einstein de photons. Par contre, en dehors de cet équilibre, une cohérence de phase apparaît au travers du effet laser. Notre

problème est que l'algorithme de Monte-Carlo quantique ne permet pas d'étudier des Hamiltoniens non hermitiens, et donc des systèmes hors équilibre. On peut toutefois se poser la question, suite à l'inclusion dans le Hamiltonien de termes de pertes/gains, qui seraient hermitiens conjugués : ne s'approche-t-on pas d'une situation hors équilibre, et donc de systèmes réels ?

Une autre voie pour décrire ces systèmes dans une plus large gamme de paramètres serait de rajouter le terme diamagnétique $H_{A^2} = D \sum_i (a_i + a_i^\dagger)^2$, avec $D = \alpha g^2 / \omega_s$ dans l'Hamiltonien de Rabi sur réseau (avec α positif que l'on modulerait). Ceci permettrait de décrire des réseaux de cavités couplées opérant dans un régime de couplage fort profond, qui est atteint pour des valeurs relativement élevées de couplage telles que $g/\omega_l \gtrsim 1$. Ce terme est facile à implémenter dans l'algorithme de Monte-Carlo quantique que nous utilisons.

Enfin, nous avons mentionné à plusieurs reprises que la phase superradiante est analogue à celle que l'on retrouve dans le modèle de Dicke, dans lequel un ensemble d'atomes est couplé à un seul mode du champ électromagnétique. Cette transition peut aussi être observée dans des systèmes où l'on couple un BEC avec une cavité optique [Baumann 2010]. On pourra observer un état où les atomes du BEC vont s'auto-organiser quand on pompe suffisamment la cavité. Ce système constitue une direction d'étude que nous avons choisi de prendre et est actuellement en cours d'exploration. ESSLINGER *et al.* dérivent leur Hamiltonien à partir du modèle de Dicke, afin d'obtenir un modèle de Bose-Hubbard bidimensionnel présentant des interactions à portée infinie, donné par le Hamiltonien suivant [Landig 2016] :

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle e,o \rangle} (a_e^\dagger a_o + \text{h.c.}) + \frac{U_s}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) - \frac{U_l}{L^2} (\sum_e n_e - \sum_o n_o)^2 - \mu \sum_i n_i. \quad (4.64)$$

Ici, les indices i , e et o dénotent respectivement tous les sites, les sites pairs puis les sites impairs du réseau. Les opérateurs a_i^\dagger (a_i) sont les opérateurs bosoniques de création (annihilation) au site i . Le premier terme est le terme de saut d'amplitude t entre plus proches voisins, qui favorise la délocalisation des bosons. Le second terme décrit l'interaction répulsive sur site entre bosons avec une amplitude U_s , qui lui favorise la localisation, tandis que le dernier terme fixe le nombre de particules dans l'ensemble grand-canonique. On reconnaît dans ces trois termes le modèle de Bose-Hubbard traditionnel.

La richesse de ce modèle réside dans le troisième terme qui décrit des interactions à portée infinie qui sont physiquement dues au couplage des bosons au mode du champ de la cavité. Quand celui-ci est positif, il favorise une onde de densité dans le système.

Expérimentalement, ESSLINGER *et al.* observent 4 phases dans le cas où $\rho = 1$: une phase superfluide (SF) qui est aussi condensée pour cette dimension, une phase de Mott (MI), une onde de densité (CDW) caractérisée par une mise en ordre en échiquier, ainsi qu'une phase supersolide (SS), comme le montre la figure 4.30. Cette

phase quantique, tout à fait étonnante puisqu'elle combine un ordre à longue portée à la fois diagonal et non diagonal, a été évoquée pour la première fois par PENROSE et ONSAGER [Penrose 1956] avec la conclusion qu'une telle phase était impossible, ce qui a ensuite été contredit au tout début des années 70 [Andreev 1969, Leggett 1970, Chester 1970].

