



**HAL**  
open science

# Etude des phases topologiques de type Haldane par l'intermédiaire d'un système de fermions alcalino-terreux ultrafroids de type double-puits

Pierre Fromholz

## ► To cite this version:

Pierre Fromholz. Etude des phases topologiques de type Haldane par l'intermédiaire d'un système de fermions alcalino-terreux ultrafroids de type double-puits. Physique [physics]. Université de Cergy Pontoise, 2018. Français. NNT : 2018CERG0976 . tel-02286006

**HAL Id: tel-02286006**

**<https://theses.hal.science/tel-02286006v1>**

Submitted on 13 Sep 2019

**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.

# Thèse

Étude des phases topologiques de type Haldane  
par l'intermédiaire d'un système de fermions  
alcalino-terreux ultrafroids de type double-puits



Thèse soutenue le 12 octobre 2018  
à l'Université de Cergy-Pontoise,  
Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation,  
École doctorale EM2P  
(Economie, Management, Mathématiques, Physique)  
Université de Cergy-Pontoise

pour l'obtention du grade de Docteur ès Sciences  
spécialité Physique Théorique  
par Pierre FROMHOLZ

acceptée sur proposition du jury:

Mme LE HUR Karyn, Rapporteur  
M. MILA Frédéric, Rapporteur  
M. JOLICOEUR Thierry, examinateur  
Mme MINGUZZI Anna, examinatrice  
M. MISGUICH Grégoire, examinateur  
M. LECHEMINANT Philippe, directeur de thèse

Pontoise, UCP, 2018



"Remind yourself that overconfidence  
is a slow and insidious killer."  
— Wayne June





*A Silvia*



# Remerciements

Je souhaite remercier Philippe Lecheminant en priorité, pour m'avoir encadré pendant ces trois ans de thèse, pour avoir mis un point d'honneur à toujours être disponible, pour avoir bien voulu répondre à toutes mes questions et pour m'avoir proposé énormément d'opportunités pour rencontrer d'autres chercheurs, aspirants ou vétérans, en France ou à l'étranger, et m'avoir ainsi permis de m'intégrer davantage dans un groupe dont je souhaite faire partie.

Je remercie les rapporteurs de cette thèse Karyn Le Hur et Frédérique Mila pour avoir consacré leur temps et leur attention à la lecture de ce manuscrit. Merci également à Thierry Jolicoeur, Anna Minguzzi et Grégoire Minsguish d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Je remercie également les collègues avec lesquels j'ai eu la chance de travailler directement, à savoir Keisuke Totsuka pour son aide sur l'algèbre  $SU(N)$ , à Sylvain Capponi, pour son expertise inestimable sur le DMRG (et qui me doit toujours un pot de confiture de Yuzu) et bien sûr, à David Papoular qui, en plus de tout savoir sur les expériences (à condition de lui accorder un délai), n'a pas hésité à me prodiguer ses conseils, échanger des idées et parfaire ma culture cinématographique et littéraire.

Je souhaite également remercier tout les permanents du laboratoire, trop nombreux pour ne pas transformer cette section en liste, et qui ont toujours fait preuve de bonne volonté envers moi. C'est aussi grâce à eux que j'ai eu cette formidable opportunité de devenir moniteur pendant ces trois ans, à enseigner à des L1 jusqu'à des M1, exercices et cours. Je reste persuadé que de telles opportunités, en plus des conditions de travail remarquables (je n'ai partagé mon grand bureau qu'avec au plus un collègue !) dans lesquelles j'ai pu évoluer, sont rares voire inédites en France. À cet égard, je salue Sylvie Villemin pour ses talents remarquables de secrétaire (et cuisinière), Cédric Gérard pour être systématiquement intervenu pour tous les problèmes informatiques que j'ai pu rencontrer (et lui aussi, pour sa cuisine) et Yann Costes pour m'avoir aidé à utiliser correctement le *cluster*, à me former au le calcul parallèle et pour m'avoir partagé son enthousiasme caractéristique pour la ville de Cergy.

Je remercie bien sûr mes compagnons de la précarité tels que Valentin, pour m'avoir passé le relais et dont le travail précède cette thèse, mais aussi Aurélien et Sabi pour m'avoir aidé à m'intégrer au labo. Je remercie Quentin, pour avoir pris sur lui (et avec succès) la responsabilité d'animer le labo et aux nouveaux qui vont prendre le relais : Claudia, Vinki, Thu, Jawad, Hongzi et Marco.

Je remercie ma famille, mon père, ma mère et ma soeur et bien sûr Silvia pour être à mes côtés, pour m'avoir soutenu, et sur lesquels je sais que je peux compter.

## Remerciements

---

Enfin, je remercie l'École Normale Supérieure pour avoir financé cette thèse, l'École doctorale EM2P, pour l'avoir prise en charge, l'Université de Cergy-Pontoise, pour avoir mis à disposition les locaux, en plus de m'avoir proposé les missions d'enseignement, et toutes les sources de financement dont j'ai pu profiter par ailleurs pour assister à des séminaires ou des écoles d'été.

*Pontoise, 12 Octobre 2018*

P. F.

# Sommaire

<b>Remerciements</b>	<b>vii</b>
<b>Liste des figures</b>	<b>xi</b>
<b>Liste des tableaux</b>	<b>xiv</b>
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>1 Le cas <math>N = 2</math> et la phase de Haldane</b>	<b>7</b>
1.1 La chaîne de spins $1/2$	9
1.1.1 Les états fondamentaux de la chaîne d'Ising : états de Néel	9
1.1.2 Soliton et magnon	10
1.1.3 Phase critique	14
1.1.4 Mot sur l'intégrabilité	16
1.2 La chaîne de spins 1	19
1.2.1 Phase gappée	19
1.2.2 Construction AKLT, phase SPT	22
1.3 La conjecture de Haldane	28
1.3.1 Approche semi-classique	28
1.3.2 Entier pair et impair	33
1.3.3 Généralisation à tous $N$	36
1.4 Classification des phases topologiques	38
1.4.1 Pour les modèles sans interaction	38
1.4.2 Pour les modèles avec interactions	42
1.5 Réalisations et expériences	46
1.5.1 Les chaînes de Haldane existantes	46
1.5.2 Implémentations par l'intermédiaire d'atomes froids	47
1.6 Résumé du chapitre	51
<b>2 Le modèle du double-puits</b>	<b>53</b>
2.1 Réalisation de la symétrie $SU(N)$	55
2.1.1 Par des alcalins	55
2.1.2 Par des alcalino-terreux	57
2.2 Dérivation du modèle discret du double-puits	58

2.2.1	Fonctions de Wannier . . . . .	58
2.2.2	Modèle de Hubbard généralisé . . . . .	63
2.2.3	Symétries du hamiltonien . . . . .	65
2.3	Les implémentations alternatives avec les alcalino-terreux . . . . .	68
2.3.1	Le modèle g-e . . . . .	68
2.3.2	Le modèle p-band . . . . .	69
2.3.3	Comparaisons . . . . .	70
2.4	Résumé du chapitre . . . . .	72
<b>3</b>	<b>L'approche de couplage faible</b>	<b>73</b>
3.1	Théorie des champs conformes . . . . .	75
3.1.1	Limite continue de la théorie libre . . . . .	75
3.1.2	Champs conformes . . . . .	77
3.1.3	Renormalisation . . . . .	82
3.2	Interprétations des diagrammes de phase . . . . .	87
3.2.1	L'asymptote intégrable : le modèle de Gross-Neveu . . . . .	87
3.2.2	Dualité . . . . .	88
3.2.3	Non-intégrabilité : bosonisation . . . . .	89
3.2.4	Synthèse des diagrammes . . . . .	93
3.3	S'éloigner du couplage faible : le DMRG . . . . .	95
3.3.1	Courte présentation du DMRG . . . . .	95
3.3.2	Les résultats du DMRG . . . . .	97
3.3.3	Les phases SPT d'après le DMRG . . . . .	97
3.4	Résumé du chapitre . . . . .	104
<b>4</b>	<b>L'approche de couplage fort</b>	<b>105</b>
4.1	La limite atomique . . . . .	106
4.1.1	Tableaux d'Young, considérations sur les symétries . . . . .	106
4.1.2	La diagonalisation du hamiltonien de la limite atomique . . . . .	109
4.1.3	Diagrammes de la limite atomique . . . . .	112
4.2	La perturbation par le terme de <i>hopping</i> . . . . .	115
4.2.1	Approche générale . . . . .	115
4.2.2	Cas de l'adjointe de SU(3) . . . . .	116
4.2.3	Approche heuristique . . . . .	119
4.3	Caractérisation des phases SPTs . . . . .	124
4.3.1	Construction "à la AKLT" . . . . .	124
4.3.2	Interprétations supplémentaires des résultats du DMRG . . . . .	126
4.3.3	Les cas $N > 4$ et les autres classes de SPT . . . . .	127
4.4	Résumé du chapitre . . . . .	130
<b>5</b>	<b>Le modèle de la chaîne de spin <math>3 - \bar{3}</math></b>	<b>131</b>
	<b>Conclusion</b>	<b>146</b>

---

<b>A</b>	<b>Notions pratiques sur <math>SU(N)</math></b>	<b>151</b>
A.1	Généralités . . . . .	151
A.2	Conventions . . . . .	152
<b>B</b>	<b>Matériel additionnel pour le couplage faible</b>	<b>155</b>
B.1	Courants de Wess-Zumino-Witten . . . . .	155
B.2	Opérateurs d'interactions . . . . .	158
B.3	Calcul de la limite continue du hamiltonien d'interaction . . . . .	159
B.3.1	OPEs sur les courants . . . . .	159
B.3.2	Calculs des termes d'interactions . . . . .	161
B.4	Calcul des OPEs des opérateurs d'interactions . . . . .	163
B.5	Equations de renormalisation . . . . .	165
<b>C</b>	<b>Approche de couplage faible ; cas incommensurable du modèle <math>g</math>-<math>e</math> et <math>p</math>-band</b>	<b>169</b>
<b>D</b>	<b>Articles réalisés dans le cadre de cette thèse</b>	<b>181</b>
	<b>Appendices</b>	<b>150</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>217</b>
	<b>Résumé (English/Français)</b>	<b>218</b>





# Liste des figures

1	Chaîne paramagnétique et chaîne antiferromagnétique. . . . .	3
2	Schéma du dispositif expérimental de mesure de l'effet Hall, et mesures de l'effet Hall quantique fractionnaire. . . . .	4
1.1	Chaîne de spins de Heisenberg . . . . .	7
1.2	Solitons de la chaîne $XXZ$ . . . . .	13
1.3	Diagramme de phase du modèle $XXZ$ en fonction de l'anisotropie et du champ magnétique. . . . .	16
1.4	Solitons de la chaîne de spins 1 et leur dispersion. . . . .	21
1.5	Image dynamique de l'état fondamental de la phase de Haldane. . . . .	22
1.6	Relations de dispersion du triplet de magnons de la chaîne de spins 1. . . . .	23
1.7	État VBS de spin 1. . . . .	23
1.8	L'état VBS pour une chaîne finie. . . . .	26
1.9	Diagramme de phase du modèle biquadratique . . . . .	27
1.10	Représentation schématique des trois diagrammes de phases topologiques sans interaction. . . . .	41
1.11	Divers scénarios possibles pour les phases topologiques avec interactions. . . . .	44
1.12	Le composé NENP . . . . .	47
1.13	Le modèle à deux canaux de la résonance de Feshbach. . . . .	49
2.1	Structure hyperfine de ${}^6\text{Li}$ et ${}^7\text{Li}$ . . . . .	56
2.2	Potentiel du double-puits et allure des fonctions de Wannier associées . . . . .	59
2.3	Hamiltonien du double-puits . . . . .	63
2.4	Hamiltonien du modèle g-e . . . . .	69
2.5	Hamiltonien du modèle $p$ -band . . . . .	70
3.1	Relations de dispersion du modèle sans interaction . . . . .	85
3.2	Diagrammes des phases non interprétés du couplage faible pour $N = 2, 3$ et $4$ . . . . .	86
3.3	Représentation imagée de quelques phases topologiquement triviales pour $N = 3$ . . . . .	93
3.4	Diagrammes interprétés des phases du couplage faible pour $N = 3$ et $4$ . . . . .	94
3.5	Diagramme des phases de DMRG pour $N = 3$ et $N = 4$ . . . . .	98
3.6	Quantités locales obtenues par DMRG pour les phases $\text{SP}_\pi$ et ODW. . . . .	99
3.7	Quantités locales obtenues par DMRG pour les phases CDW et BDW. . . . .	100
3.8	Quantités locales obtenues par DMRG pour les phases $\text{SP}_0$ et SPT. . . . .	101

## Liste des figures

---

3.9	Spectre d'intrication des phases SPTs pour $N = 3$ et $N = 4$ . . . . .	103
4.1	Diagramme de phase de la limite atomique pour $N = 2$ . . . . .	113
4.2	Diagramme de phase de la limite atomique pour $N = 3$ . . . . .	114
4.3	Diagramme de phase de la limite atomique pour $N = 4$ . . . . .	114
4.4	Comparaison des spectres exacts du hamiltonien double-puits à deux sites et du hamiltonien effectif de couplage fort pour $N = 3$ . . . . .	119
4.5	Quantités locales obtenues par DMRG du modèle double-puits pour $N = 3$ dans le régime de couplage fort et de "fort <i>hopping</i> transversal". . . . .	120
4.6	Schéma des étapes de la dérivation du modèle d'échelle de spin $\mathbf{3-}\bar{\mathbf{3}}$ à partir du modèle double-puits . . . . .	123
4.7	Construction AKLT pour les phases de Haldane $N = 2, 3$ et $4$ . . . . .	125
4.8	Quantités locales obtenues par DMRG pour les phases de Haldane $N = 2, 3$ et $4$	127
4.9	Diagramme de phase du modèle double-puits en fonction du rapport $U/t$ pour $N = 2, 3$ et $4$ . . . . .	128

# Liste des tableaux

1.1	Le <i>ten-fold way</i> . . . . .	40
1.2	Classification des isolants et superconducteurs topologiques sans interaction et "robustes" au désordre. . . . .	42
2.1	Description de trois espèces d'alcalino-terreux (ou assimilées) . . . . .	57
3.1	Ensemble des asymptotes obtenues par renormalisation du cas $N = 2$ . . . . .	84
3.2	Ensemble des asymptotes obtenues par renormalisation du cas $N = 3$ . . . . .	84
4.1	Casimirs quadratique et cubique pour la décomposition de $\mathbf{8} \otimes \mathbf{8}$ . . . . .	119
B.1	Tableau des OPEs des opérateurs d'interactions. . . . .	164
B.2	Tableau récapitulatif des anomalies des OPEs des opérateurs d'interactions. . .	164
B.3	Tableau des OPEs des opérateurs d'interactions (suite). . . . .	165



# Introduction

La physique de la matière condensée est un domaine de recherche très ambitieux puisqu'il mélange aujourd'hui à la fois des considérations fondamentales de mécanique quantique et des problèmes de physique statistique qui répètent que le tout est non seulement plus que la somme des ses parties, mais il est aussi très différent [1]. Mais c'est justement pour cette raison que le domaine attire tant en plus d'être un des domaines qui promet le plus de progrès technologiques visibles futures soit par l'invention de nouveaux matériaux, soit par l'utilisation inédite de matériaux déjà connus. C'est ainsi un domaine qui répond plus facilement à la question systématiquement posée aux chercheurs : à quoi ça sert ?

La réponse n'est en fait probablement pas centrée autour de ce progrès, mais plutôt autour de la compréhension du monde que ces recherches construisent, plus particulièrement concernant la matière et son comportement (conductivité, raideur ou encore capacité thermique). Ainsi, une des leçons capitales tirées de l'étude des systèmes de matière condensée est l'importance cruciale des symétries. C'est ainsi que la formulation actuelle de paradigme de Ginzburg-Landau [2, 3, 4] explique l'existence des phases de la matière (extension spatiale d'un échantillon où les propriétés physiques sont essentiellement homogènes) et des transitions entre ces phases grâce à ce même concept de symétrie. A chaque phase désordonnée est associé un groupe de symétrie qui laisse invariant les lois qui régissent le système et le système lui-même, aux fluctuations près. Cependant, dans certains régimes de paramètres, ces fluctuations peuvent devenir tellement larges, i.e. étendues, qu'une discontinuité apparaît dans les propriétés auparavant homogènes de l'échantillon. Les lois de la physique n'ont évidemment pas changées au delà de ce régime de transition mais, une réalisation du système obtenu n'est désormais plus laissée invariante par l'ensemble des symétries précédentes, et seule la moyenne de toutes les réalisations possibles reste invariante. Il s'agit là d'une nouvelle phase de la matière, moins symétrique que la phase précédente est donc plus ordonnée : il y a eu brisure spontanée de symétrie (spontanée car les lois physiques qui régissent le comportement microscopique des constituants élémentaires de l'échantillon sont restées les mêmes lors de la transition, c'est la réaction, l'agencement, la structure de ces constituants dans les nouveaux paramètres qui a changée). Afin de décrire cette nouvelle phase de la matière (e.g. ses excitations élémentaires), une nouvelle image, dite effective qui garde la symétrie restante mais oublie la symétrie brisée, source vaine de complication, est nécessaire. À son tour, cette symétrie restante peut être brisée en une symétrie plus petite pour une phase plus

ordonnée que la précédente. La distinction entre chacune de ces phases se fait alors par un paramètre d'ordre local propre à chaque phase, souvent lié à des fonctions de corrélations qui formalisent l'essentiel des mesures physiques que l'on peut faire sur le système (et donc des propriétés de ce dernier).

Ainsi, dresser la liste (certes infinie) de la totalité des groupes de symétries possibles en plus de toutes les manières de les briser doit permettre de dresser une liste exhaustive de toutes les phases possibles et de leurs comportements. Il restera bien sûr à identifier les bons constituants élémentaires du système, localiser la transition de phase et vérifier quelle brisure se produit alors. C'est dans cet esprit qu'une classification des 230 états de la matière cristalline à trois dimensions a pu être établie [5]. Parfois, la théorie (des champs) sous-jacente ne comporte que de faibles interactions seulement (voire aucune), et son étude complète est possible à condition de formuler le problème dans une base adéquate : celle des quasiparticules (phonons, magnons) sans correspondance systématique avec les particules "physique" (électrons, atomes, molécules). Le problème peut alors être caractérisé explicitement (i.e. traité analytiquement). Ce traitement est beaucoup moins aisé lorsque les interactions sont plus importantes : c'est le cas des systèmes fortement corrélés courants en matière condensée dans la recherche actuelle. Puisque l'influence du champ moyen  $y$  est moindre, le problème des fortes corrélations est plus naturel à basse dimension. Mais alors, la zoologie des phases  $y$  est plus restreinte. Mermin et Wagner [6, 7, 8] ont montré qu'à température finie, à une ou deux dimensions (spatiales) la connectivité entre les éléments constitutifs du système n'était jamais suffisante pour permettre des corrélations dites à longues portées indispensables pour l'établissement d'un ordre global autrement dit, d'une phase plus ordonnée. Plus exactement, ils interdisent la brisure spontanée de symétrie continue. La brisure de symétrie discrète (par exemple la brisure de la symétrie de translation de site en site dans un réseau vers la translation à un site sur deux seulement, comme la transition de la phase paramagnétique vers la phase ferromagnétique cf Fig. 1) est par contre, elle, toujours autorisée. Par ailleurs, au sein d'une même phase à basse dimension, quelques changements qualitatifs de ses propriétés peuvent être observés en fonction de son (ou ses) instabilités dominantes, qui peuvent être comprises comme des reliquats de la phase ordonnée qui n'a pas pu s'établir.

Étrangement, l'une des phases principales qui a motivée cette théorie, les supraconducteurs à haute température [9, 10], i.e. des systèmes dont la propriété remarquable est d'avoir une résistivité essentiellement nulle, échoue partiellement à être compris par cette approche. Parallèlement à ces études, un autre phénomène, l'effet Hall Quantique Fractionnaire [11] (*Fractional Quantum Hall Effect* ou FQHE, représentée Fig. 2) motive le développement d'une autre compréhension de certaines phases de la matière qui elle aussi se base sur les symétries, sans les briser cette fois : celle des isolants topologiques [12], théorie qui échoue à son tour à expliquer son exemple paradigmatique [13]. Ce n'est qu'en forgeant un troisième concept, celui d'ordre topologique, qui ne nécessite plus l'intervention d'une symétrie, mais plutôt une intrication à longue portée alors indispensable, qu'une partie des supraconducteurs et l'effet Hall quantique fractionnaire ont finalement pu être compris. Ainsi, les concepts d'ordre topologique et de phase topologique protégée par la symétrie (extension des isolants



Figure 1 – (Gauche) Représentation d'une chaîne paramagnétique de spin 1/2 dont le hamiltonien effectif (une chaîne libre par exemple) et l'état fondamental vérifient les symétries  $SU(2)$  et l'invariance par translation discrète (symétries visibles) car toutes les directions pour les spins sont *a priori* équivalentes\*. L'aimantation est nulle mais apparaît au moindre champ magnétique : sa susceptibilité magnétique est non nulle. (Droite) Représentation d'une chaîne antiferromagnétique après brisure spontanée de la symétrie  $SU(2)$  en  $U(1)$  (une direction est désormais privilégiée) et de l'invariance par translation discrète en deux (la périodicité est de deux). Le hamiltonien effectif devient par exemple le hamiltonien d'Ising antiferromagnétique également amagnétique avec une susceptibilité non nulle. On peut par contre construire un paramètre d'ordre local, l'aimantation alternée, qui la distingue de toutes les autres phases. Cette phase est plus ordonnée que la précédente, et apparaît en présence d'interactions antiferromagnétiques pour des températures suffisamment basses : en dessous de la température de Néel, pendant antiferromagnétique de la température de Curie de la phase ferromagnétique. D'après le théorème de Mermin-Wagner, la transition par brisure spontanée de la phase paramagnétique vers la phase (anti)ferromagnétique qui a un ordre à longue portée est impossible à  $T > 0$  à une et deux dimensions. Les deux phases ordonnées peuvent néanmoins apparaître à  $T = 0K$  grâce à la brisure de l'invariance par translation (cas antiferromagnétique) ou de l'invariance par renversement du temps (cas ferromagnétique).

\* La notion de phase est thermodynamique, il faut donc considérer des moyennes sur les réalisations seulement.

topologiques) viennent se cumuler au paradigme de Ginzburg-Landau et complexifier la classification des phases encore en cours. Par ailleurs la distinction entre deux phases topologiques visiblement différentes (expliquées par l'un ou l'autre des deux concepts topologiques) n'est plus faisable par un paramètre d'ordre. C'est par exemple le cas des phases du FQHE qui diffèrent toutes d'un nombre fractionnaire par leur conductance Hall sans que cette différence puisse être capturée par un paramètre d'ordre local. La même situation se produit en regardant la statistique des spinons ou la conductance Hall de spin pour les liquides de spin chiraux [14], ([15] pour les différences) dont les différentes phases semblent toutes disposer des mêmes symétries. Une nouvelle quantité caractéristique doit être considérée : celle d'invariant topologique. Il est important de noter que le terme "topologique" dans ordre topologique et isolant ou supraconducteur topologique n'a pas le même sens et la même origine. Concernant l'ordre topologique, le terme vient de la théorie des champs quantiques topologiques [16] utilisée pour le modèle effectif à basse énergie du liquide de spin chirale tel que le modèle  $U(1)$  de Chern-Simons, et se rapporte donc à l'intrication longue portée. La terminologie précise est ainsi "topologie quantique". La "topologie classique" des isolants topologiques par exemple fait, elle, référence aux propriétés des variétés continues comme par exemple le nombre de trous pour une sphère ou un tore. Les vortex d'un superfluide, le nombre de Chern, l'index  $\mathbb{Z}_2$  d'un isolant ou supraconducteur topologique sont tous des propriétés relatives à cette "topologie classique". C'est celle-ci qui est associée à la notion de "protection par la symétrie" qui fait l'objet de la présente thèse.



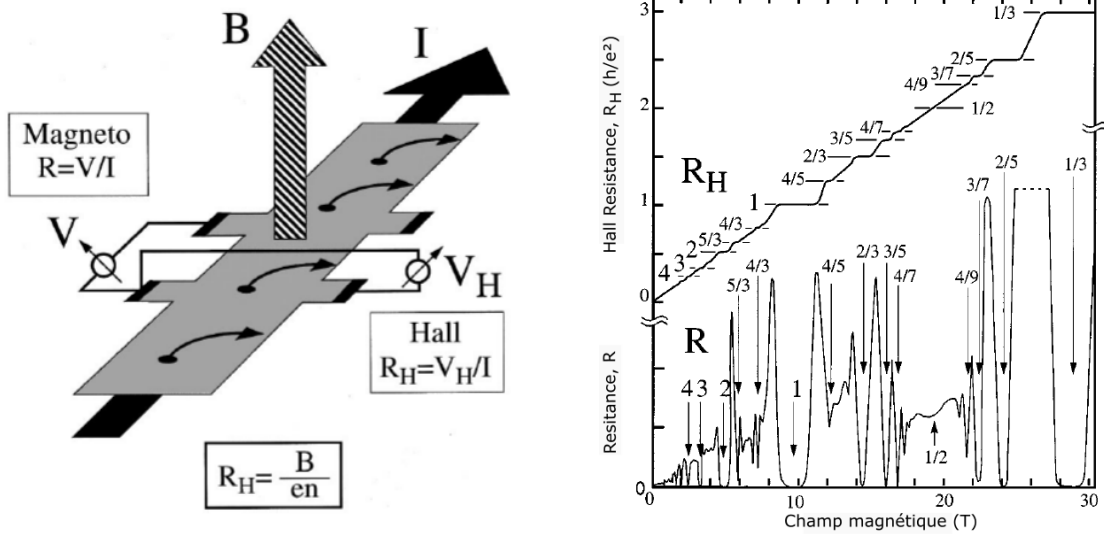


Figure 2 – (Gauche) Schéma du dispositif expérimental typique pour la mesure de la résistance (inverse de la conductance) de Hall. L'échantillon est considéré comme bidimensionnel.  $R$  est la résistance usuelle de l'échantillon,  $I$  l'intensité du courant,  $V$  la différence de potentiel entre l'amont et l'aval de l'échantillon,  $R_H$  la résistance de Hall,  $V_H$  est la différence de potentiel entre les bords transversaux de l'échantillon,  $B$  est le champ magnétique,  $e$  est la charge de l'électron et  $n$  est la densité d'électron par  $cm^2$ . Dans le régime classique, conformément aux formules indiquées, la résistance de Hall évolue linéairement avec le champ magnétique extérieur. (Droite) Mesures de la résistance et la résistance Hall en fonction du champ magnétique pour un échantillon 2D de GaAs/AlGaAs à mobilité ultra haute et dopé par modulation. La résistance Hall saute de plateaux en plateaux, parfois larges, qui diffèrent chacun de l'inverse d'une fraction du quantum de conductance. La résistance s'annule au niveau d'un plateau. Chaque plateau correspond à une phase différente, mais toutes ces phases vérifient les mêmes symétries. Figures adaptées de [17].

Quelque soit le type dont il est question, il n'apparaît expérimentalement que lorsque les phénomènes quantiques sont dominants, et il faut donc se placer à très basse température pour les observer. En particulier, pour regarder les propriétés de l'état fondamental (théoriquement), il est plus simple de se placer à température rigoureusement nulle  $T = 0K$  et ainsi éviter le remplissage statistique des niveaux d'énergie supérieurs (aux fluctuations quantiques près, négligées en ce qui concerne l'énergie, puisqu'on s'intéresse à l'état d'équilibre ou au moins stationnaire, et donc pour des longues durées). À cette température, les approches de basse énergie sont légitimes et amènent souvent à une description en terme de théorie des champs quantiques. Ces approches sont utiles pour comprendre les transitions de phases qui interviennent à  $T = 0K$  appelées *transitions de phase quantique* qui pilotent les transitions de phase à température (à peine) plus élevée qui nécessiteraient un formalisme bien plus lourd si elles étaient étudiées directement [18]. Mais surtout ce formalisme peut utiliser la rotation de Wick qui consiste à passer en "temps imaginaire" transformant une théorie quantique des champs à  $D$  dimensions spatiales + 1 dimension temporelle, à une théorie des champs

classique à  $D + 1$  dimensions spatiales. Il est alors d'usage de noter la dimension de la théorie quantique étudiée sous la forme  $D + 1$  pour rappeler ce même résultat qui autorise l'utilisation de toute la panoplie des résultats obtenus en théorie des champs classiques au cas quantique. C'est le cas du théorème de Mermin-Wagner rappelé précédemment qui a entre autre la conséquence d'interdire l'intrication à longue portée et donc les ordres topologiques à  $1 + 1$  dimensions.

C'est alors qu'Haldane [19], en étudiant (théoriquement) une chaîne de spin de Heisenberg antiferromagnétique remarque que, dans le cas du spin 1, la phase est gappée (i.e. a un gap : il existe un écart d'énergie entre les états fondamentaux et les premiers états excités) et qui n'a pas un ordre du à une brisure de symétrie. C'est le premier exemple de phase topologique bosonique protégée par la symétrie (*SPT phase* en anglais) qui se distingue d'une phase "triviale" (qui s'explique exclusivement par la théorie de la brisure de symétrie) par un invariant topologique (non nul) sans posséder d'intrication à longue portée et donc qui n'est pas un ordre topologique. C'est la phase de Haldane de spin 1. C'est un des exemples les plus simples de phase SPT à une dimension, conforme à la classification dont je discuterai au prochain chapitre. Puisque la classification ne peut pas caractériser en détails les phases qu'elle prédit, il faut l'illustrer d'exemples pour mieux la comprendre voire la rendre utile pour des applications futures. L'étude de la phase de Haldane et ses généralisations s'inscrit exactement dans cette dynamique qui est aussi celle de la présente thèse.

Je présenterai donc cette phase de Haldane plus en détail dans le chapitre 1, ainsi que les phases SPT plus généralement. J'y discuterai également des résultats qui apparaissent dans la littérature qui peuvent guider l'intuition vers une généralisation de ces phases, à commencer par la conjecture de Haldane. Je discuterai de la classification des SPT qui prend en compte cette phase, puis des réalisations expérimentales existantes et à venir de celle-ci. Je présenterai en détails dans le chapitre 2 des protocoles expérimentaux pour obtenir des généralisations de cette phase de Haldane qui utilisent la symétrie  $SU(N)$  par l'intermédiaire d'alcalino-terreux dans un réseau optique, là où la phase paradigmatique n'utilise que  $SU(2)$ . Je justifierai le choix de l'un d'entre eux, le modèle sur réseau de double-puits sur lequel je me concentre dans le reste du manuscrit. Le chapitre 3 étudiera ce même modèle dans le régime de paramètres expérimentaux où les interactions entre particules sont faibles par rapport à l'effet tunnel entre les sites du réseau. Dans ce régime, il est possible de formaliser le problème sous la forme d'une théorie des champs grâce à laquelle il est possible de tracer un premier diagramme de phase (un pour chaque  $N$ ). Celui-ci est ensuite comparé avec une étude numérique du même modèle de double-puits initial. Le chapitre 4 étudie lui aussi le même modèle, mais dans le régime inverse de l'approche précédente. Cette étude permet à son tour de tracer un diagramme de phase (pour chaque  $N$ ) dans lequel figure une phase topologique de Haldane discutée par la suite, dont la phase "chirale Haldane". Dans le cas  $N = 3$ , cas où apparaît cette phase, un modèle effectif non standard intervient : le modèle dit d'échelle de spin dans la représentation  $\mathbf{3} - \bar{\mathbf{3}}$  (de  $SU(3)$ ). Celui-ci, et ses généralisations, sont examinés de manière largement indépendante au modèle de double-puits dans le chapitre 5.

## **Introduction**

---

*Ainsi, le chapitre 1, et la première partie du chapitre 2 constitue une courte revue de quelques résultats de la littérature utiles aux problématiques de la thèse et peuvent être passés par le lecteur déjà familier avec eux, tandis le reste du chapitre 2 jusqu'au chapitre 5 est véritablement le travail réalisé pendant mes trois années de thèse.*

# 1 Le cas $N = 2$ et la phase de Haldane

La chaîne (géométrie la plus simple à 1D) de spins (quantique) la plus simple est la chaîne de spins 1/2. Elle est particulièrement étudiée car le spin 1/2 est la caractéristique principale (avec la charge et la masse) des électrons, particules élémentaires considérées en priorité pour comprendre les propriétés électroniques des matériaux (d'où leur importance en matière condensée), mais aussi pour modéliser des systèmes à deux niveaux par site. Cette chaîne peut par exemple être obtenue en forçant la localisation d'un électron sur chaque site d'un réseau cristallin unidimensionnel, c'est-à-dire en augmentant suffisamment la barrière énergétique entre sites pour restreindre la délocalisation de l'électron ou lorsque les répulsions entre électrons sont trop fortes [20] (phase isolante de Mott). Le modèle de base de chaîne de spins le plus important pour cette thèse est le modèle dit de "Heisenberg" car il ne fait intervenir que l'interaction du même nom, schématiquement représenté Fig. 1.1.

Son hamiltonien  $H$  s'écrit :

$$H = J \sum_i \vec{S}_i \vec{S}_{i+1}, \quad (1.1)$$

où  $J$  est (l'amplitude de) couplage de l'interaction spin-spin de Heisenberg de plus proche voisin aussi appelée intégrale d'échange ou "superéchange",  $i$  est l'indice de site, variant de 1 à  $L$  dans le cas d'une chaîne de longueur  $L$ , où  $L \rightarrow \infty$  si la chaîne est infinie (i.e. la limite thermodynamique à  $T = 0$  K, température systématiquement retenue dans la suite, sauf mention contraire).  $\vec{S}_i$  est (l'opérateur de) spin au site  $i$ . Lorsque la description est faite en

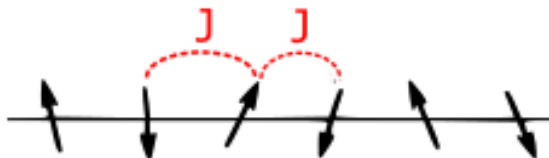


Figure 1.1 – Représentation schématique d'une chaîne de spins de Heisenberg. L'interaction spin-spin  $J$  de plus proche voisin est homogène.

mécanique classique, et lorsque  $J > 0$  on s'attend à ce que les spins s'anti-alignent. On parle alors d'interaction antiferromagnétique.

Dans cette vision classique, le spin est typiquement représenté comme un vecteur (un moment cinétique) dans l'espace à trois dimensions (espace dans lequel vit le vecteur, et non la chaîne qui reste unidimensionnelle). Alors, puisque le hamiltonien (et, par extension immédiate ici, l'action) est parfaitement isotrope dans cet espace en chaque site (aucune direction n'est privilégiée), on dit qu'il est invariant par toutes les rotations à trois dimensions ou, en terme plus mathématiques, invariant par le groupe  $O(3)$ . Pour un spin, à cause de ses propriétés magnétiques particulières, il faut se restreindre à un sous-groupe seulement du précédent :  $SO(3)$ . L'histoire continue en réalité puisque, lorsqu'on parle de spin  $1/2$ , il ne faut plus que considérer la première représentation (irréductible) projective de ce groupe<sup>1</sup>. L'absence d'un axe prédéfini privilégié dûe à cette symétrie devient alors une source de difficulté pour la résolution analytique du problème comparé à la chaîne d'Ising [21]. Mais c'est déjà en 1931 [22] que Bethe trouve la solution de ce problème grâce à son « ansatz » pour la chaîne de spins  $1/2$  seulement, plus tard étendue pour toutes les chaînes dans la représentation fondamentale de  $SU(N)$  [23]. Il prédit que l'état fondamental est un état singulet, i.e. non dégénéré, décrit par le nombre quantique  $S = 0$ , c'est-à-dire que le spin total de toute la chaîne est nul. L'état fondamental d'un tel système est donc non-magnétique, en effet sans direction privilégiée pour les spins pour ce hamiltonien isotrope. Ce résultat perdure pour les spins entiers (aux éventuels états de bords près auxquels on reviendra). Pour les spins demi-entiers cependant, la différence d'énergie entre l'état fondamental et les premiers états excités (le "gap") est essentiellement nulle (rigoureusement à la limite thermodynamique) et les fluctuations classiques (à température non nulle) et quantiques rendent effectivement le spectre (de basse énergie) continu (et donc sans gap et par extension, désordonné et compatible avec le théorème de Mermin-Wagner). C'est une phase critique. Lorsqu'on regarde un spin 1 (ou plus généralement un spin entier) par contre, on a cette fois-ci l'apparition d'un gap, observé en 1982 par des composées "NENP" [24] et expliqué un an plus tard [25] par Haldane dans le cadre de sa "conjecture". Lorsque le spin entier est en plus impair, la phase attendue sera topologique, comme la phase de Haldane de spin 1.

---

<sup>1</sup>ou alternativement la représentation fondamentale de son groupe de recouvrement universel :  $SU(2)$ . Une discussion plus élaborée sur la notion de spin est proposée Sec. 4.1.1.

## 1.1 La chaîne de spins 1/2

Cette "conjecture" englobe en fait tous les spins entiers et demi-entiers, et afin de bien la comprendre, quitte à différer légèrement du cheminement historique, il est intéressant de regarder les cas les plus simples pour chacun des deux cas. Le cas du spin 1/2 est ici détaillé.

### 1.1.1 Les états fondamentaux de la chaîne d'Ising : états de Néel

Il est alors utile de partir de la chaîne anisotrope la plus extrême d'Ising [26] :

$$H = J \sum_i S_i^z S_{i+1}^z. \quad (1.2)$$

où, cette fois-ci  $S_i^z$  est seulement la composante selon un axe arbitraire  $z$  de l'opérateur de spin présent dans l'Eq. 1.1. La diagonalisation, et donc, la résolution d'un tel hamiltonien est immédiate : l'espace de Hilbert en chaque site  $i$ ,  $\mathcal{H}_i$ , est généré par les états  $\{|\uparrow_i\rangle, |\downarrow_i\rangle\}$ , appelés les états de "spin"  $\pm 1/2$  car ils sont états propres de l'opérateur de spin suivant l'axe  $z$  (conventionnellement, avec dorénavant  $\hbar = 1$ ) :

$$S_i^z |\uparrow_i\rangle = \frac{1}{2} |\uparrow_i\rangle, \quad S_i^z |\downarrow_i\rangle = -\frac{1}{2} |\downarrow_i\rangle. \quad (1.3)$$

Dans cette base, la représentation matricielle de  $S_i^z$  est donnée par la matrice de Pauli selon  $z$  usuelle (cf Ann. A.2 pour l'expression des matrices de Pauli), au facteur 1/2 près. L'espace de Hilbert total  $\mathcal{H}$  étant le produit tensoriel des espaces de Hilbert de site,  $\mathcal{H} = \otimes_i \mathcal{H}_i$ , celui-ci est engendré par la base  $\otimes_i |a_i\rangle$ , où  $a_i = \uparrow_i$  ou  $\downarrow_i$ , qui diagonalise le hamiltonien 1.2 d'après l'Eq. 1.3. En particulier, une base du sous-espace propre fondamental est alors donnée par les deux états de Néel :

$$|\dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots\rangle \quad (1.4a)$$

$$|\dots \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots\rangle \quad (1.4b)$$

où un état est obtenu en partant de l'autre en changeant tous les spins pointés vers le haut (spin *up*) en spins pointés vers le bas (spin *down*) et vice-versa. On dit qu'on fait une rotation globale de  $\pi$  (à une phase globale près) car, dans l'espace d'un spin individuel, une telle rotation autour de n'importe quel axe dans le plan  $Oxy$  (prenons l'axe  $Ox$ ) s'écrit<sup>2</sup>:

$$R_x(\pi) = e^{-i\frac{\pi}{2}\sigma^x} = -i\sigma^x \quad \text{telle que} \quad R_x(\pi)|\uparrow_i\rangle = -i|\downarrow_i\rangle \quad \text{et} \quad R_x(\pi)|\downarrow_i\rangle = -i|\uparrow_i\rangle. \quad (1.5)$$

L'énergie de ces états de Néel est rigoureusement  $-(L-1)J/4$ , mais une telle énergie n'est que peu utilisable dans la limite thermodynamique. Ainsi, souvent, l'énergie du fondamental est

<sup>2</sup>Pour amorcer la discussion sur les symétries, abordée dès le Chap. 2, on peut noter que c'est précisément parce que le hamiltonien d'Ising 1.2 n'est pas invariant par ces rotations (il n'est pas SU(2) invariant) que son analyse est plus aisée que le hamiltonien d'Heisenberg. Il reste invariant vis-à-vis de toutes les rotations autour de l'axe  $z$  ( $R_z(\theta)$ ) : il est U(1) invariant.

mise à 0 en rajoutant un off-set global (moins l'énergie du fondamental). L'état fondamental est alors nommé le vide, noté  $|0\rangle$ . Dans le cas présent, les deux états de Néel sont des vides possibles et bien distincts : il est impossible sans en changer l'énergie de passer continument (adiabatiquement, i.e. par des perturbations locales et sans transitions de phase) de l'un des états à l'autre.