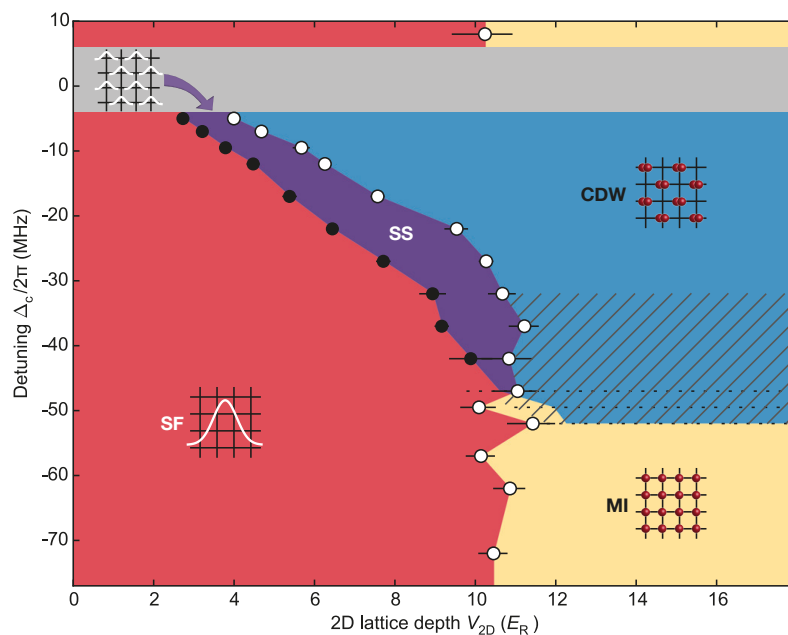


FIGURE 4.30 – Diagramme de phase du modèle de Bose-Hubbard avec interactions à longue portée décrit par le Hamiltonien 4.64. Figure tirée de la référence [Landig 2016].

Nous avons commencé à dresser numériquement le diagramme de ce système, en utilisant deux approches : notre algorithme de Monte-Carlo quantique, ainsi qu'un algorithme de « Gutzwiller Monte-Carlo ». Cette méthode, qui est un champ moyen, permet de simuler un cluster en utilisant l'ansatz de Gutzwiller combiné à une approche Monte-Carlo classique avec l'algorithme de Metropolis. Celle-ci présente l'avantage de reconstruire artificiellement des fonctions de corrélations, telles que la fraction condensée et le facteur de structure.

La figure 4.31 présente un diagramme de phase prévisionnel, équivalent à celui de la figure 4.30 avec les paramètres du Hamiltonien 4.64 dans le plan $(U_s/t, U_l/U_s)$.

On observe que les deux méthodes donnent des résultats qui sont en bon accord qualitatif et qui redonnent les quatre zones obtenue par ESSLINGER *et al.* Nous nous concentrons actuellement sur une étude plus approfondie de la zone supersolide. En effet, cette dernière pourrait être juste une zone de coexistence entre phase superfluide et onde de densité.

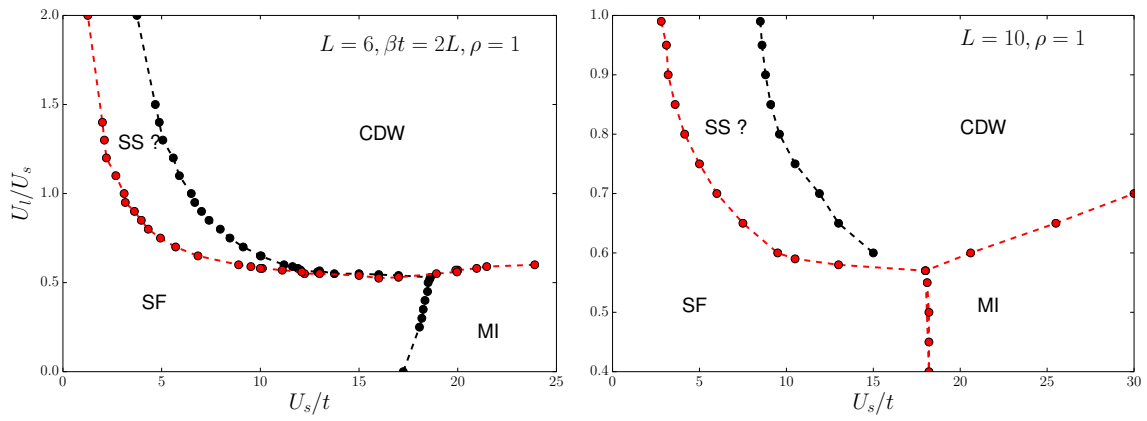


FIGURE 4.31 – Diagrammes de phase de l'Hamiltonien 4.64, pour $\rho = 1$ obtenu via l'algorithme SGF (à gauche) et via un algorithme de Gutzwiller Monte-Carlo (à droite). On retrouve les quatre zones de la figure 4.30.