### 1.1.2 Soliton et magnon

Le soliton est précisément l'excitation élémentaire du système anisotrope qui autorise le passage d'un état de Néel à l'autre. Il prend la forme d'une paroi magnétique à l'intérieur de laquelle les spins subissent une rotation de  $\pi$ . Classiquement, on la représente parfois de la manière suivante :

...  $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow$  /  $\swarrow\searrow$   $\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$  ...

Ces parois sont très localisées : elles ne s'étendent que sur un ou quelques sites du réseau. Dans le cas du modèle d'Ising, le soliton est encore plus simple et s'écrit :

$$|\dots \uparrow\downarrow \color{red}{\uparrow\uparrow} \downarrow\uparrow \dots\rangle \quad \text{de moment magnétique } S^z = +1/2, \text{ ou} \quad (1.6a)$$

$$|\dots \uparrow\downarrow \color{red}{\downarrow\downarrow} \uparrow\downarrow \dots\rangle \quad \text{de moment magnétique } S^z = -1/2. \quad (1.6b)$$

Il existe donc deux types de solitons élémentaires ( $L - 1$  solitons par type) qui acquièrent un moment magnétique total (donc en valeur absolue) de  $1/2$  par rapport aux états de Néel globalement amagnétique (seulement pour la chaîne infinie ou avec un nombre pair de site rigoureusement parlant). Ils sont donc plus facilement visibles expérimentalement que l'état fondamental amagnétique, et on peut différencier les deux types avec un champ magnétique (selon  $z$ ). La différence d'énergie entre ces excitations et le fondamental est  $J/2$  ce qui en fait une phase gappée, on parlera ici de phase de Néel, ou parfois, par abus de langage, d'ordre de Néel, même si, à  $1(+1)$  dimension, l'ordre n'est qu'à courte portée. On n'est pas ici en contradiction avec le théorème de Mermin-Wagner qui interdit la brisure spontanée d'une symétrie continue car seule la symétrie des translations discrètes d'un site à l'autre est brisée pour ne conserver que les translations tous les deux sites. En effet, parmi les excitations à plus hautes énergies, il existe des états à 2, 3 ou plus de solitons. On peut dès lors définir une longueur de corrélation  $\xi$  comme étant le nombre moyen de sites entre deux solitons, et donc obtenue par  $\xi = 1/n_s$  où  $n_s$  est la densité de soliton, soit le nombre total de soliton divisé par le nombre de site  $L$ . Naïvement, si le gap est suffisamment faible, les fluctuations quantiques (voire thermique à  $T > 0$ ) vont rendre cette longueur de corrélation finie. Un ordre à longue portée, i.e. une phase ordonnée usuelle à plus haute dimension, est alors impossible. On parle quand même d'ordre à courte portée, sinon seulement de phase désordonnée, car les solitons sont sources de désordre ici statiques. Mais pour ce modèle, les fluctuations ne permettent pas à elles seules d'expliquer l'apparition d'un de ces solitons statiques en partant d'un état de Néel, car celui-ci s'obtient par rotation de  $\pi$  de toute une moitié de la chaîne, ce qui rend la

transition directe impossible (même avec n'importe quelle légère variation du hamiltonien d'Ising pour des interactions à courtes portées, exception faite des solitons créés aux bords ou au niveau d'une impureté exclus de la présente discussion). L'autre type d'excitation existante, le magnon, est, elle, envisageable. Elle ressemble à :

$$|\dots \uparrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow \dots\rangle \quad \text{de moment magnétique } S^z = +1, \text{ ou} \quad (1.7a)$$

$$|\dots \uparrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \dots\rangle \quad \text{de moment magnétique } S^z = -1, \quad (1.7b)$$

et ne correspond cette fois-ci qu'au retournement d'un seul spin sur toute la chaîne. En conséquence, l'apparition d'un magnon entraîne le changement du moment magnétique total de 1, pour un coût énergétique deux fois plus important que le soliton précédent.

Cette notion de soliton est cruciale pour comprendre l'approche de Haldane à venir, mais doit d'abord être étendue au cas plus général du hamiltonien de Villain (1975) [27, 28], dont la chaîne  $XXZ$  (au champ magnétique près) :

$$H = J \sum_i [S_i^z S_{i+1}^z + \varepsilon (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y)], \quad (1.8)$$

où  $\varepsilon$  varie pour l'instant entre 0 pour redonner le hamiltonien d'Ising 1.2 et 1 pour retrouver le hamiltonien de Heisenberg 1.1. Lorsque  $\varepsilon > 1$ , la chaîne dispose alors d'un plan facile d'aimantation : une forte anisotropie dans le plan formé par les directions  $x$  et  $y$  va tendre à orienter les spins dans ce plan et effacer la composante suivant  $z$  (rigoureusement atteint lorsque  $\varepsilon \rightarrow \infty$ , dit hamiltonien XY qui reste dans la même phase). Dans le cas où  $\varepsilon \ll 1$  (dit d'axe facile d'aimantation), le hamiltonien 1.8 devient une perturbation de l'Eq. 1.2, sans brisure de la symétrie  $U(1)$  et les résultats précédents, à savoir les aspects des états décrits et leurs dégénérescences, restent valides. Les deux types d'excitation restent les solitons et les magnons, ces derniers appelées des ondes de spins dans ce contexte. L'effet de la perturbation sera de "mélanger" un même type d'excitation : plutôt que de voir autant de solitons, ou magnons qu'il y a de site, il s'agit maintenant de les écrire dans l'espace de Fourier pour constater que la perturbation y induit une dispersion. On peut le comprendre par le raisonnement perturbatif suivant, au premier ordre en  $\varepsilon$ . Soit  $S_i^+$  et  $S_i^-$  les opérateurs qui respectivement transforme le spin *down* en  $i$  en spin *up* et le spin *up* en  $i$  en spin *down* :

$$S^+ = S^x + iS^y, \quad S^- = S^x - iS^y \quad (1.9)$$

On peut alors écrire les deux types de solitons élémentaires 1.6 (notés  $|s_i(N_j)\rangle$ ) de la manière suivantes :

$$|N_1\rangle = |\uparrow \downarrow \uparrow \dots \uparrow \downarrow\rangle \quad (1.10a)$$

$$|N_2\rangle = |\downarrow \uparrow \downarrow \dots \downarrow \uparrow\rangle \quad (1.10b)$$

$$|s_i(N_1)\rangle = S_i^{(-)i} \dots S_2^+ S_1^- |N_1\rangle \quad (1.10c)$$

$$|s_i(N_2)\rangle = S_i^{(-)i+1} \dots S_2^- S_1^+ |N_2\rangle, \quad (1.10d)$$



où  $i = 1 \dots L - 1$  (on retrouve les états de Néel  $|N_1\rangle$  et  $|N_2\rangle$  pour  $|s_0\rangle$  ou  $|s_N\rangle$ ). Ainsi,  $|s_i(N_1)\rangle$  est le soliton qui décrit un état de Néel (1) à droite d'un état de Néel (2) séparé par une paroi située entre le site  $i$  et  $i + 1$ . On réécrit alors le hamiltonien 1.8 sous une forme plus adaptée aux solitons 1.10c et 1.10d :

$$H = J \sum_{i=1}^{L-1} \left[ \frac{\varepsilon}{2} \left( (\vec{S}_i + \vec{S}_{i+1})^2 - \vec{S}_i^2 - \vec{S}_{i+1}^2 \right) + (1 - \varepsilon) S_i^z S_{i+1}^z \right]. \quad (1.11)$$

Il est en effet utile de remarquer que :

$$|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} \right), \text{ si bien que } (\vec{S}_i + \vec{S}_{i+1})^2 |\uparrow_i \downarrow_{i+1}\rangle = |\uparrow_i \downarrow_{i+1}\rangle + |\downarrow_i \uparrow_{i+1}\rangle. \quad (1.12)$$

Ce terme en  $(\vec{S}_i + \vec{S}_{i+1})^2$  de l'Eq. 1.11 est le seul terme non diagonal dans la base 1.10c et 1.10d. On a par exemple :

$$(\vec{S}_i + \vec{S}_{i+1})^2 |N_1\rangle = |N_1\rangle + S_{i+1}^{(-)i+1} S_i^{(-)i} |N_1\rangle. \quad (1.13)$$

Ce terme tend donc à créer deux solitons en  $i - 1$  et  $i + 1$  (qui n'est pas, et ne peut pas devenir un magnon), plus haut en énergie que l'état de Néel initial (car l'état n'est plus dans le même sous espace propre). On va donc pouvoir le négliger au premier ordre en  $\varepsilon$  pour rester cohérent. Notons qu'au bord, seul un soliton est créé et suggère que, pour ce type de modèle, les solitons créés par fluctuation viennent d'abord du bord. On a donc :

$$H|N_1\rangle \simeq J \sum_{i=1}^{L-1} \left[ \frac{\varepsilon}{2} \left( 1 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right) + (1 - \varepsilon) \left( -\frac{1}{4} \right) \right] |N_1\rangle \quad (1.14a)$$

$$= -J \frac{L-1}{4} |N_1\rangle. \quad (1.14b)$$

Au premier ordre, l'énergie du fondamental reste donc la même, et il n'y a pas de couplage direct avec l'autre état de Néel. Les choses se compliquent pour les solitons élémentaires :

$$(\vec{S}_{i-1} + \vec{S}_i)^2 |s_i(N_1)\rangle = |s_i(N_1)\rangle + |s_{i-2}(N_1)\rangle \quad (1.15a)$$

$$(\vec{S}_i + \vec{S}_{i+1})^2 |s_i(N_1)\rangle = 2|s_i(N_1)\rangle \quad (1.15b)$$

$$(\vec{S}_{i+1} + \vec{S}_{i+2})^2 |s_i(N_1)\rangle = |s_i(N_1)\rangle + |s_{i+2}(N_1)\rangle. \quad (1.15c)$$

Les autres actions de l'opérateur spin total carré (ou Casimir quadratique) de deux sites consécutifs n'étant pas stables dans ce sous-espace (et donc négligeable à terme au premier ordre). Ainsi :

$$H|s_i(N_1)\rangle \simeq \left( -J \frac{L-1}{4} + \frac{J}{2} \right) |s_i(N_1)\rangle + J \frac{\varepsilon}{2} (|s_{i-2}(N_1)\rangle + |s_{i+2}(N_1)\rangle), \quad (1.16)$$

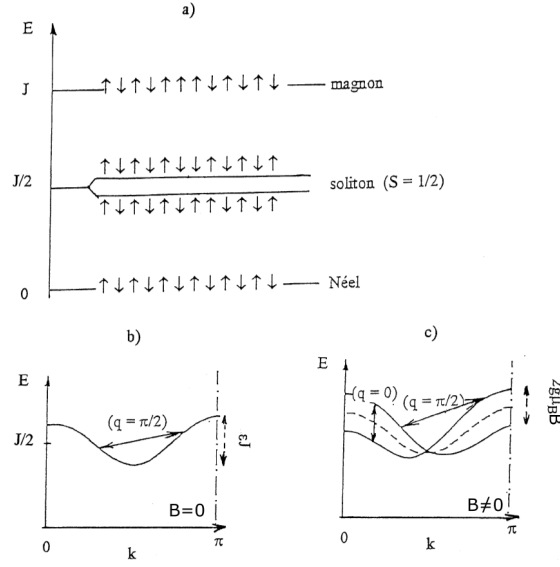


Figure 1.2 – (a) Spectre et nature des différents états propres correspondants au hamiltonien  $XXZ$  pour une chaîne spin 1/2 et pour  $\varepsilon = 0$ . (b) Courbe de dispersion (énergie  $E$  en fonction du vecteur d'onde  $k$ , pour  $\varepsilon \neq 0$ ) de l'état de soliton  $S = 1/2$  en champ magnétique  $B$  nul. (c) Courbes de dispersion des états de soliton en présence d'un champ magnétique  $B$  transverse. Les doubles flèches dans les figures (b) et (c) illustrent des transitions  $\Delta m = 1$ ,  $m$  le moment magnétique, entre états de soliton, associé à un transfert de vecteur d'onde  $q$  égal à 0 où  $\pi/2$ . Ce sont ce type de transfert qui sont ensuite observés dans les expériences. La figure est adaptée de [26] où le vecteur d'onde varie jusqu'à  $\pi$  seulement à cause des conditions aux limites périodiques (qui est donc le cas représenté ici en toute rigueur).

où chacun des nouveaux solitons qui figurent dans l'Eq. 1.16 n'apparaissent évidemment pas si  $i$  est trop proche d'un bord. On en déduit non seulement que les solitons restent de même type au cours du temps (et vont donc garder le même moment magnétique total) mais aussi que la perturbation va permettre aux solitons de bouger en sautant deux sites (et pas un seul, car il y aurait alors soit changement du moment magnétique selon  $z$  d'une unité, impossible car tous les  $S_i^z$  commutent, soit changement de type de soliton qui retournerait la moitié de la chaîne). Il est alors utile de passer les solitons 1.10c et 1.10d en représentations de Fourier :

$$|\tilde{s}_k(N_1)\rangle = \frac{1}{\sqrt{L-1}} \sum_{j=1}^{L-1} e^{-ijk} |s_j(N_1)\rangle, \quad \text{où } k = \frac{2\pi n}{L-1}, \quad \text{avec } n = 1 \dots L-1, \quad (1.17)$$

de même pour l'autre type. On a alors :

$$H|\tilde{s}_k(N_1)\rangle \simeq \left( -J \frac{L-1}{4} + \frac{J}{2} + J\varepsilon \cos(2k) \right) |\tilde{s}_k(N_1)\rangle + O\left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right), \quad (1.18)$$

où le  $O(\frac{1}{\sqrt{L}})$  vient une fois encore des termes aux bords et n'est pas important pour comprendre la relation de dispersion, même s'ils expliquent la durée de vie finie du soliton qui peut être détruit une fois au bord. On en déduit la Fig 1.2b). La dégénérescence entre les deux types de

solitons pour tous  $k$  est levée par effet Zeeman lorsqu'on introduit un petit champ magnétique selon ou perpendiculaire à  $z$ . On obtient alors la Fig 1.2c) (dans le cas perpendiculaire). C'est fort de ces considérations que ces solitons ont été mis en évidence expérimentalement [29] : l'analogie de l'effet "dyons" des hautes énergies [30, 31] pour la matière condensée.

### 1.1.3 Phase critique

Tant que  $\varepsilon < 1$  et sans champ magnétique, l'état fondamental décrit toujours la phase (gap-ée) de Néel. Lorsque l'anisotropie est résolue,  $\varepsilon = 1$ , le gap se ferme, comme suggéré par la Fig. 1.2b) et rigoureusement confirmé par résolution exacte. La phase attendue devient de fait critique. C'est-à-dire qu'une excitation ne coûte pas d'énergie au système, alors dominé par les fluctuations, au moins quantiques ; plus rigoureusement, c'est lorsque le ou les états fondamentaux ne sont pas séparés par un gap d'un continuum dans la limite thermodynamique. Pour comprendre cette notion de phase critique avec un autre exemple de chaîne de spin résolu analytiquement sans utiliser l'Ansatz de Bethe, il suffit de regarder la limite  $\varepsilon \rightarrow \infty$  du modèle XXZ, en suivant largement par exemple la méthode présentée dans le chapitre 6 de [32], originellement trouvée par Jordan et Wigner [33]. Elle consiste à considérer l'état spin *up* comme un état à une particule, et l'état spin *down* comme un état sans particule. Puisqu'un maximum d'une de ces particules fictives par site seulement est possible, il est utile de les considérer comme des fermions sans spin. Enfin, pour assurer les bonnes relations de commutations des opérateurs de spin, il est nécessaire d'attacher en plus une chaîne d'opérateurs à chaque fermion. On a alors le *mapping* suivant (donné pour une chaîne de spins infinie) [32] :

$$S_i^+ \rightarrow (-1)^i c_i^\dagger e^{i\pi \sum_{j=-\infty}^{i-1} c_j^\dagger c_j}, \quad (1.19a)$$

$$S_i^z \rightarrow c_i^\dagger c_i - \frac{1}{2}, \quad (1.19b)$$

où  $c_i^\dagger$  est l'opérateur de création du fermion sans spin fictif (ou effectif) au site  $i$ . Le facteur  $(-1)^i$  n'est ici présent que pour obtenir la forme canonique suivante du hamiltonien 1.8 dans les nouvelles variables :

$$H = -t \sum_i \left[ c_{i+1}^\dagger c_i + h.c. \right] + V \sum_i \left( c_{i+1}^\dagger c_{i+1} - \frac{1}{2} \right) \left( c_i^\dagger c_i - \frac{1}{2} \right), \quad (1.20)$$

avec  $t = J\varepsilon/2$ ,  $V = J$  et *h.c.* signifie "hermitien conjugué". Le hamiltonien 1.20 décrit ainsi une chaîne de fermions sans spin qui sautent (par effet tunnel) d'un site à l'autre avec une amplitude (de *hopping*)  $t$ , et tendent à alterner les sites occupés et vides par une répulsion de sites (plus proche) voisins dans le même état lorsque  $V > 0$ . On peut noter qu'un éventuel champ magnétique devient un potentiel chimique dans les nouvelles variables :

$$-h \sum_i S_i^z \rightarrow -h \sum_i \left( c_i^\dagger c_i - \frac{1}{2} \right), \quad (1.21)$$

si bien que lorsque celui-ci est nul, le champ magnétique nul correspond au demi-remplissage de la chaîne de fermion,  $\langle n_i \rangle = 1/2$ . On retrouve à cet égard la symétrie particule-trou correspondant à la transformation

$$c_i \rightarrow i(-1)^i \tilde{c}_i^\dagger, \quad (1.22)$$

qui laisse le hamiltonien 1.20 invariant. Dans le cas du modèle XY,  $V = 0$ . Le hamiltonien 1.20 se diagonalise immédiatement en passant dans la représentation de Fourier pour obtenir (dans les conditions aux limites périodiques) :

$$H_{XY} = \sum_{k=-\pi/a_0}^{\pi/a_0} \varepsilon_k c_k^\dagger c_k \quad \text{avec} \quad (1.23)$$

$$\varepsilon_k = -2t \cos(ka_0), \quad (1.24)$$

où les  $k$  sont les moments des particules (ou trous) créés et pouvant prendre n'importe quelle valeur entre  $-\pi/a_0$  et  $\pi/a_0$  à la limite thermodynamique.  $a_0$  est l'espace entre les sites, naturellement d'une unité dans notre cas. Puisqu'il s'agit de fermions, le principe de Pauli nous dit que chaque niveau d'énergie va être rempli une et une seule fois par énergie croissante (sans autre statistique à  $T = 0$  et sans fluctuations quantiques) jusqu'à avoir le bon nombre donné par le remplissage. L'énergie du plus haut niveau occupé est alors appelé énergie de Fermi (si la "bande" n'est pas complètement remplie, et puisque c'est la seule présente). Dans le cas du demi-remplissage,  $k_F = \pi/2$  (le nombre d'onde de Fermi), c'est à dire que tous les niveaux sont remplis de  $-k_F$  à  $k_F$ . Une excitation élémentaire consiste alors à remplir un trou ou à vider une particule d'énergie proche de cette énergie de Fermi, graphiquement, autour d'un des deux points de Fermi<sup>3</sup>. Puisque de telles excitations élémentaires coûtent une énergie arbitrairement faible dans la limite thermodynamique, on obtient bien une phase critique, sans gap. Les corrélations spin-spin décroissent en loi de puissance :

$$\langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_0 \rangle \approx (-1)^n |n|^{-\eta}, \quad (1.25)$$

où  $\eta$  est l'exposant de Tomonaga-Luttinger et donc pour lesquelles il n'est pas possible de définir une longueur de corrélation (souvent considérée comme infinie, car la décroissance en loi de puissance est toujours plus lente que la décroissance exponentielle pour laquelle la longueur est usuellement définie). Il est possible d'étudier le reste de la phase perturbativement (en  $V$ ) et trouver un résultat similaire en passant en théorie des champs, qu'on bosonise ensuite. Ces deux techniques feront l'objet du Chap. 3 et donc omis ici. Pour le traitement complet de ce problème, le lecteur est renvoyé au chapitre 6 de [32].

Une manière classique (et donc incomplète) de comprendre pourquoi la phase devient ici critique par rapport à la chaîne d'Ising est de considérer que chaque spin peut désormais prendre n'importe quelle orientation dans tous le plan ( $Oxy$ ), alors qu'auparavant, il était

<sup>3</sup>cette étape est d'ailleurs systématiquement utilisée pour les limites continues telles que présenté Chap. 3.

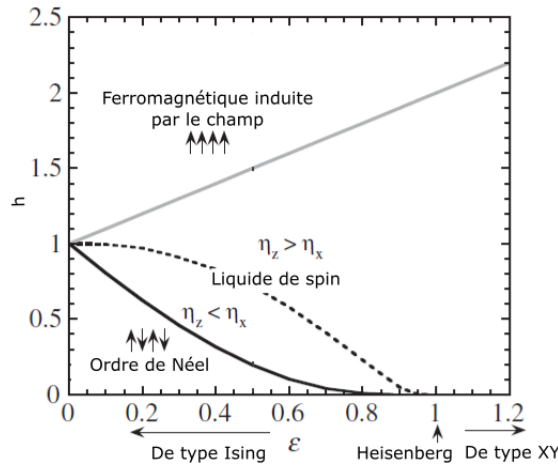


Figure 1.3 – Diagramme de phase du modèle XXZ en fonction de l'anisotropie  $\varepsilon$  et du champ magnétique  $h$ .  $\eta_x$  et  $\eta_z$  sont les exposants de Luttinger des fonctions de corrélations spin-spin des composantes selon  $x$  et  $z$  respectivement. Le modèle de Heisenberg est le point de transition quantique entre l'ordre de Néel et le liquide de spin de type XY. Figure adaptée de [34]

astreint à l'axe ( $Oz$ ). Cet effet est naturellement d'autant plus exacerbé au point (vis-à-vis de  $\varepsilon$ ) où toute la symétrie  $SO(3)$  est régénérée, c'est-à-dire lorsque le hamiltonien est celui de Heisenberg 1.1, point de transition de phase quantique [32] entre la phase de Néel et la phase XY, comme présenté sur la Fig. 1.3. La phase en ce point sera donc elle aussi critique.

#### 1.1.4 Mot sur l'intégrabilité

Une manière définitive de statuer sur la chaîne de spins  $1/2$  de Heisenberg serait bien sûr de complètement résoudre le problème de manière analytique et rigoureuse i.e. sans approximation. Cela revient essentiellement à explicitement diagonaliser le hamiltonien du modèle, i.e. trouver son spectre et une base des vecteurs propres correspondante. Les quantités dites "physiques" (capacité thermique, conductivité électrique, plus généralement toutes fonctions de corrélations incluant les valeurs moyennes d'observables) peuvent souvent être facilement déduites après coup (au moins numériquement, sans utiliser de "simulation"). On dit souvent que le modèle est alors intégrable. C'est effectivement le cas pour le modèle de Heisenberg résolu en utilisant la première occurrence historique de l'ansatz de Bethe [22], fondement de tout un pan de la physique actuelle : l'étude des systèmes intégrables. Bien que sa réalisation dans les faits soit particulièrement laborieuse et qu'il soit difficile d'associer une interprétation physique à chaque étape, raisons pour lesquelles il n'est présenté que brièvement dans la suite et n'a été utilisé qu'en dernier recours dans les parties précédentes, l'idée générale reste facile d'accès. Puisque certains de ses résultats sont utilisés dans cette thèse, les étapes importantes du raisonnement original sont résumés ici.

1. Il s'agit tout d'abord, comme dans le paragraphe 1.1.2, de constater qu'une base de l'espace

de Hilbert est constituée de  $2^L$  éléments. On choisit alors la base où tous les spins sont alignés vers la gauche <sup>4</sup> mis à part  $r$  spins pointés vers la droite, dont on note les positions sur la chaîne. Même si cette base ne diagonalise pas complètement le hamiltonien, puisque celui-ci commute avec le spin total de toute la chaîne ( $\vec{S}^2 = (\sum_i \vec{S}_i)^2$ ) et le spin orienté global selon l'axe de la chaîne ( $S_{\text{glob}}^x = \sum_i S_i^x$ ), chaque sous-espace généré par les états à  $r$  spins vers la droite est stable par action du hamiltonien, le diagonalisant par bloc. Bethe considère alors un élément de ce sous-espace à  $r$  spins vers la droite (i.e. combinaison linéaire des précédents états de bases du sous-espace) qui diagonalise le hamiltonien.

2. Le hamiltonien s'avère être essentiellement nul dans chacun de ces sous-espaces : pour un sous-espace donné, la diagonale ne dépend que du nombre de paires de spins voisins de même sens et des paramètres du problème tandis que les termes hors diagonaux ne couplent que les états identiques à une permutation de spin opposé près (comme le montrait déjà l'Eq. 1.12). Il déduit ainsi un set d'équations sur les coefficients de la combinaison linéaire de l'état propre générique d'un sous-espace.

3. Il résout les cas "relativement" simples  $r = 1$  et  $r = 2$ .

4. Il propose alors une possible expression des coefficients pour le cas général, son "ansatz". Celle-ci fait intervenir des paramètres liés au modèle de manière non triviale aux données initiales la rendant peu explicite et utile pour les raisonnements phénoménologiques précédents. Il faut d'ailleurs injecter cet ansatz dans les équations de l'étape 2 pour obtenir de nouvelles équations sur ces nouveaux paramètres. Celles-ci peuvent être résolues par disjonction de nombreux cas. C'est à cette étape que se trouve l'essentiel de la difficulté technique.

5. En comptant le nombre de solutions totales, toutes linéairement indépendantes, il s'aperçoit qu'il en obtient  $2^L$  comme prévu, et s'assure ainsi d'avoir une base complète qui diagonalise le hamiltonien de Heisenberg.

On comprend dès lors pourquoi il est difficile d'utiliser les résultats obtenus directement ; ils nécessitent systématiquement une disjonction de cas, numériquement envisageable. On retiendra cependant que la relation de dispersion de certaines bandes, dont la fondamentale, est en  $-\cos(k)$  où  $k$  est le nombre d'onde. On retrouve le résultat suggéré par la Fig. 1.2 dans le cas où  $\varepsilon = 1$  (le pas du réseau est pris à 1). On retrouve aussi les fonctions de corrélations mentionnées plus hauts 1.25, avec l'expression exacte des facteurs de Luttinger.

On peut noter plus généralement que tout le modèle  $XXZ$  est aussi intégrable [35, 36, 37], de même que la chaîne de Heisenberg avec la symétrie  $SU(N)$ ,  $N$  quelconque, mais seulement dans la représentation fondamentale [23] (i.e. la généralisation des spins 1/2 pour  $SU(N)$ ). Dans tous ces cas, la phase attendue est sans gap (le cas  $SU(3)$  revient en particulier à un modèle de Sutherland, intégrable par Ansatz de Bethe [23]). Pour d'autres représentations de groupe,  $SU(2)$  inclus, une telle solution exacte n'existe pas. C'est en particulier le cas pour la

---

<sup>4</sup>Détail historique qui s'explique en considérant que, sans champ magnétique, si axe privilégié il y a, il sera vraisemblablement selon la chaîne. Dans cette convention,  $S^x$  est préférablement pris diagonal au lieu de  $S^z$ .

## Chapitre 1. Le cas $N = 2$ et la phase de Haldane

---

chaîne (de Heisenberg) de spin 1, où l'exemple paradigmatique de phase topologique à une dimension apparaît : la phase de Haldane.

## 1.2 La chaîne de spins 1

La chaîne de spins d'Heisenberg de spin 1 est le cas le plus simple d'une chaîne de spins entier. Elle n'en est pas moins intéressante : elle est conforme à la conjecture de Haldane puisqu'elle est gappée (et donc non critique contrairement à la chaîne précédente). Cet "ordre" (abus de langage car à courte portée seulement) ne vient pas d'une brisure spontanée de la (seule) symétrie continue  $SU(2)$  de la chaîne (impossible d'après le théorème de Mermin-Wagner) ni de la brisure d'une quelconque symétrie discrète (telle que la symétrie de translation d'un site à l'autre). On atteint bel et bien une phase qui va au delà du paradigme de Ginzburg-Landau, à savoir, la phase de Haldane. Le modèle n'est cependant pas intégrable, et une caractérisation analytique de ses propriétés ou de son état fondamental est dès lors plus indirecte.

### 1.2.1 Phase gappée

Il est utile de débiter comme dans la section 1.1.2 afin de comprendre la structure du *bulk* (i.e. la partie loin des éventuels bords) de la phase correspondante, et d'introduire la discussion amorcée par Haldane en 1981 [19]. Il faut alors repartir du hamiltonien d'Ising 1.2, mais cette fois-ci non pas dans la représentation fondamentale de  $SU(2)$  (dont une base est formée des deux spins  $1/2$ ) mais dans la représentation (linéaire, i.e. non projective) fondamentale de  $SO(3)$ <sup>5</sup>. Dans cette représentation :

$$S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.26)$$

Les états vecteurs propres de cet opérateur constituent le triplet de spin 1 noté  $\{|1\rangle, |-1\rangle, |0\rangle\}$  étant donnée les valeurs propres correspondantes. On en déduit immédiatement que les deux états de Néel sont à nouveau les états fondamentaux :

$$|N_1\rangle = |1 - 11 - 1\dots\rangle \quad (1.27a)$$

$$|N_2\rangle = |-11 - 11\dots\rangle \quad (1.27b)$$

d'énergie  $-(L-1)J$  chacun, qu'on fixe comme origine des énergies. On trouve cette fois-ci trois types de solitons pour les premières excitations d'énergies  $2J$  de la forme :

$$|s_\sigma\rangle = |\dots 1 - 11\sigma - 11\dots\rangle \quad \text{où } \sigma = \pm 1 \text{ ou } 0 \quad (1.28)$$

de moment magnétique selon l'axe  $z$   $S = \pm 1$  ou  $0$ . Juste au dessus, d'énergie  $3J$ , on ne trouve pas de magnons, mais un soliton de moment magnétique nul de la forme :

$$|s_{00}\rangle = |\dots 1 - 1100 - 11\dots\rangle \quad (1.29)$$

<sup>5</sup>ou "vraie représentation" dont le tableau d'Young a un nombre pair de boîtes, c.f. Sec. 4.1.1.



C'est seulement à l'énergie  $4J$ , qu'on retrouve les magnons :

$$|m_2\rangle = |\dots 1 - 1111 - 1\dots\rangle \quad (1.30a)$$

$$|m_{-2}\rangle = |\dots - 11 - 1 - 1 - 1 - 1\dots\rangle \quad (1.30b)$$

$$|m_1\rangle = |\dots 1 - 1101 - 1\dots\rangle \quad (1.30c)$$

$$|m_{-1}\rangle = |\dots - 11 - 10 - 1 - 1\dots\rangle \quad (1.30d)$$

$$|m_0\rangle = |\dots 1 - 11001 - 1\dots\rangle \quad (1.30e)$$

de moment magnétique selon l'axe :  $S^z = +2, -2, +1, -1$  et  $0$  respectivement. Ces magnons ont la même énergie que des états à deux solitons de moment magnétique axial individuel non nul, ainsi que le soliton de moment magnétique nul :

$$|s_{00}\rangle = |\dots 1 - 11000 - 11\dots\rangle \quad (1.31)$$

La phase est bien la phase de Néel gappée, et le même traitement que précédemment s'applique, à savoir considérer le hamiltonien XXZ 1.11 avec  $\varepsilon \ll 1$ . Une bonne base sur deux sites qui diagonalise à la fois le spin total (au carré) sur deux sites (aussi appelé, le Casimir quadratique)  $(\vec{S}_{i1} + \vec{S}_{i+1})^2$  et le moment selon  $z$  est donnée par (on omet les indices de site pour alléger l'écriture) :

$$|-1 - 1\rangle; |11\rangle; \frac{1}{\sqrt{2}} (|-10\rangle + |0 - 1\rangle); \frac{1}{\sqrt{2}} (|10\rangle + |01\rangle); \sqrt{\frac{2}{5}} \left( |-11\rangle + |1 - 1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |00\rangle \right),$$

de Casimir quadratique 6,

(1.32a)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|-10\rangle - |0 - 1\rangle); \frac{1}{\sqrt{2}} (|10\rangle - |01\rangle); \frac{1}{2} \left( |-11\rangle + |1 - 1\rangle - \sqrt{2} |00\rangle \right),$$

de Casimir quadratique 2,

(1.32b)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|-11\rangle - |1 - 1\rangle),$$

de Casimir quadratique 0.

(1.32c)

L'approche perturbative devient alors plus laborieuse que pour le spin  $1/2$ . Les résultats suivants sont néanmoins obtenus :

- Le terme perturbatif en  $\varepsilon$  tend à créer deux solitons  $|s_{\pm 1}\rangle$  de moment magnétique opposé, ou un soliton  $|s_0\rangle$  à partir des états de Néel, en dehors des bords ;
- La perturbation est inefficace pour les solitons  $|s_{\pm 1}\rangle$  qui auront ainsi une dispersion essentiellement plate comparée au soliton  $|s_0\rangle$ , comme montré par la Fig. 1.4. Ceci fait du soliton de moment magnétique nul l'état soliton de plus basse énergie.
- Ce dernier soliton sera toujours plus bas en énergie que tous les magnons (qui, pour la plupart, ont eux aussi une dispersion non plate).

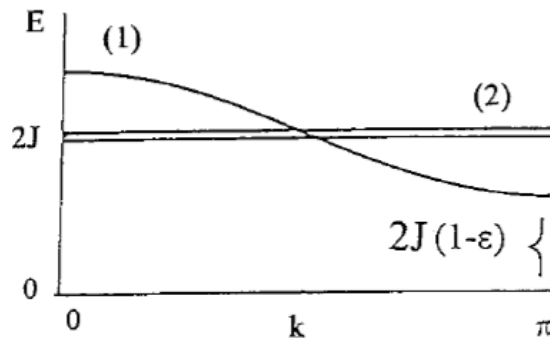


Figure 1.4 – Relation de dispersion des solitons de l'Eq. 1.28 dans l'espace de Fourier : (1) le soliton de moment magnétique nul, le plus bas en énergie pour les impulsions proches de  $\pi$ , (2) les solitons de moment magnétique  $\pm 1$ , essentiellement sans dispersion. Figure adaptée de [26].

Ainsi, si on extrapole le résultat de la Fig. 1.4 lorsque  $\varepsilon \rightarrow 1$ , les solitons  $|s_0\rangle$  perdent leur coût énergétique, et apparaissent de plus en plus sur la chaîne, réduisant ainsi la longueur de corrélation  $\xi = 1/n_s$ . Lorsque  $\varepsilon = 1$ , ceux-ci condensent [38], mais partiellement seulement : il y a une transition de phase, et à cause des fluctuations trop importantes à 1D, la longueur de corrélation sature à  $\xi = 6$  ou  $7$  [39]. L'état fondamental peut alors être compris en partant de l'état de Néel dans lequel se déplace un nombre  $Ln_s = L/\xi$  de solitons  $|s_0\rangle$ , où ponctuellement un soliton  $|s_{00}\rangle$  apparaît puis se sépare en deux solitons  $|s_0\rangle$  qui se déplaceront alors le long de la chaîne. Le processus inverse est également possible. L'état fondamental, unique (d'après le numérique, ou d'autres approches plus rigoureuses), est alors décrit par plusieurs configurations chacune constituant alors un instanton qui passe de l'un à l'autre par effet tunnel. C'est essentiellement l'approche de Tasaki [40, 41] représentée Fig. 1.5 qui dévoile "l'ordre caché" antiferromagnétique de la phase amagnétique. Les premières excitations, les magnons, peuvent alors être vus comme des solitons excités avec un moment magnétique total de 1 pour les plus élémentaires. Puisque l'état fondamental a un ordre à courte portée il est ainsi forcément séparé par un gap (dit "de Haldane") d'un tel triplet d'excitations, dont la relation de dispersion est donnée Fig. 1.6. Puisque ces derniers sont magnétiques, ce sont eux qui vont pouvoir les distinguer dans les expériences (cf Sec. 1.5.1).

Cette phase gappée, qui ne s'explique pas une brisure spontanée de symétrie continue ou discrète avec un ordre (de *bulk*) caché antiferromagnétique à courte portée et donc amagnétique à basse température est la célèbre phase de Haldane de spin 1. Elle constitue l'exemple paradigmatique de la phase topologique à une dimension qui ne s'explique pas par le paradigme de Ginzburg Landau. Cette phase ne décrit pas seulement le modèle d'Heisenberg 1.1 d'une chaîne de spins 1, mais s'étend à une zone plus vaste du diagramme de phase, même avec une légère anisotropie [42].