Bibliographie

- [Anappara 2009] Aji A. Anappara, Simone De Liberato, Alessandro Tredicucci, Cristiano Ciuti, Giorgio Biasiol, Lucia Sorba et Fabio Beltram. *Signatures of the ultrastrong light-matter coupling regime*. Phys. Rev. B, vol. 79, page 201303, May 2009. (Cit  en pages 10 et 145.)
- [Andreev 1969] A. F. Andreev et I. M. Lifshitz. *Quantum Theory of Defects in Crystals*. JETP, vol. 56, page 2057, Dec 1969. (Cit  en page 147.)
- [Baumann 2010] Kristian Baumann, Christine Guerlin, Ferdinand Brennecke et Tilman Esslinger. *Dicke quantum phase transition with a superfluid gas in an optical cavity*. Nature, vol. 464, pages 1301–1306, Apr 2010. (Cit  en page 146.)
- [Chester 1970] G. V. Chester. *Speculations on Bose-Einstein Condensation and Quantum Crystals*. Phys. Rev. A, vol. 2, pages 256–258, Jul 1970. (Cit  en page 147.)
- [Cl ment 2009] D. Cl ment, N. Fabbri, L. Fallani, C. Fort et M. Inguscio. *Multi-band spectroscopy of inhomogeneous Mott-insulator states of ultracold bosons*. New Journal of Physics, vol. 11, no. 10, page 103030, 2009. (Cit  en pages 50, 57 et 143.)
- [Fedorov 2010] A. Fedorov, A. K. Feofanov, P. Macha, P. Forn-D az, C. J. P. M. Harmans et J. E. Mooij. *Strong Coupling of a Quantum Oscillator to a Flux Qubit at Its Symmetry Point*. Phys. Rev. Lett., vol. 105, page 060503, Aug 2010. (Cit  en pages 10, 98 et 145.)
- [Gardiner 2004] Crispin Gardiner et Peter Zoller. *Quantum Noise*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004. (Cit  en page 145.)
- [Landig 2016] Renate Landig, Lorenz Hruby, Nishant Dogra, Manuele Landini, Rafael Mottl, Tobias Donner et Tilman Esslinger. *Quantum phases from competing short- and long-range interactions in an optical lattice*. Nature, vol. 532, pages 476–479, Apr 2016. (Cit  en pages 56, 146 et 147.)
- [Leggett 1970] A. J. Leggett. *Can a Solid Be "Superfluid"?* Phys. Rev. Lett., vol. 25, pages 1543–1546, Nov 1970. (Cit  en page 147.)
- [M ller 2007] Torben M ller, Simon F lling, Artur Widera et Immanuel Bloch. *State Preparation and Dynamics of Ultracold Atoms in Higher Lattice Orbitals*. Phys. Rev. Lett., vol. 99, page 200405, Nov 2007. (Cit  en pages 50, 57 et 143.)
- [Niemczyk 2010] T. Niemczyk, F. Deppe, H. Huebl, E. P. Menzel, F. Hocke, M. J. Schwarz, J. J. Garcia-Ripoll, D. Zueco, T. Hummer, E. Solano, A. Marx et R. Gross. *Circuit quantum electrodynamics in the ultrastrong-coupling regime*. Nat Phys, vol. 6, pages 772–776, Oct 2010. (Cit  en pages 10, 98 et 145.)

- [Penrose 1956] Oliver Penrose et Lars Onsager. *Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium*. Phys. Rev., vol. 104, pages 576–584, Nov 1956. (Cité en page 147.)
- [Rousseau 2008a] V. G. Rousseau. *Stochastic Green function algorithm*. Phys. Rev. E, vol. 77, page 056705, May 2008. (Cité en pages 36, 38 et 143.)
- [Rousseau 2008b] V. G. Rousseau. *Directed update for the stochastic Green function algorithm*. Phys. Rev. E, vol. 78, page 056707, Nov 2008. (Cité en pages 36 et 143.)
- [Todorov 2010] Y. Todorov, A. M. Andrews, R. Colombelli, S. De Liberato, C. Ciuti, P. Klang, G. Strasser et C. Sirtori. *Ultrastrong Light-Matter Coupling Regime with Polariton Dots*. Phys. Rev. Lett., vol. 105, page 196402, Nov 2010. (Cité en pages 10 et 145.)
- [Wirth 2011] Georg Wirth, Matthias Olschlager et Andreas Hemmerich. *Evidence for orbital superfluidity in the P-band of a bipartite optical square lattice*. Nat Phys, vol. 7, pages 147–153, Feb 2011. (Cité en pages 50, 57 et 143.)