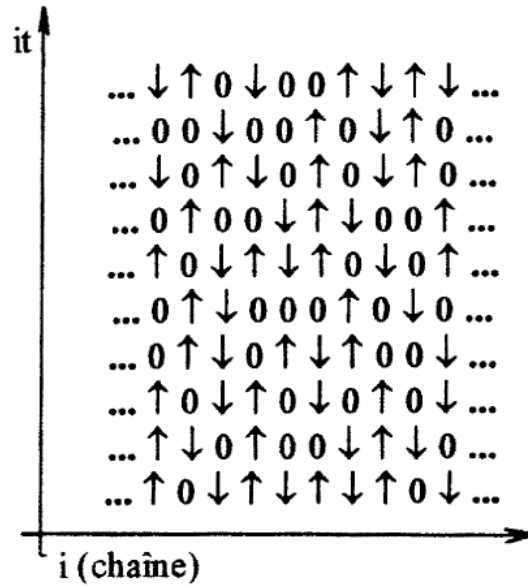


Figure 1.5 – Etat fondamental de la phase de Haldane vue comme une évolution dynamique d’instantons : des solitons  $|s_0\rangle$  dans un fond d’état de Néel où des solitons  $|s_{00}\rangle$  apparaissent ou disparaissent spontanément. Toutes les configurations n’ont pas la même probabilité. Il n’y a jamais deux spins *up* ou deux spins *down* (i.e. deux spins 1 ou  $-1$  respectivement) successifs, à un nombre arbitraire de 0 près entre les deux : c’est "l’ordre caché antiferromagnétique". Figure extraite de [26].

### 1.2.2 Construction AKLT, phase SPT

Bien que cette dernière approche a le mérite de donner une image intuitive de l’état fondamental, elle ne reste que phénoménologique. Pour un plus grand pouvoir prédictif, il suffirait de connaître explicitement l’état fondamental afin d’en connaître l’allure et d’en déduire des quantités utiles comme les corrélations à deux points, et de prouver qu’il est séparé d’un gap des premières excitations. C’est dans cet ordre d’idée que Affleck, Kennedy, Lieb et Tasaki (AKLT) [43, 44] décident de partir d’un état qui vérifie à la fois  $SU(2)$ , la symétrie de translation et qui peut bien sûr être obtenue en partant d’une chaîne de spins 1. Ils se souviennent en effet qu’un triplet spin 1 peut être obtenu à partir de deux spins  $1/2^6$ , potentiellement fictifs, qu’on symétrise. On peut alors appairier un des ces spins  $1/2$  avec un des deux autres du site précédent pour former un singulet (unique) de spin 0, tandis que le second peut être apparié avec un des spins du site suivant. Sans considérer les bords dans un premier temps (par exemple, dans le cas de conditions aux limites périodiques), on imagine alors que, par site, deux manières linéairement indépendantes de réaliser cet état est possible en fonction du spin qu’on choisit pour l’une ou l’autre des paires. La symétrisation sur site n’en permet en fait qu’une seule, combinaison des deux précédentes. On obtient alors un état comme représenté Fig. 1.7. Si on ne considère qu’une paire de site, alors une fois le singulet de spin nul réalisé

<sup>6</sup>cf Chap. 4 pour plus de détails.

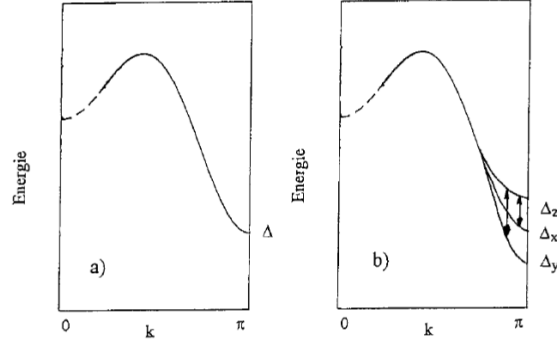


Figure 1.6 – Relation de dispersion du triplet de magnons dans le cas isotrope (a) (i.e. de Heisenberg) et dans le cas légèrement anisotrope (b) qui distingue chacun des trois états. Les premières expériences sur la phase de Haldane ont typiquement mesuré le gap entre le fondamental et ce triplet, ou l'énergie entre chaque triplet dans le cas anisotrope pour caractériser la phase. Figure extraite de [26].



Figure 1.7 – État VBS de spin 1. En chaque site (les points) se trouvent un spin un qui forme un singulet de spin avec ses deux plus proches voisins, d'où le nom de solide de valence : les singulets suivent les liaisons de valence.

entre les deux, il reste un spin 1/2 non apparié pour chaque site. L'espace de Hilbert effectif restant est alors constitué de ces deux spins qui peuvent prendre n'importe quelle valeur et qu'on pourrait donc soit symétriser pour faire un triplet de spin 1, soit antisymétriser pour faire un singulet de spin 0 pour un total de 4 états, dimension de l'espace de Hilbert effectif. L'espace total, lui, a pour dimension 9 car il contient les états de spin 2 dont une base est présentée Eq. 1.32a, interdits par construction. Un hamiltonien sur l'espace de Hilbert total des deux sites  $i$  et  $i + 1$  qui vérifie  $SU(2)$  et qui admet comme états fondamentaux tous les états dont le spin total n'est pas 2 est donc naturellement donné par le projecteur sur les états de spin 2  $P_2(i, i + 1)$  : il est l'unité pour ces mêmes états, et renvoie 0 pour tous les autres qui leur sont orthogonaux. En réécrivant ce projecteur en terme des opérateurs de spin sur site dans la représentation de spin 1  $\vec{S}_i$ , et en sommant sur les sites on obtient le hamiltonien AKLT :

$$H_{\text{AKLT}} = \sum_i P_2(i, i + 1) \quad (1.33a)$$

$$= \sum_i \left[ \frac{1}{2} \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{6} (\vec{S}_i \vec{S}_{i+1})^2 + \frac{1}{3} \right]. \quad (1.33b)$$

Pour avoir une expression plus explicite de l'état fondamental, il est utile de renommer chaque spin 1/2 fictif en un site par  $\psi_\alpha$  de telle sorte que :

$$\psi_1 = |\uparrow\rangle, \quad \psi_2 = |\downarrow\rangle. \quad (1.34)$$

On définit alors successivement :

$$\psi_{\alpha\beta} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha \otimes \psi_\beta + \psi_\beta \otimes \psi_\alpha] \quad \text{tel que :} \quad (1.35a)$$

$$\psi_{11} = \sqrt{2}|1\rangle, \quad \psi_{12} (= \psi_{21}) = |0\rangle, \quad \psi_{2,2} = \sqrt{2}|-1\rangle. \quad (1.35b)$$

De même, on définit  $\psi^\alpha = \epsilon^{\alpha\beta} \psi_\beta$  avec sommation sur les indices répétés et  $\epsilon^{\alpha\beta}$  le tenseur complètement antisymétrique tel que  $\epsilon^{12} = 1$ . Ainsi, un état générique sur les deux sites  $i$  et  $i + 1$  s'écrit comme combinaison linéaire des  $3 \times 3 = 9$  états  $\psi_{i,\alpha\beta} \otimes \psi_{i,\gamma\delta}$ . Les états solutions du hamiltonien 1.33b pour ces deux sites seulement seront donc les 4 états  $\Omega(2)_{\alpha\beta} = \psi_i^{\alpha\gamma} \otimes \psi_{i+1,\gamma\beta}$  constitués d'une superposition d'état qu'on ne peut pas réduire à un état produit de fonctions d'ondes sur chaque site individuel et qui ne sont pas correctement normalisés. On peut alors généraliser ces états au hamiltonien total 1.33b :

$$\Omega(L)_{\alpha\beta} = \psi_{1,\alpha\alpha_1} \otimes \psi^{2,\alpha_1\alpha_2} \otimes \cdots \otimes \psi_{L,\alpha_{L-1}\beta} \quad (1.36)$$

(en fonction de la parité de  $L$ , il faut éventuellement légèrement changer cette définition pour s'assurer d'avoir des indices pour  $\alpha$  et  $\beta$ . Cela n'a aucune influence sur la suite). Plusieurs remarques sont alors de rigueur :

- Ces états fondamentaux sont au nombre de 4 pour une chaîne ouverte, et un seul pour des conditions aux limites périodiques (correspondant à l'antisymétrisation de  $\alpha$  et  $\beta$  dans l'Eq 1.36, à des détails en fonction de la parité de  $L$  près). Puisque ce qui différencie les 4 états de la chaîne ouverte est aux bords, on dit alors que le *bulk* est un singulet. Il s'agit bel est bien du seul état fondamental [44], séparé des autres états par un gap.
- On peut associer à chacun des 4 états de la chaîne ouverte un spin 1/2 effectif à chaque bord. On obtient ainsi l'image d'une chaîne complètement amagnétique excepté au bord où se trouvent des spins 1/2 libres représentés Fig. 1.8. Ces spins ne sont pas rigoureusement localisés sur le site 1 et  $L$  respectivement dans le sens où chacun est symétrisé avec son compagnon sur chaque site, lui-même a singulet avec un des spins voisins et ainsi de suite. Leur extension est, comme la fonction de corrélation à deux corps, exponentiellement décroissante.
- Cette dernière (pour les spins 1, et dans le cas d'une chaîne infinie) est d'ailleurs :

$$\langle S_0^a S_r^b \rangle = \delta^{ab} (-1)^r \frac{4}{3} 3^{-r} \quad \text{pour tout } r > 0, \quad (1.37)$$

(en unité du pas du réseau)<sup>7</sup>. On peut alors définir une longueur de corrélation  $\xi =$

---

<sup>7</sup>La fonction de corrélation à deux points est le moment le plus représentatif de la distribution de probabilité jointe d'observer simultanément la lecture des observables  $S_0^a$  et  $S_r^b$ , ou, à une constante de proportionnalité indépendante de  $r$  près dans ce cas, à la probabilité d'observer  $S_r^b$  en ayant observé  $S_0^a$ . Ainsi, la fonction de corrélation Eq. 1.37 dit principalement que l'observation de  $S_r^b$  est largement indépendante de l'observation de  $S_0^a$  pour  $r \gg \xi$ .

$\frac{1}{\ln(3)} \sim 0.9$  ce qui force les excitations à avoir une masse, et donc prouve l'existence d'un gap.

- Les états sommés dans l'Eq. 1.36 ne sont pas de même pondération. Celle-ci est cachée dans la définition Eq. 1.35, en plus de la normalisation globale, absente dans l'Eq. 1.36.
- Chacun de ces états pondérés peut s'exprimer dans la base des spins 1 de chaque site. Plus précisément, le premier spin non nul dans une telle base de l'état  $\Omega(L)_{\alpha\beta}$  sera 1 si  $\alpha = 1$ , -1 si  $\alpha = 2$ , tandis que le dernier spin non nul sera 1 si  $\beta = 1$ , -1 si  $\beta = 2$ . Chaque spin 1 sera suivi d'un spin -1 lui-même suivi d'un spin 1, etc... avec un nombre de spin 0 arbitraire entre chaque changement de spin  $\pm 1$ . Un des états typiques de la somme dans  $\Omega(L)_{12}$  est par exemple :

$$|0100 - 101 - 10\dots 0 - 1\rangle. \quad (1.38)$$

On retrouve l'image d'instantons de la Fig. 1.5 avec cette fois-ci, la pondération. Les états les plus pondérés sont d'ailleurs les états de Néel, puis viennent les solitons uniques de spin 0, puis les doubles solitons de spin 0 et ainsi de suite.

- Aucun des quatre états ne peut être exprimé comme un état produit de fonctions d'onde de l'espace de Hilbert de chaque site, mais forcément une superposition non triviale de ceux-ci. Chaque spin est donc intriqué à ses voisins rendant une telle phase intrinsèquement quantique, comme beaucoup de phases topologiques.
- Sur le vocabulaire : une telle construction peut être réalisée pour des spins plus grand que 1. Il faut alors augmenter le nombre des connections entre les sites et a fortiori la dimension du modèle sous-jacent. Les paires de spins 1/2 vont alors suivre les liens du réseau, d'où dénomination d'état *Valence-Bond Solid* (VBS, solide de lien de valence). Lorsque l'état fondamental est unique, et que la phase correspondante est, comme pour la phase de Haldane de spin 1, avec des corrélations exponentiellement décroissante, un gap et sans ordre de Néel, on dit qu'il s'agit d'une phase VBS. Pour des spins suffisamment grand, plusieurs états VBS existeront et correspondront à des dimères, tandis que sémantiquement parlant la phase correspondante ne sera plus une phase VBS.
- Il est possible de trouver d'autres phases gappées à 1 dimension avec des corrélations exponentiellement décroissante, mais sans un *bulk* unique. C'est par exemple le cas du modèle de K. Majumdar et D. K. Ghosh [45] qui dimérise, brisant la symétrie de translation discrète, avec deux états fondamentaux (hors bords) qui lui reste compatible avec le paradigme de Ginzburg Landau.

Ce modèle AKLT est très pratique car on peut trouver une expression explicite pour l'état fondamental, mais peu réaliste car il correspond à un *fine tuning* (réglage des paramètres) bien particulier. Modifier le coefficient devant le terme "biquadratique"  $(\vec{S}_i \vec{S}_{i+1})^2$ , ne permet plus de trouver une expression explicite pour l'état fondamental qui qualitativement ressemble à



Figure 1.8 – L'état VBS  $\Omega_{\alpha\beta}$  pour une chaîne finie. Chaque point est un spin 1/2, d'une part symétrisé avec son voisin en un spin 1 par le projecteur représenté par l'ellipse en pointillé et antisymétrisé avec un second spin 1/2 d'un site voisin en un singulet. Reste les deux spins 1/2 :  $\alpha$  et  $\beta$  aux bords.

un mélange entre une dimérisation partielle et un état VBS. La dimérisation sera totale lorsque les coefficients devant les termes quadratique et biquadratique seront égaux, c'est-à-dire pour :

$$H_\theta = \sum_i \left[ \cos(\theta) \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} + \sin(\theta) (\vec{S}_i \vec{S}_{i+1})^2 \right], \quad (1.39)$$

avec  $\theta = \pi/4$  et où se produit donc une transition de phase. Lorsque  $\theta = -\pi/4$ , la phase correspondante est critique, et il s'agit alors d'un autre point de transition de phase. Entre ces deux transitions, il est possible de changer de manière continue le hamiltonien et l'état fondamental sans fermer du gap (on dit de manière "adiabatique", voir [46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57] pour des études numériques). L'essentiel des propriétés reste alors valide<sup>8</sup> le long de la transformation. Toute cette zone qui contient le modèle d'Heisenberg de spin 1 décrit alors la même phase, qu'on appelle ainsi, la phase de Haldane, représentée Fig. 1.9. Puisque la zone ne contient pas le modèle trivial (entre autre, sans interaction, même plus proche voisin) il ne s'agit pas de la phase triviale. Par ailleurs, puisque la phase est gappée sans briser spontanément (ou explicitement) aucune des symétries de départ (SU(2), la symétrie de translation au moins, l'inversion<sup>9</sup> et l'invariance par renversement du temps) la phase n'est pas non plus expliquée dans le cadre de la théorie de Landau. C'est un pur exemple de phase topologique.

---

<sup>8</sup>A cause de la dimérisation partielle, dans le cas d'une chaîne ouverte et de longueur finie, la dégénérescence entre les 4 niveaux va être légèrement levée (au profit du singulet de spin 0 (comme pour Haldane) ou du triplet de spin 1 en fonction de la valeur du couplage biquadratique). Puisque cette levée s'estompe à la limite thermodynamique, elle ne constitue pas une propriété de la phase, mais doit être prise en compte lors de l'interprétation des simulations numériques.

<sup>9</sup>Dans le cas d'une chaîne dans la phase de Haldane en l'absence de champ magnétique, l'activation de ce dernier brise toute les symétries sauf cette inversion si la chaîne est infinie, ou avec des conditions aux limites périodiques. Dans le cas de la chaîne finie, la dégénérescence des états de bords est brisée, mais puisque l'inversion n'est alors plus strictement valide, il n'y a pas de contradiction.

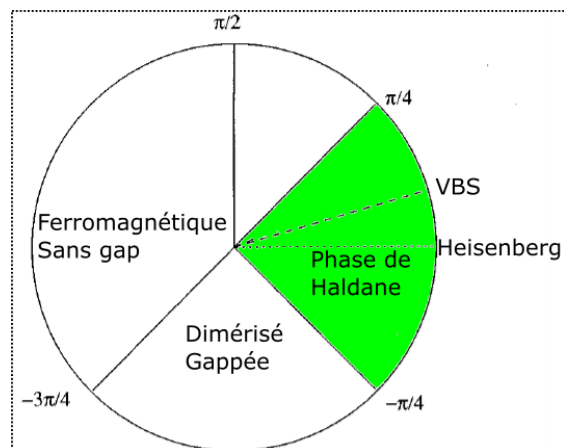


Figure 1.9 – Diagramme de phase (simplifié) du modèle biquadratique Eq. 1.39 en fonction de  $\theta$ . La phase de Haldane s'étend sur  $\theta \in ]-\pi/4; \pi/4[$  et comprend le modèle d'Heisenberg et le modèle AKLT. La figure est adaptée de Ref. [54].



### 1.3 La conjecture de Haldane

Avant Affleck *et al*, Haldane avait déjà regardé la chaîne de spins  $1/2$  et  $1$  et même davantage pour le modèle XXZ [19]. Plus précisément, il partait de la chaîne XY perturbée (même si le résultat qu'il obtient est exact) pour passer en variables action-angle qu'il bosonise après passage à la limite continue. Il en déduit entre autre que le hamiltonien des fluctuations à grandes longueurs d'onde est de type sine Gordon. S'en suivent ses prédictions, choquantes à l'époque, sur les propriétés générales des phases attendues, en particulier en fonction du spin de la chaîne. Ses résultats étaient tellement contraire à la doxa, et la démonstration trop succincte, que l'article ne fut même pas publié, bien que parfois mentionné par la suite, en particulier lors de son discours Nobel 35 ans plus tard [58]. C'est en fait en 1983 [25, 59], cette fois-ci publié, qu'il revient à la charge avec une méthode très différente, et plus approximative, qu'il retrouve les résultats précédents dans la limite semi-classique (spin  $S \rightarrow \infty$ ). L'extrapolation à petit spin devient dès lors hasardeuse reléguant ses résultats, auparavant exacts, au rang de "conjecture". Cette dénomination est restée malgré les travaux qui ont suivis et affinés ses résultats, voire qui ont été généralisés à  $SU(N)$  [60].