BOSONS COUPLÉS À DES SPINS 1/2 SUR RÉSEAU

Résumé : Les systèmes fortement corrélés, pouvant adopter certaines phases surprenantes de la matière, émergent dans le domaine des atomes ultra-froids ou dans celui de l'électrodynamique quantique en cavité (CQED) sur réseau. Ceux-ci sont au centre d'intenses travaux aussi bien expérimentaux que théoriques. Dans cette thèse, nous présentons une étude de deux modèles de bosons avec deux ou zéro états internes, soit des bosons de spin 1/2. Ceux-ci peuvent se déplacer sur un réseau, et sont localement couplés avec des spins 1/2. Notre intérêt réside dans la détermination du diagramme de phase de l'état fondamental de ces systèmes ainsi que de l'étude des propriétés de phase et des transitions entre ces dernières. Nous avons utilisé deux méthodes : l'une approchée par une théorie de champ moyen et l'autre utilisant des simulations de Monte-Carlo quantique, qui fournit des résultats numériquement exacts.

Le premier modèle, appelé modèle de Kondo bosonique sur réseau, s'inscrit dans le contexte des atomes ultra-froids sur réseau. Nous trouvons que sa physique est proche de celle du modèle de Bose-Hubbard, présentant des phases de Mott et superfluide. Le couplage local renforce le caractère isolant et on observe l'émergence de phases magnétiques au travers de couplage direct ou indirect entre bosons et/ou spins. Les effets thermiques, inhérents à tout dispositif expérimental, sont aussi étudiés. Le second modèle s'inscrit dans le domaine de la CQED sur réseau, décrit un régime de couplage ultra-fort entre des photons et des atomes à deux niveaux (équivalents à des spins 1/2) et est le modèle de Rabi sur réseau. Le diagramme de phase présente juste deux phases : une phase cohérente dans laquelle les spins locaux s'ordonnent ferromagnétiquement ainsi qu'une phase incohérente compressible paramagnétique.

Mots clés : Interaction lumière-matière, Électrodynamique quantique en cavité, Couplage ultra-fort, Réseaux optiques, Condensat de Bose-Einstein, Modèle de Bose-Hubbard, Monte-Carlo quantique, Thermodynamique statistique quantique.

BOSONS COUPLED TO SPINS 1/2 IN LATTICE

Abstract : Strongly correlated systems, where new surprising phases of matter may appear both in the context of ultra-cold atoms and cavity quantum electrodynamics on lattice, are the focus of intense experimental and theoretical activity. In this thesis we present a study of two models of bosons with two or zero internal states, that is to say spin-1/2 or spin-0 bosons. These particles can move around a lattice, and they are locally coupled to immobile spins 1/2. Our interest was to determine the ground state phase diagram, study phase properties and quantum phase transitions. We used two methods : an approximate one using a mean field approach and the other using quantum Monte-Carlo simulations, which provides numerically exact results.

The first model, namely the bosonic Kondo lattice model, is in the context of ultra-cold atoms in optical lattices. We found that its physics is close to that of the Bose-Hubbard model, exhibiting Mott and superfluid phases. The local coupling strengthens the insulating behaviour of the system and magnetism emerges through indirect or direct coupling between bosons. Thermal effects, inherent in experiments, are also studied. The second model, which is in the context of light-matter interaction, describes a situation of an ultra-strong coupling between photons and local two-level atoms (analogous to spins 1/2) and is known as the Rabi lattice model. The phase diagram generally consists of only two phases : a coherent phase in which local spins order ferromagnetically and a compressible paramagnetic incoherent one.

Keywords : Light-matter interaction, Cavity quantum electrodynamics, Ultra-strong coupling regime, Optical lattices, Bose-Einstein condensate, Bose-Hubbard model, Quantum Monte-Carlo, Quantum Statistical Thermodynamics.