#### 1.3.1 Approche semi-classique

C'est cette dernière approche qui sera présentée ici, plus particulièrement la version standardisée qui utilise les intégrales de chemins [61, 62, 63, 64] car en plus de se poser dans un formalisme plus actuel, elle permet d'introduire explicitement des notions importantes aux phases topologiques telles que les invariants topologiques, les phases de Berry, les classes topologiques. Une présentation détaillée et rigoureuse méritant largement un ou deux chapitre d'un livre entier, je ne m'attarderai que sur les points évoqués plus haut. Il s'agit donc de commencer par regarder une chaîne de spins  $S$  (sans pour l'instant, qu'il s'agisse de chaîne de Heisenberg). Une base des états à un spin peut s'écrire :

$$\{|S, m\rangle\}, \text{ telle que } \vec{S}^2 |S, m\rangle = S(S+1) |S, m\rangle \text{ et } S^z |S, m\rangle = m |S, m\rangle, \quad (1.40)$$

avec  $-S \leq m \leq S$  pouvant prendre  $2S+1$  valeurs différentes l'une de l'autre d'un entier. L'état  $|S, S\rangle$  est appelé état de plus grande pondération (*highest weight state* en anglais) car il permet de déduire tous les autres par application successive de l'opérateur descendant  $S^-$ . Les états cohérents, une base surcomplète de l'espace du spin précédent peuvent alors être définis (voir [65] pour une introduction, [66] pour une review, [67, 61] pour une utilisation similaire à celle à suivre et [68] pour une généralisation au delà de  $SU(2)$ ) :

$$|\vec{n}\rangle = e^{i\theta(\vec{z} \wedge \vec{n}) \cdot \vec{S}} |S, S\rangle, \quad (1.41)$$

avec  $\vec{n}$  un vecteur de la sphère  $S^2$ ,  $\vec{z}$  un vecteur arbitraire fixé de cette même sphère tel que  $\vec{z} \cdot \vec{n} = \cos(\theta)$ , et  $\wedge$  le produit vectoriel. Cette base est une manière de formaliser l'idée évoquée

dans l'introduction du chapitre (la vision classique). Alors :

$$|\vec{n}\rangle = \sum_{m=-S}^S D^{(S)}(\vec{n})_{m,m'=S} |S, m\rangle, \quad \text{avec} \quad (1.42a)$$

$$D^{(S)}(\vec{n}_1) D^{(S)}(\vec{n}_2) = D^{(S)}(\vec{n}_3) e^{i\Phi(\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{n}_3) S^z}, \quad \text{avec } \vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{n}_3 \text{ quelconques,} \quad (1.42b)$$

avec  $D^{(S)}(\vec{n})$  est la représentation "de spin  $S$ " du quotient  $SU(2)/U(1)$  (car  $|\vec{n}\rangle$  est défini à une phase globale près). Ceux-ci forment une algèbre où l'élément en plus,  $\Phi(\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{n}_3)$  est dû au sous-algèbre de Cartan du groupe. Il s'agit de l'angle solide (de  $S^2$ ) orienté, défini à  $4\pi$  près (sans importance étant donnée les valeurs propres  $m$  de  $S^z$ ). Ainsi :

$$\langle \vec{n}_1 | \vec{n}_2 \rangle = e^{i\Phi(\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{n}_3) S} \left( \frac{1 + \vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2}{2} \right)^S, \quad (1.43a)$$

$$\langle \vec{n} | \vec{S} | \vec{n} \rangle = S \vec{n}, \quad (1.43b)$$

$$\mathbb{1} = \int \left( \frac{2S+1}{4\pi} \right) d^3 n \delta(\vec{n}^2 - 1) |\vec{n}\rangle \langle \vec{n}| \left( = \int d\mu(\vec{n}) |\vec{n}\rangle \langle \vec{n}| \right) \quad (1.43c)$$

(où 1.43b est une approximation). Regarder l'opérateur d'évolution en temps imaginaire ( $T' = -iT$ , une rotation de Wick) permet de se ramener à un opérateur défini sur un espace à deux dimensions choisit périodique pour se ramener à une fonction de partition de physique statistique classique (i.e. non quantique) de température (à la constante de Riemann près mise à 1)  $1/\beta = 1/T'$ . Grâce à la formule de Trotter, en prenant  $N_t \delta t = \beta$  qui reste constant lorsque  $N_t \rightarrow \infty$ ,  $\delta t \rightarrow 0$  et en insérant des résolutions de l'identité 1.43c entre chaque opérateur d'évolution infinitésimal pour passer de  $t_j$  à  $t_{j+1} = t_j + \delta t$  avec  $t_{N_t} = t_0$ , une formulation en intégrale de chemin est obtenue :

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}(e^{iHT}) \\ &= \text{Tr}(e^{-\beta H}) \\ &= \lim_{\delta t = \beta/N_t \rightarrow 0} \left( e^{-\delta t H} \right)^{N_t} \\ &= \lim_{\delta t = \beta/N_t \rightarrow 0} \left( \prod_{j=1}^{N_t} \int d\mu(\vec{n}_j) \right) \left( \prod_{j=1}^{N_t} \langle \vec{n}(t_j) | e^{-\delta t H} | \vec{n}(t_{j+1}) \rangle \right) \\ &\approx \lim_{\delta t = \beta/N_t \rightarrow 0} \left( \prod_{j=1}^{N_t} \int d\mu(\vec{n}_j) \right) \left( \prod_{j=1}^{N_t} [\langle \vec{n}(t_j) | \vec{n}(t_{j+1}) \rangle - \delta t \langle \vec{n}(t_j) | H | \vec{n}(t_{j+1}) \rangle + o(\delta t)] \right) \\ &\approx \lim_{\delta t = \beta/N_t \rightarrow 0} \left( \prod_{j=1}^{N_t} \int d\mu(\vec{n}_j) \right) \\ &\quad \times \left( \prod_{j=1}^{N_t} [\langle \vec{n}(t_j) | \vec{n}(t_{j+1}) \rangle - \delta t (\langle \vec{n}(t_j) | H | \vec{n}(t_j) \rangle \langle \vec{n}(t_j) | \vec{n}(t_{j+1}) \rangle + o(\delta t))] \right) \\ &\approx \lim_{\delta t = \beta/N_t \rightarrow 0} \int \mathcal{D}\vec{n} e^{-S_E[\vec{n}]}, \end{aligned} \quad (1.44)$$

où la dernière étape est obtenue en utilisant 1.43a. L'action Euclidienne  $S_E(\vec{n})$  est donnée par :

$$-S_E[\vec{n}] = iS \sum_{j=1}^{N_t} \Phi(\vec{n}(t_j), \vec{n}(t_{j+1}), \vec{z}) + S \sum_{j=1}^{N_t} \ln \left( \frac{1 + \vec{n}(t_j) \cdot \vec{n}(t_{j+1})}{2} \right) - \sum_{j=1}^{N_t} \langle \vec{n}(t_j) | H | \vec{n}(t_{j+1}) \rangle, \quad (1.45)$$

qui n'est valable en toute rigueur que lorsque les  $\{\vec{n}(t_j)\}$  sont suffisamment lisses, ce qui est rarement le cas [69] sauf dans la limite de large spin (limite semi-classique [70, 71] en partant d'une définition alternative des états cohérents [64]. Se limiter aux basses fréquences seulement permet de définir une phase car elles correspondent aux grandes longueurs d'ondes régies par le (les) état(s) fondamental(-aux), et les premiers états excités. Le premier membre de l'action 1.45, noté  $iS\mathcal{A}[\vec{n}]$  peut être vu comme la somme des éléments de longueurs parcourus par  $\vec{n}(t)$  pondérés par la phase (ou, alternativement, pour une longueur définie à la surface de la sphère  $S^2$ ). D'après le théorème de Stokes, cette somme est égale à la surface (orientée) dessinée par la courbe  $\Lambda$  fermée et orientée tracée par le vecteur  $\vec{n}(t)$  (donc de paramètre  $t$ ). Cette surface  $\Sigma^+$  est ambiguë car définie à  $4\pi$  près, sans incidence sur la suite. En prenant  $\tau$  une seconde coordonnée spatiale pour décrire cette surface (essentiellement la latitude de la sphère), il devient possible d'écrire l'aire totale une fois la limite  $\delta t \rightarrow 0$  réalisée:

$$\mathcal{A}(\Sigma^+) = \int_0^1 dt \int_0^\beta d\tau \tilde{n}(t, \tau) \cdot (\partial_t \tilde{n}(t, \tau) \wedge \partial_\tau \tilde{n}(t, \tau)) = S_{WZ}[\vec{n}], \quad (1.46)$$

où  $\tilde{n}(t, \tau)$  est une paramétrisation arbitraire mais lisse de la surface  $\Sigma^+$  enclose par la courbe  $\Lambda$  et satisfait :

$$\forall t \in [0; \beta], \tau \in [0; 1], \tilde{n}(t, 0) = \vec{n}(t), \tilde{n}(t, 1) = \vec{z}, \tilde{n}(0, \tau) = \vec{n}(\beta, \tau). \quad (1.47)$$

Ce terme est dit de Wess-Zumino [72] (par contraste à un autre terme topologique dit de Chern-Simons) et contient toute la partie topologique du système : si le troisième membre de l'action 1.45 peut être appelé une phase dynamique (qui pondère le chemin) car il fait intervenir le hamiltonien, le premier terme<sup>10</sup>, lui, ne dépend que de la manière (i.e.  $\tilde{n}(t, \tau)$ ) de mapper  $S^2$  (paramétrée par  $t$  et  $\tau$ ) sur elle-même. D'où le nom de phase topologique (pour l'angle). En repassant dans les variables temps-espace réels, et grâce au théorème de Stokes, il est d'ailleurs possible de réécrire ce terme sous une forme traditionnelle en électromagnétisme :

$$S_{em} = \oint dt \vec{A} \cdot \frac{\partial \vec{n}}{\partial t}, \quad (1.48)$$

où  $\vec{A}$  serait le potentiel vecteur d'un monopole magnétique centré au milieu de la sphère [73, 74]. Il peut alors aussi s'écrire :

$$\oint d\vec{n} \cdot \vec{A}[\vec{n}] = \int_0^T dt \langle \vec{n}(t) | \partial_t \vec{n}(t) \rangle, \quad (1.49)$$

---

<sup>10</sup>le second terme est négligeable lorsqu'on ne garde qu'au plus, les corrections en  $\delta t$  du premier ordre.

qui permet de constater plus directement que l'action représente le changement de la phase accumulée au cours de l'évolution adiabatique du spin dû à la géométrie du système, plus communément appelée phase de Berry (à un facteur  $i$  près) [75, 76, 77].  $\vec{A}[\vec{n}]$  est alors la connexion de Berry.

Dans le cas de plusieurs spins, en particulier s'agencant comme dans la chaîne de Heisenberg décrite par le hamiltonien 1.1 dans la représentation de spin  $S$ , la même procédure se généralise avec un index supplémentaire de site  $\vec{r}$  et donne l'action euclidienne suivante :

$$S_E[\vec{n}] = -iS \sum_{\vec{r}} S_{WZ}[\vec{n}(\vec{r})] + JS^2 \int_0^\beta dt \sum_{\langle \vec{r}, \vec{r}' \rangle} \vec{n}(\vec{r}, t) \cdot \vec{n}(\vec{r}', t). \quad (1.50)$$

Lorsque  $J > 0$ , on s'attend à un ordre à longue portée ressemblant à un ordre de Néel. Pour pouvoir utiliser une limite continue, obtenir une théorie des champs et pouvoir ainsi utiliser des techniques de renormalisation usuelles [78] et accéder aux fluctuations à longues portées, il est utile d'adoucir le futur champ par la transformation :

$$\vec{n}(j) \rightarrow (-1)^j \vec{n}(j). \quad (1.51)$$

Puis il s'agit de séparer le champ restant en un champ variable lentement,  $\vec{m}$  (décrivant les grandes longueurs d'onde) d'un champ variable plus rapide  $\vec{l}$  sur lequel on intégrera, et qui sera responsable d'une aimantation globale non nulle de la chaîne [79]. Une telle opération est particulièrement douteuse à 1(+1) dimension (c'est pour cette raison que le théorème de Mermin-Wagner existe), mais redevient licite dans la limite semi-classique  $S \rightarrow \infty$  mais  $S$  finie<sup>11</sup>. Ainsi :

$$\vec{n}(j) = \sqrt{1 - a_0^2 \vec{l}(j)^2} \vec{m}(j) + (-1)^j a_0 \vec{l}(j), \quad (1.52)$$

où les relations :

$$\vec{n}(j)^2 = 1, \quad \vec{m}(j)^2 = 1, \quad \text{et} \quad \vec{m}(j) \cdot \vec{l}(j) = 0, \quad (1.53)$$

sont vraies à un terme correctif en  $a_0^2$ , l'espacement entre site, près. On en déduit, après limite continue, et pour  $\beta \rightarrow \infty$  :

$$S_E[\vec{m}, \vec{l}] = \frac{JS^2 a_0}{2} \int dx dt \left[ (\partial_x \vec{m}(x, t))^2 + 4\vec{l}(x, t)^2 \right] + \frac{iS}{2} \int dx dt \left[ \partial_x \vec{m}(x, t) + 2\vec{l}(x, t) \right] \cdot [\vec{m}(x, t) \wedge \partial_t \vec{m}(x, t)]. \quad (1.54)$$

Le champ très variable  $\vec{l}$  correspondant aux petites longueurs d'ondes, puisqu'il est massif

<sup>11</sup>De même que précédemment, cette justification devient explicite en partant d'une autre définition des états cohérents, mais engendre un traitement formel trop lourd pour le présent chapitre introductif.

dans l'action 1.54, il est intégré (aisé car la dépendance forme une gaussienne), pour obtenir :

$$S_E[\vec{m}] = \int dx dt \frac{1}{2g} \left[ v (\partial_x \vec{m}(x, t))^2 + \frac{1}{v} (\partial_t \vec{m}(x, t))^2 \right] + \frac{i\theta}{8\pi} \int dx dt \epsilon^{ij} \vec{m} \cdot (\partial_i \vec{m} \wedge \partial_j \vec{m}), \quad (1.55)$$

où le couplage  $g = \frac{2}{S}$ , la célérité des ondes de spins  $v = 2a_0JS$  et l'angle topologique  $\theta = 2\pi S$ . Le second terme n'est défini que lorsque  $\vec{m}(x, t) \xrightarrow{|x|, |t| \rightarrow \infty} \vec{m}_0$  où  $\vec{m}_0$  est un vecteur unitaire arbitraire mais constant.  $\vec{m}(x, t)$  devient alors un homéomorphisme entre  $R^2$  où l'on identifie tous les points à l'infini, donc équivalent à un homéomorphisme de la sphère  $S^2$  vers la sphère  $S^2$ . On peut alors définir des classes d'équivalences de ces homéomorphisme grâce au second groupe d'homotopie de  $S^2$  :  $\Pi_2(S^2) = \mathbb{Z}$ . Chaque classe se différencie par un entier (relatif) qui lui est propre : l'indice de Pontryagin, ou charge topologique, donné justement par le deuxième terme de l'action 1.55 à  $i\theta$  près. Le terme topologique ne peut donc avoir une influence que lorsque  $S$  est demi-entier (indépendamment de la valeur exacte de  $S$ ) est resté par construction invariant par renormalisation. Ainsi, en prenant en compte la contrainte  $\vec{m}^2 = 1$  de manière explicite dans l'intégrale de chemin, on obtient, dans le cas  $S$  entier, l'action d'un modèle sigma non-linéaire connu pour être massif à  $1 + 1$  D [62] et donc gappé. Plus particulièrement, l'intégration sur les fluctuations de petites longueurs (de l'ordre du pas du réseau) ou alternativement la renormalisation sur la longueur de la chaîne et la température (le temps imaginaire) font grossir le couplage  $g$  (et donc baisser le spin  $S$  désormais effectif) de telle sorte à obtenir un modèle sigma non-linéaire à fort couplage, où les hypothèses du traitement par renormalisation cessent d'être vérifiées mais est gappé de gap  $\Delta = v/\xi$  où  $\xi$  est la longueur de corrélation. Puisque  $\xi$  est une grandeur physique mesurable, elle doit être invariante par renormalisation ce qui lui impose la forme suivante :

$$\xi(g) = \xi(g \rightarrow \infty) e^{\pi S}, \quad (1.56)$$

où  $\xi(g \rightarrow \infty) \approx a_0$  pour la phase gappé du modèle sigma non-linéaire de fort couplage. Pour le cas  $S$  demi-entier, le terme topologique est désormais présent et doit lui aussi rester invariant par renormalisation ce qui impose au spin effectif le minorant  $1/2$  sachant que celui-ci diminue forcément au cours de la renormalisation. Le modèle sigma non-linéaire effectif est donc celui correspond à la chaîne de Heisenberg de spin  $1/2$  qui est critique (l'Eq. 1.56 est dans le cas où  $\xi(g \text{ grand})$  est infini). Ainsi, la phase du cas  $S$  demi-entier est critique [80] et donc sans gap. D'où la conjecture de Haldane :

**Pour une chaîne de spins (i.e. représentation irréductible de  $SU(2)$  de type Heisenberg antiferromagnétique), alors :**

- **la phase observée est sans gap si le spin est demi-entier. Les corrélations sont alors des lois de puissance.**
- **la phase observée est gappée si le spin est entier. Les corrélations sont alors exponentiellement décroissantes.**

Celle-ci a été vérifiée par des simulations numériques précises utilisant de la diagonalisation exacte sur des chaînes finies mais grandes [81, 82], par simulation Monte-Carlo par fonction de Green [83] ou par DMRG [84]. Le résultat a été retrouvé une troisième fois par Affleck et Haldane [85] par bosonisation non-abélienne [86].

En considérant non pas une mais plusieurs chaînes couplées (chacune avec toutes les autres), grâce au même raisonnement développé dans cette section, on montre qu'en plus d'un spin  $S$  demi-entier, pour être sans gap, le nombre de chaîne doit être impair. En particulier, pour deux chaînes de spin  $1/2$ , on retrouve la phase de Haldane de spin-1, d'où l'utilité de considérer des échelles si l'on veut partir de spin demi-entier (e.g. en utilisant des fermions).

#### 1.3.2 Entier pair et impair

Attention cependant, la conjecture dit que, lorsque  $S$  est entier, la phase sera gappée. C'est ainsi qu'on trouve une valeur du gap à  $0.41J$  pour  $S = 1$  [87, 88, 89, 84] et  $0.085J$  pour  $S = 2$  [90]. Pour des spins plus grands, la dépendance est donnée par  $\sim 2JS \exp(-\pi S)$  (conséquence directe de l'Eq. 1.56 et des expressions de  $\nu$  et  $\Delta$  qui la précède). L'état fondamental est alors décrit par un état désordonné où persiste un ordre entre les spins à courte distance sur une échelle de longueur  $\xi$  (longueur de corrélation). La fonction de corrélation spin-spin à  $T = 0$  décroît exponentiellement avec la distance inter-spin :

$$\langle \vec{S}_n \cdot \vec{S}_0 \rangle \approx \frac{(-1)^n}{\sqrt{|n|}} e^{-\frac{|n|}{\xi}} \quad (1.57)$$

(à une normalisation par  $S^2$  près.) Les calculs numériques ont montré que cette longueur de corrélation résiduelle  $\xi$  est de l'ordre de 6 spins pour  $S = 1$ , et 50 pour  $S = 2$ . Mais cela n'est pas suffisant pour conclure qu'il s'agit systématiquement d'une phase topologique, même si elle peut beaucoup y ressembler. Pour pouvoir faire la distinction, il faut une définition précise de ce qu'est une phase topologique plutôt que de n'en donner que des caractéristiques comme dans les parties précédentes. La définition la plus standard aujourd'hui, fait appel à la notion de connexion adiabatique entre deux phases gappées qu'on détaillera dans la partie suivante. Disons simplement pour l'instant que deux modèles (chacun décrit par son hamiltonien propre) sont adiabatiquement connectés si on peut continûment passer de l'un à l'autre sans transitions de phase. Puisque les "chemins" permis qui connectent les deux dépendent des symétries (et pas de paramètres expérimentaux), on dit aussi qu'ils sont adiabatiquement connectés si on peut localement passer de l'un à l'autre sans fermeture du gap. Les deux sont alors dans la même phase ou classe topologique. La phase topologique est dite non triviale lorsque la phase en question n'est pas connectée adiabatiquement au vide (isolant), systématiquement un état produit, ou "phase triviale" (qui peut elle même être composée de plusieurs phases compatibles avec le paradigme de Ginzburg Landau). Il existe plusieurs manières de montrer que la chaîne de spins 1 peut donner lieu à des phases topologiques non triviales, en fonction des symétries de la chaîne considérée [91]. Si on prend le cas typique de la chaîne antiferromagnétique d'Heisenberg qu'on sait être dans la

phase de Haldane, la symétrie est  $SU(2)$  en plus de l'inversion de tous les sites, de l'invariance par renversement du temps et de l'invariance par translation d'un site à l'autre. On peut, dans un premier temps ne garder que la symétrie du groupe diédral  $D_2$  incluse dans  $SU(2)$ , et qui correspond aux rotations d'angle  $\pi$  autour de l'axe  $Ox$ ,  $Oy$  et/ou  $Oz$ , homéomorphe au groupe  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ . Alors l'ordre caché évoqué Sec. 1.2.2 est présent et on obtient quatre états dégénérés (dans le cas d'une chaîne infinie aux limites ouvertes) qui se distinguent par leurs bords. En faisant la transformation non-locale (qui ne peut donc pas constituer une connexion adiabatique) unitaire de Kennedy et Tasaki [92, 93], proche d'une transformation de Jordan-Wigner et qui respecte le groupe diédral, il est possible de transformer chaque état fondamental en un état ferromagnétique dont la direction dépend du couple d'état au bord, et ces états brisent spontanément la symétrie  $D_2$ . Le paramètre d'ordre non local (en ruban) qui caractérisait l'ordre caché précédent devient alors le paramètre d'ordre local magnétique usuel après transformation. Il s'agit d'un cas explicite de correspondance *bulk-edge*, et on peut dire que dans la chaîne initiale, les états de bords brisent spontanément une symétrie. Ce dernier point n'est pas vrai dans le *bulk* car la transformation de Kennedy et Tasaki ne peut se faire dans le cas d'une chaîne aux limites périodiques qui n'est donc qu'un *bulk*, le même que la chaîne ouverte infinie. Ainsi, la phase de Haldane n'est pas caractérisée par une brisure spontanée de symétrie même si celle-ci doit systématiquement apparaître dans le cas d'une chaîne ouverte. Le fait que la transformation qui change la phase de Haldane en une phase triviale soit non-locale assure qu'il n'existe pas de transformation locale (i.e. une connexion adiabatique) qui puisse le faire et qu'ainsi la phase de Haldane est topologiquement non-triviale. L'ordre caché se généralise à tout  $S$  entier [94], tandis que le même type de transformation, et donc de conclusion, se généralise à tout spin  $S$  impairs, mais pas pour les  $S$  pairs <sup>12</sup>.

Lorsqu'on ne regarde que la symétrie par renversement du temps dans la chaîne de spins  $S$  impair, pour laquelle les états de bords sont forcément des spins (effectifs) demi-entier, le théorème de Kramers assure alors forcément une dégénérescence systématique de l'état fondamental qui sera multiple de deux par bord peu importe la perturbation invariante par renversement du temps et donc la connexion. Le vide étant non dégénéré, il n'est donc pas dans la même classe topologique. Le théorème de Kramers ne s'appliquant pas pour des spins entiers aux bords attendus pour des chaînes de spins pairs, la protection n'existe plus, et une perturbation invariante par renversement du temps peut rendre un état singulet magnétique plus bas en énergie que les  $S + 1$  états fondamentaux attendus initialement [91] (et sans transition de phase intermédiaire).

Dans le cas où l'on ne regarde que la symétrie d'inversion, notamment d'une chaîne périodique de spin impair avec un nombre impair de sites, alors un exemple d'inversion serait

---

<sup>12</sup>Il est d'ailleurs possible d'associer aux quatre couples d'états de bord (qui constituent une base des états fondamentaux) une représentation graphique de l'ordre caché correspondant (cf Fig. 1 de la Ref. [91]). Cette association existe vraisemblablement pour les généralisations de la phase de Haldane proposées par la suite, mais n'est pas explorée ici. Il n'est pas certain que toutes les phases topologiques procèdent de la brisure spontanée (ou non) d'une symétrie cachée sous-jacente.

l'échange entre un site et son symétrique par rapport à un axe passant par un des sites et le milieu des deux opposés [91]. Alors, l'état AKLT est état propre de l'opérateur d'inversion de valeur propre  $-1$  ( $+1$  pour  $S$  pair), et le reste naturellement face à toute perturbation qui conserve la symétrie alors que le vide, lui, est état propre de valeur propre  $+1$ . Les deux phases(ou moins dans le cas  $S$  impair) ne peuvent donc pas être adiabatiquement connectées. Cet argument heuristique peut être remplacé par un autre, plus rigoureux et indépendant du nombre de site ou des conditions aux limites en utilisant des matrices d'états produits (ou *Matrix Product States*, d'acronyme MPS) qu'on ne présentera pas ici.

Ainsi, que se soit en considérant le groupe diédral, l'inversion ou le renversement du temps, à partir du moment où au moins une de ces symétries n'est pas brisée explicitement dans le hamiltonien (et donc, lors de l'éventuelle connexion à la phase triviale), la phase gappée de Haldane est topologiquement différente de la phase (gappée) triviale pour une chaîne de spins  $S$  impair. Ces mêmes protections n'existent pas dans le cas des spins pairs. On peut en fait construire explicitement la connexion (qui vérifie toutes les symétries initiales) entre la phase triviale et la phase de Haldane dans le cas  $S$  pair en utilisant les MPS [91]. De manière plus heuristique, un autre argument le montre en considérant non pas une mais deux chaînes de Heisenberg de même amplitude de couplage  $J_{\text{leg}}$ . En associant alors un indice supplémentaire, dit "orbital", 1 ou 2 à chaque opérateurs de spin, l'interaction d'échange entre chaque site qui se font face est notée  $J_{\text{rung}}$ . Le hamiltonien du modèle d'échelle est alors :

$$H_{\text{ladder}} = J_{\text{leg}} \sum_i \left[ S_{1,i}^A S_{1,i+1}^A + S_{2,i}^A S_{2,i+1}^A \right] + J_{\text{rung}} \sum_i S_{1,i}^A S_{2,i}^A. \quad (1.58)$$

Lorsque  $J_{\text{leg}} > 0$ , la phase topologiquement (gappée) triviale (car état produit de site) dite *rung singlet*, ou singulet de barreau, est obtenue quelque soit le spin de l'échelle lorsque  $J_{\text{rung}} \rightarrow \infty$ . Lorsque les montants de l'échelle sont des chaînes de spins demi-entiers, la limite  $J_{\text{rung}} \rightarrow -\infty$  amène a une chaîne effective de spin entier impair. Partir de montant de spins entiers (pairs ou impairs) amène dans la même limite à une chaîne effective de spins entiers pairs. Ainsi, en variant continûment  $J_{\text{rung}}$  quelque soit le spin, on passe de la phase de Haldane gappée à  $J_{\text{rung}} \rightarrow -\infty$  à la phase triviale gappée à  $J_{\text{rung}} \rightarrow \infty$ . Lorsque les montants sont de spins entier, le gap n'est jamais fermé au cours de la variation rendant la phase de Haldane de spin entier pair triviale, tandis que dans le cas des montants de spins demi-entiers, la variations passe par  $J_{\text{rung}} = 0$  où les chaînes sont alors découplées et connues pour avoir un comportement critique, donc sans gap, d'après la conjecture de Haldane. Il existe donc une transition de phase critique en ce point empêchant la connexion adiabatique entre la phase de Haldane de spin entier impair et la phase topologiquement triviale. Le processus peut-être vu plus en détail en regardant le spectre d'intrication pour lequel la dégénérescence de l'énergie (d'intrication) la plus basse est la même que la dégénérescence des états d'un bord (cf par exemple Fig.5 de [91]). La dégénérescence de l'énergie d'intrication la plus basse ne change pas sans passer par une transition de phase pour des montants de spins  $1/2$ , mais celle-ci devient non dégénérée (et correspond donc essentiellement à un état produit) sans transition pour des montants de spin 1.



Ainsi, les phases de Haldane sont topologiquement non triviales lorsque  $S$  est impair, triviale lorsque  $S$  est pair. Les états de bords qui doivent être expérimentalement visibles dans les deux cas, sont alors considérés comme plus "fragiles" dans le cas  $S$  pair, car ils ne sont pas protégés topologiquement. Il est cependant difficile de donner des valeurs quantitatives à cette fragilité sans faire d'expérience. Il n'est donc pas impossible que, dans la pratique, ou moins dans certains régimes de paramètres expérimentaux, cette distinction ne se voit pas. Par ailleurs, lorsque les chaînes de spins ne sont qu'effectives et sont en fait obtenues par des fermions localisés dans un réseau, le degré de liberté supplémentaire : la charge (i.e. le fait que le nombre de fermions par site peut varier au cours du temps) tend à rendre les phases topologiques triviales [95] sans être systématique [96].

### 1.3.3 Généralisation à tous $N$

Les généralisations de la conjecture de Haldane peuvent porter sur plusieurs aspects, et parmi elles, les plus souvent citées sont le théorème de Lieb-Schultz-Mattis [97] et quelques unes de ses généralisations [98, 99, 100, 101] à plus grandes dimensions qui peuvent être résumées comme suit [102] : Si un système de spin quantique défini sur un réseau a un nombre impair de spin  $1/2$  par maille élémentaire, alors n'importe quel hamiltonien local de spin qui préserve la symétrie de spin (souvent  $SU(2)$ , parfois seulement  $U(1) \times \mathcal{D}_2$ ) et de translation ne peut engendrer une phase "sans traits marquants" <sup>13</sup> c'est-à-dire gappée et non dégénérée <sup>14</sup> (l'exemple paradigmatique pour un modèle d'échelle serait une phase *rung singlet*). La conjecture de Haldane (qui ne porte que sur le modèle de Heisenberg) est tout-à-fait compatible car si le spin en chaque site est demi-entier, on a un cas semblable à un nombre impair de spin  $1/2$  qui donne lieu à une phase sans gap. Cela implique trois possibles scénarios pour les modèles concernés par le théorème :

- Son état fondamental brise spontanément la symétrie de spin ou de translation du réseau. L'état fondamental devient alors dégénéré avec potentiellement des modes de Goldstone. A 1D, la brisure ne peut qu'être celle d'une symétrie discrète et ne donne jamais lieu à des modes de Goldstone. Le devenir typique est une dimérisation ou la phase de Néel.
- La phase est gappée et l'état fondamental est dégénéré <sup>15</sup> sans briser de symétrie, c'est-à-dire qu'il développe un ordre topologique. Cette possibilité n'apparaît que pour des systèmes 2D ou plus car la conjecture de Haldane l'interdit directement dans le cas de Heisenberg à 1D.

---

<sup>13</sup>Plus souvent appelée *featureless* en anglais, et même en français car l'expression entre guillemets, pourtant traduction la plus fidèle dans ce contexte, n'est jamais utilisée.

<sup>14</sup>D'après cette définition, standard pour le théorème, le *bulk* de la phase de Haldane (i.e. en faisant abstraction des bords) est *featureless*. Pour signifier qu'une phase n'est pas en plus topologique, on dira *trivial featureless*, même si les abus de langage n'utilisant que l'un ou l'autre des adjectifs pour signifier les deux notions sont courants.

<sup>15</sup>C'est une formulation standard qui fait apparaître la difficulté de qualifier une phase topologique de *featureless*.

- Les fonctions de corrélations des quantités physiques (telles que les corrélations spin-spin) du fondamental sont à décroissance algébrique (i.e. sont des lois de puissances). Le spectre est alors sans gap. C'est le scénario typique des chaînes 1D décrit par la conjecture.

Pour les cas unidimensionnels, l'extension de Lieb et Affleck [98], alors nommée théorème de Lieb-Schultz-Mattis-Affleck, est particulièrement importante, car leur résultat s'applique à un hamiltonien ayant la symétrie  $SU(N)$ . Si, en chaque site, se trouve un "spin" ou "saveur", i.e. une représentation irréductible de  $SU(N)$  (discussion Sec. 4.1.1), qui est aussi une représentation du groupe projectif de  $SU(N)$ , aussi appelée "vraie représentation", ou alternativement dont le diagramme d'Young contient un nombre de boîte multiple de  $N$ , alors, on ne peut rien dire. Sinon, dans le cas d'une chaîne infinie (au bords ouverts), soit la phase est sans gap, et l'état fondamental est non dégénéré, soit l'état fondamental est dégénéré (avec ou sans gap ; typiquement une polymérisation). Ce dernier cas n'est jamais une phase topologique. En effet, Lieb et Affleck montrent que la chaîne finie correspondante a un état fondamental unique séparé d'un état excité par un gap en  $O(L^{-1})$  contrairement aux phases topologiques où le gap est soit en  $e^{-\xi}$  (en unité du pas du réseau) soit tend vers une valeur finie non nulle à la limite thermodynamique. Ainsi, ces dernières ne sont possibles que dans le cas des vraies représentations. Et c'est exactement ce qui a été montré par la suite pour  $SU(3)$  [103] dans le cas des représentations totalement symétriques<sup>16</sup> : dans le cas d'une vraie représentation, la phase est gappée, et peut être topologique [104, 60], et est sans gap pour les autres représentations. La preuve utilise, en partie, un raisonnement similaire à la Sec. 1.3.1 : une description par un modèle sigma non-linéaire est obtenue, avec un angle topologique qui tue le gap, sauf lorsque cet angle est nul dans le cas d'une vraie représentation. La phase "chirale Haldane" présentée par la suite se base, elle, sur la représentation adjointe de  $SU(3)$  (pour simplifier) à trois boîtes, et est naturellement également compatible avec la généralisation.

---

<sup>16</sup>C'est-à-dire de tableau d'Young à une seule ligne.

### 1.4 Classification des phases topologiques

Après avoir évoqué quelques exemples de phases topologiques dont une en particulier, la phase de Haldane, il est utile de revenir plus précisément sur la notion même de phase topologique. La définir correctement va permettre, à l'instar du paradigme de Ginzburg-Landau, d'en établir une classification. Deux types de classifications peuvent être distinguées en fonction de l'existence des interactions. Sans interaction, la classification est plus simple et a ainsi été la première à être établie historiquement. Pour la présenter, je vais fortement m'inspirer de la première partie de [105]. La classification avec interaction est nettement plus utile pour cette thèse mais est aussi plus difficile d'accès.

#### 1.4.1 Pour les modèles sans interaction

Une phase de la matière peut être vue comme une classe d'équivalence des états physiques qui partagent un certain ensemble de propriétés. Dans le cas des phases topologiques (toujours gappées), la quantité caractéristique est l'invariant topologique<sup>17</sup> qui prend des valeurs bien spécifiques pour chaque classe d'équivalence. Plus précisément, perturber un système dans une phase topologique laissera l'invariant topologique inchangé tant que le gap reste fini. Le système initial et le système perturbé, ou, plus exactement leur hamiltonien et état(s) fondamental(-aux) sont alors dans la même classe d'équivalence, ils sont connectés adiabatiquement. Ainsi, le changement de phase ne se fait que par transition de phase quantique [18], c'est-à-dire effondrement du gap. La protection topologique complète ne peut apparaître que pour des systèmes avec interactions et nécessite la possibilité d'intrication à longue portée, alors à l'origine d'un ordre topologique intrinsèque, robuste à tout type de perturbation. Sans interaction, ou au moins à une dimension et avec seulement des interactions à courtes portées, il est impossible d'avoir cette intrication à longue portée et donc un ordre topologique. Les phases topologiques protégées par la symétrie (phase SPT) sont, elles, toujours possibles et peuvent souvent être décrites (à basse énergie) par la théorie des bandes. C'est pour cela qu'on les appelle parfois des isolants topologiques<sup>18</sup> : un sous-ensemble de l'ensemble des phases isolantes sans interaction, ce dernier ensemble étant la classe d'équivalence des états quantiques fermioniques à plusieurs particules caractérisés par un *bulk* avec un gap d'énergie.

On définit alors la classe "triviale" comme la classe d'équivalence à laquelle appartient l'isolant atomique, qui a essentiellement le même spectre électronique qu'un atome isolé. Il s'agit de la même classe qui contient le vide (pour lequel les trous de la bande de valence seraient les positrons, tandis que les excitations de la bande de conduction sont les électrons). Dans le cas des isolants, on peut alors reformuler l'équivalence en disant que le système  $A$  et  $B$  de hamiltonien  $H_A$  et  $H_B$  respectivement sont dans la même classe d'équivalence si et seulement si, en réglant  $H_A$ , on peut interpoler de manière continue l'état fondamental (éventuellement

---

<sup>17</sup>éventuellement plusieurs d'entre eux.

<sup>18</sup>La classification à suivre s'applique également au superconducteurs et aux superfluides lorsqu'on en fait une description par une technique de champ moyen utilisant la théorie de Bogoliubov-de-Gennes [106, 107, 108, 109, 110, 111, 112].

au pluriel) de  $A$  vers celui de  $B$ , à un nombre de bandes triviales près, sans fermer le gap. Si tous les réglages sont permis, toutes les bandes sont triviales et donc tous les isolants (sans interaction) sont équivalents. Si par contre seules les déformations qui préservent certaines symétries également vérifiées par le hamiltonien et son (ses) état(s) fondamental(-aux) sont considérées, d'autres classes peuvent apparaître. C'est ainsi que l'invariance par renversement du temps empêche l'interpolation entre la classe triviale et la phase isolante de spin Hall quantique (une phase SPT sans interaction) sans fermeture du gap. La symétrie protège la phase alors non topologiquement équivalente à la phase triviale. Si une déformation qui brise la symétrie explicitement (ou implicitement) est autorisée, les deux phases sont à nouveau connectées. Ainsi, la classification s'établit étant donnée une dimension et un ensemble de symétries (du hamiltonien et de son état fondamental). Elle donne le nombre de classe SPT (pour l'instant, sans interaction). Celle-ci se fait donc en deux temps : d'abord la sélection du hamiltonien (à une particule) en fonction de ses symétries, puis ensuite seulement la subdivision en classe topologique distincte. Cette dernière peut être réalisée de deux manières : soit en considérant le *bulk*, soit, de manière équivalente par holographie, aux bords. Une classification complète requiert d'examiner tous les ensembles possibles de symétrie.

En physique statistique cependant, la notion de phase n'est définie que lorsque celle-ci tolère un certain désordre assimilé à des perturbations locales. Ainsi, de nombreuses symétries telles que l'invariance par translation (discrète) ou l'inversion, systématiquement brisées explicitement par n'importe quel type de désordre (local) sont souvent négligées dans la classification (même si cette dernière reste faisable en les gardant : en considérant l'invariance par translation discrète, on obtient des SPT dites faibles, tandis qu'on parle de SPT fortes pour les symétries citées plus loin). Cela correspond alors à compter les classes de systèmes qui ne sont pas soumis à la localisation d'Anderson [113], comme réalisé par Zimbauer et Altland [114, 115] en considérant des matrices aléatoires comme hamiltoniens de systèmes fermioniques sans interaction (en première quantification). Ils distinguent alors dix classes non équivalentes, c'est le *ten-fold way* obtenues en ne considérant que trois symétries seulement. Il s'y trouve d'une part, l'invariance par renversement du temps  $\mathcal{T}$ , qui, lorsqu'elle est vérifiée par le système distingue les systèmes de spin entier (pour lesquels toutes les représentations de  $\mathcal{T}$  vérifient  $\mathcal{T}^2 = +1$ , 1 étant l'opérateur identité) et les systèmes de spin demi-entier (pour lesquels toutes les représentations (irréductibles) de  $\mathcal{T}$  vérifient  $\mathcal{T}^2 = -1$ ). D'autre part, il s'y trouve la symétrie par conjugaison de charge  $\mathcal{C}$ , ou, dans le cadre de la matière condensée, la symétrie particule-trou. Celle-ci, bien que souvent effective ou approximative lorsqu'elle est vérifiée ne dispose également que de représentations dont le carré est  $\pm 1$ . Enfin, la troisième symétrie est la composée des deux précédentes : la symétrie chirale ou de sous-réseau  $\mathcal{S}$ . De même que  $\mathcal{C}$ , elle anti-commute avec le hamiltonien (lorsqu'elle est vérifiée) tandis que  $\mathcal{T}$  commute avec celui-ci, mais toutes ses représentations au carré donnent l'identité. Le décompte des possibilités et résumé Tab. 1.1

Une fois ce premier classement effectué, il reste à compter combien de classes topologiques pour chacune des dix classes précédentes sont possibles. Trois (et seulement trois) scénarios ont alors lieu, et sont représentés Fig. 1.10. La preuve doit être faite pour chaque classe.

## Chapitre 1. Le cas $N = 2$ et la phase de Haldane

	Indice de Cartan	SRT	SCC	SSR
Classes standard (Wigner-Dyson)	A (unitaire)	0	0	0
	AI (orthogonale)	+1	0	0
	AII (symplectique)	-1	0	0
Classes chirales	AIII (chirale unitaire)	0	0	1
	BDI (chirale orthogonale)	+1	+1	1
	CII (chirale symplectique)	-1	-1	1
Classes BdG	D	0	+1	0
	C	0	-1	0
	DIII	-1	+1	1
	CI	+1	-1	1

Table 1.1 – Tableau des dix classes de symétries persistantes au désordre des hamiltoniens à une particule. Le classement s’effectue en fonction de leur comportement en fonction de la symétrie par renversement du temps (SRT), symétrie de conjugaison de charge (SCC) et symétrie de sous-réseau (SSR). 0 signifie que la symétrie n’est pas vérifiée, tandis que  $\pm 1$  fait référence au carré de l’opérateur. La première colonne donne le nom des classes [115, 114, 116] et la seconde l’indice univoque de Cartan associé [117]. Ce dernier permet de préciser de quel groupe l’opérateur d’évolution  $\exp -iHt$  est une représentation (typiquement, un quotient du groupe unitaire). Le tableau est reproduit de [105].

Par exemple, prenons le cas d’un hamiltonien d’un isolant de la classe A avec  $n$  bandes remplies et  $m$  bandes vides. Dans l’espace de Fourier, en se limitant à la première zone de Brillouin (où la théorie des bandes prend tout son sens) la densité de hamiltonien est  $\mathcal{H}(k)$ . Il peut être diagonalisé de telle sorte à ne considérer que la matrice unitaire de changement de base  $U$  et la matrice diagonale  $D$  telle que  $\mathcal{H} = UDU^\dagger$ . Quitte à rajouter un off-set, l’énergie de Fermi nulle est supposée nulle de telle sorte à ce que toutes les énergies négatives correspondent à un (ou plusieurs) état de la bande de valence, donc occupé, et toutes les énergies positives à un état de la bande de conduction, donc vide. Il n’y a pas de valeur propre nulle dans le cas d’un isolant. Par définition, quelque soit la classe, on peut toujours continûment et adiabatiquement connecter la diagonale du hamiltonien  $\mathcal{H}(k)$  sur le hamiltonien simplifié  $\mathcal{Q}(k)$  tel que :

$$\mathcal{Q}(k)|\psi_l(k)\rangle = \begin{cases} +|\psi_l(k)\rangle & \text{si } |\psi_l(k)\rangle \text{ est un état d'une bande vide} \\ -|\psi_l(k)\rangle & \text{si } |\psi_l(k)\rangle \text{ est un état d'une bande occupée,} \end{cases} \quad (1.59)$$

où  $|\psi_l(k)\rangle$  est un état propre de  $\mathcal{H}(k)$ <sup>19</sup> avec  $l \in [1, n + m]$ . Pour la classe A, i.e. sans contrainte supplémentaire,  $U$  appartient au moins à  $U(n + m)$  (le groupe unitaire) mais toute opération limitée aux seules bandes de valence ou de conduction ne pouvant pas clore le gap (i.e. ne mélange pas une bande de conduction et une bande de valence), celles-ci sont forcément toutes équivalentes. Ainsi,  $U$  est un élément du Grassmanien :

$$G_{n,n+m}(\mathbb{C}) = U(n + m) / U(n) \times U(m). \quad (1.60)$$

<sup>19</sup>Proprement défini dans le cas invariant par translation seulement, mais généralisable.

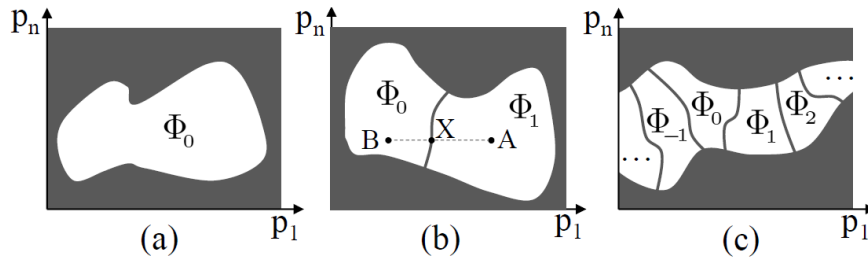


Figure 1.10 – Représentation schématique des trois diagrammes de phases topologiques dans l'espace des paramètres  $\{p_1, \dots, p_n\}$  du hamiltonien le plus générique (sans interaction). Les zones ou lignes grisées correspondent à un état fondamental sans gap, tandis que les zones blanches sont gappées. Ainsi, en fonction des classes de symétrie du Tab. 1.1, les trois scénarios sont : (a) tous les hamiltoniens gappés (avec des paramètres différents) sont dans une même unique région connectée  $\phi_0$  (forcément triviale), (b) il est possible de trouver deux hamiltoniens (A et B gappés) entre lesquels n'importe quelle connexion (comme celle en pointillé) ferme le gap (en X sur la figure), donnant lieu à seulement deux régions  $\phi_0$  et  $\phi_1$  connectées distinctes, (c) il y a une infinité forcément dénombrable de classes distinctes. Figure extraite de [105].

Ainsi, deux hamiltoniens  $\mathcal{H}(k)$  et  $\mathcal{H}'(k)$  sont adiabatiquement connectés si et seulement si leur matrice de changement de base (un *mapping*) correspondant  $U : BZ \rightarrow G_{n,n+m}(\mathbb{C})$  et  $U'$  peuvent être déformées continûment de l'une à l'autre, c'est-à-dire s'ils appartiennent à la même classe d'homotopie  $\pi_d [G_{n,n+m}(\mathbb{C})]$ , où  $d$  est la dimension de la zone de Brillouin. Ainsi, en dimension  $d = 2$ , on trouve  $\pi_2 [G_{n,n+m}(\mathbb{C})] = \mathbb{Z}$ . Il existe donc un nombre infini d'ensembles d'isolant non équivalents topologiquement, c'est-à-dire qui ne peuvent pas être continûment déformés de l'un vers l'autre sans transition de phase quantique, chaque ensemble étant libellé par un invariant topologique entier qui lui est propre. C'est le troisième scénario présenté Fig. 1.10, qui décrit le cas des isolants à effet Hall quantique entier, états fondamentaux des hamiltoniens 2D de la classe A<sup>20</sup>. L'invariant topologique est alors donné, au quantum de conductance près par la conductance de Hall du système. A trois dimensions, le groupe d'homotopie devient trivial, c'est le premier scénario de la Fig. 1.10 : il n'existe qu'une seule classe topologique. L'étude des autres classes n'étant pas toujours aussi directes, plusieurs méthodes sont possibles pour effectuer la classification [118, 119, 120] et permettent de rendre compte du fait que le nombre de classe topologique est largement indépendant de  $n$  et  $m$ , i.e. du nombre de bande "triviales" ajoutées ou soustraites. Une liste récapitulative des espaces de classifications est d'ailleurs donnée par le Tab. 5.2 de Ref. [105]. On résume cependant le groupe d'équivalence stable (i.e. le groupe d'homotopie prenant proprement en compte les équivalences par ajout de bande "triviale") Tab. 1.2.

Ce tableau fait apparaître une périodicité de 2 ou 8 selon la dimension et la classe de symétrie (dû à un phénomène appelé "périodicité de Bott" [121]), si bien qu'à condition d'associer

<sup>20</sup>faisant de lui une phase SPT... sans symétrie ! A cause de l'intrication à longue portée qu'il présente toujours, il est plus souvent classé comme ordre topologique (cf section suivante) malgré son absence d'entropie d'intrication et de dégénérescence du *bulk*.

## Chapitre 1. Le cas $N = 2$ et la phase de Haldane

Cartan	$d$	0	1	2	3	4	5	6	7	8
A		$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$
AIII		$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$
AI		$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$
BDI		$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$
D		$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}_2$
DIII		$\{1\}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$
AII		$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$
CII		$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\{1\}$
C		$\{1\}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\{1\}$
CI		$\{1\}$	$\{1\}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	$\{1\}$

Table 1.2 – Classification des isolants et superconducteurs topologiques sans interaction et "robustes" au désordre. Pour chaque dimension  $d$  est listé le groupe d'équivalence stable pour chaque classe de symétrie. Les trois scénarios Fig. 1.10 correspondent aux classes  $\{1\}$ ,  $\mathbb{Z}_2$  et  $\mathbb{Z}$  respectivement. Le tableau est reproduit de [105].

à chaque classe de symétrie un certain nombre unique (respectivement 0,1,0,1,2,3,4,5,6,7 dans l'ordre du tableau), il est possible de connaître de manière univoque en regardant seulement le groupe d'équivalence stable de la dimension 0. La classification topologique à proprement parler s'effectue alors dans cette dimension 0, tandis que dans les dimensions supérieures "classent les défauts". Par ailleurs, la classification peut se faire en partant de la correspondance *bulk-edge* [120] car l'existence d'états de bords robustes et sans gap est caractéristique des SPT. Cette dernière propriété non-triviale se démontre en considérant la théorie effective de basse énergie des hamiltoniens appartenant aux classes de symétrie précédentes : un modèle sigma non-linéaire. L'apparition de classes non triviales n'est possible que si on peut y ajouter des termes topologiques (invariants par renormalisation) : soit des termes  $\mathbb{Z}_2$ , soit des termes de Wess Zumino Witten (WZW) [122].

### 1.4.2 Pour les modèles avec interactions

La notion de phase SPT [123] avec les interactions (toujours à courtes portées) généralise en fait celle présentée précédemment qui était réduite aux seuls isolants (et superconducteurs) de bandes topologiques. Les interactions peuvent avoir plusieurs effets notables :

- ils élargissent voire fusionnent des phases SPT ensemble (éventuellement avec la phase triviale). C'est le cas par exemple de la classe BDI de la chaîne de Majorana [124, 125, 126], réduisant le nombre de classe à 8 seulement, au lieu d'une infinité
- ils peuvent créer de toutes nouvelles classes
- ils modifient la physique des états au bord
- ils permettent aussi aux systèmes bosoniques d'avoir des phases SPT (auparavant réservés aux isolants sans interaction). C'est le cas de la phase de Haldane.

Plusieurs classifications de ces dernières sont possibles [127, 128, 129], mais aucune n'est encore considérée comme définitive (la classification pour  $SU(N)$  mentionnée par la suite utilise le groupe de cohomologie). Mais les interactions ont une autre conséquence complètement inédite : les ordres topologiques intrinsèques, eux aussi appelés génériquement phases topologiques. Souvent évoqués dans la même littérature que celle des SPT tout en étant sensiblement différents, il est utile de les présenter brièvement pour s'assurer de ce que ne sont pas (!) les SPT.

Ces ordres topologiques ne s'expliquent pas eux non plus par le paradigme de Ginzburg-Landau mais n'ont pas non plus besoin de la protection d'une symétrie. Ces phases gappées sont robustes (entre autre face au désordre) grâce aux motifs intriqués à longue portée qui les constituent. Pour rendre compte de ce phénomène, il faut compléter la définition précédente de ce qu'est une phase (qui utilise la connexion adiabatique) en rajoutant comme condition supplémentaire que deux états fondamentaux sont de la même phase si est seulement s'ils se transforment de l'un en l'autre par évolution unitaire locale <sup>21</sup> [130]. Tout état fondamental d'une phase (gappée) intriquée à courte portée peut alors se transformer en état produit décrivant forcément une phase triviale [130]. Ainsi lorsque toutes les évolutions unitaires locales sont permises, toutes les phases SPT précédentes <sup>22</sup> puisqu'elles sont toutes intriquées à courte portée [131] deviennent systématiquement triviales à une dimension. Il faut donc rajouter la condition que l'évolution doit également respecter l'éventuelle symétrie protectrice pour régénérer l'existence des phases SPT pour pouvoir utiliser cette nouvelle définition. Dans le cas où cette dernière condition n'est pas nécessaire pour obtenir une phase distincte de la phase triviale, la phase décrit un ordre topologique. Une manière quantitative de voir l'intrication à longue portée d'origine topologique est de calculer le terme constant (vis-à-vis de la taille du système) de l'entropie de von Neumann vis-à-vis de la taille du système [132, 133]. Ce terme constant, ou entropie quantique topologique, sera non nul pour les ordres topologiques <sup>23</sup> et est donc caractéristique et exclusif de ces derniers. La dégénérescence du bulk du fondamental est, contrairement au SPT, systématique pour les ordres topologiques en fonction du genre de la surface <sup>24</sup>, mais non exclusive à ceux-ci (les phases dimérisées topologiquement triviales sont aussi dégénérées dans le *bulk*). Il est possible de combiner ordre topologique et protection par symétrie pour obtenir des phases dites topologiquement enrichies. Tous ces scénarios sont résumés Fig. 1.11.

La classification du double-puits considéré par la suite s'effectuera d'après les généralisations du théorème LSMA de la Sec. 1.3.3 mais à partir de  $PSU(N)$  et non  $SU(N)$ . Ce dernier groupe est obtenu à partir du groupe  $SU(N)$  à une équivalence près :  $g \sim zg = gz$  où  $g \in SU(N)$  et  $z \in \mathbb{Z}_N$ , le centre de  $SU(N)$ . Lorsque  $N = 2$ ,  $SO(3) \cong PSU(2) = SU(2)/\mathbb{Z}_2$  et les représentations

<sup>21</sup> Si  $U$  est un opérateur d'une telle évolution, il existe  $H(t)$ , local, tel que  $U = \exp(-i\hbar \int H(t) dt)$ .  $tH$  (ou au moins l'intégrale précédente) connecte alors adiabatiquement les hamiltoniens de départ est d'arrivée autorisant la nouvelle condition, plus spécifique, de définition d'une phase à se substituer entièrement à la première, plutôt que de simplement la compléter.

<sup>22</sup> à l'exception la phase à effet Hall quantique entier (cas spécifique).

<sup>23</sup> sauf pour l'effet Hall quantique entier.

<sup>24</sup> une fois encore, sauf pour l'effet Hall quantique entier.



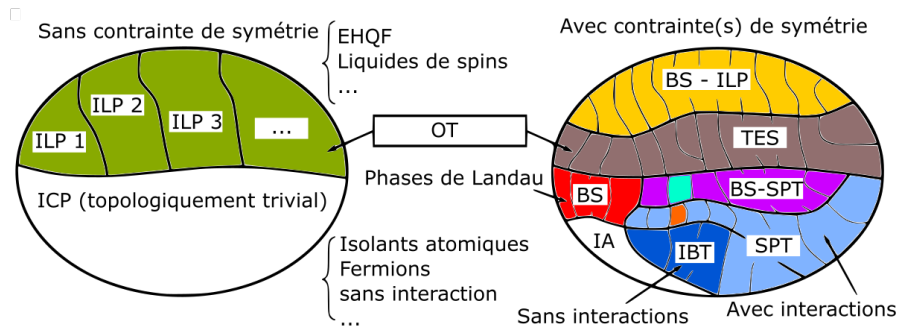


Figure 1.11 – Représentation schématique des divers scénarios possibles pour les phases topologiques avec interactions. (a) Sans contrainte de symétrie (i.e. toutes les connexions adiabatiques sont permises), toutes les phases (gappées) avec une intrication courte portée (ICP, en blanc) sont topologiquement triviales : il faut une intrication longue portée (ILP, en vert) pour obtenir des ordres topologiques. (b) Avec contrainte de symétrie (i.e. lorsque seules les connexions adiabatiques qui conservent les symétries choisies sont considérées), les deux zones se fragmentent. Les phases topologiquement triviales peuvent être soit la phase de l'isolant atomique (IA, en blanc), soit obtenues par brisure spontanée de symétrie (BS, en rouge). Les seules phases sans interaction mais topologiquement non triviales sont les isolants (et superconducteurs) de bandes topologiques (IBT, en bleu foncé), cas particulier des phases topologiques protégées par la symétrie (SPT, en bleu clair) avec interactions, parmi lesquelles on trouve la phase de spin-1 d'Haldane (en orange). Ces dernières peuvent en plus briser spontanément une symétrie (BS-SPT, en violet) comme pour le cas des phases de Haldane chirales détaillées dans la suite de la présente thèse (en cyan). Les phases avec intrication à longues portées, elles, se subdivisent lorsqu'elles brisent spontanément une symétrie (BS-ILP, en jaune) et peuvent même être en plus protégée par une symétrie restante pour devenir des phases topologiques enrichies par la symétries [134] (TES ou SET en anglais, en gris). La figure est adaptée de la figure 6.1 de la Ref. [105].

linéaires de  $SO(3)$  ("vraies représentations") sont les mêmes que celles de  $SU(2)$  pour le spin  $S$  entier. Les représentations de spins  $S$  demi-entiers sont les représentations projectives de  $SO(3)$ . La classification des phases topologiques en présence de la symétrie de site  $PSU(N)$  et de l'invariance par translation est réalisée dans les Refs. [130, 135] et utilise la cohomologie des groupes de Lie qui dépasse le cadre de cette thèse. Le cas discuté ici est celui de "spins"  $PSU(N)$  se transformant linéairement sur chaque site ( $n_Y = 0 \pmod{N}$ , où  $n_Y$  est le nombre de boîtes du tableau d'Young de la représentation, cf Sec. 4.1.1) avec des interactions aux plus proches voisins. Alors, tous les états gappés invariants par translation et par la symétrie  $PSU(N)$  sont classés par  $n_Y \pmod{N}$  qui labélise les différentes représentations projectives de  $PSU(N)$  caractérisant les spins aux bords (ou non dans le *bulk*). Plus précisément, si un état de spin au bord droit se transforme dans la représentation avec  $n_Y$  boîtes, alors sa classe topologique est indexée par  $n_{top} = n_Y \pmod{N}$ . Ainsi, pour  $PSU(N)$ , jusqu'à  $N$  classes topologiques différentes sont attendues, dont une est la classe topologiquement triviale. L'ajout de symétries additionnelles change ce résultat. L'effet de la symétrie d'inversion en plus de la symétrie  $SU(N)$  ne va par exemple qu'autoriser la classe topologiquement triviale à

l'exception d'une seule (non-triviale) si  $N$  est pair (cf Ref. [136]).

### 1.5 Réalisations et expériences

Grâce à l'effet Hall quantique (entier ou fractionnaire) en particulier [11], il est désormais relativement courant d'observer des phases topologiques en laboratoire. À une dimension cependant, l'observation de SPT est beaucoup plus rare. Dans le cas des phases SPT fermioniques, les états de bords d'une chaîne de type Kitaev : des fermions de Majorana, ont probablement été observé dans des systèmes hybrides de nanofils superconducteurs-semiconducteurs [137, 138, 139]. Pour les phases SPT bosoniques, seule la phase de Haldane (spin 1) a été observée expérimentalement grâce à la fois à son gap et à ses excitations. À l'exception de ses états de bords, les propriétés les plus "caractéristiques de la nature topologique" de la phase telles que le spectre d'intrication n'ont, elles, jamais été observées à ce jour. Je présente ici ces réalisations de la phase de Haldane pour des systèmes (solides) de matières condensées. Je présente ensuite le principe d'une réalisation utilisant des systèmes d'atomes froids, retenue et explorée dans le reste de la thèse.

#### 1.5.1 Les chaînes de Haldane existantes

Dès 1982 [24], l'observation du composé NENP, ou Nickel Ethdiamine Nitrito Perchlorate  $Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2ClO_4$  représenté Fig. 1.12 pouvant être modélisé par une chaîne de spins 1 quasi-unidimensionnelle révéla que sa susceptibilité magnétique (mesurée à l'aide d'un magnétomètre, donc ne résolvant que le *bulk*) s'annulait dans les trois directions pour température tendant vers  $0K$ . Plus particulièrement, la chute de susceptibilité mesurée en deça de  $10K$  était alors inexplicable sans intervention de la conjecture de Haldane (sans brisure spontanée de symétrie, on s'attendait à la présence d'excitations potentiellement magnétiques grâce aux seules fluctuations quantiques). Par la suite, une mesure du gap a été obtenue par diffusion inélastique de neutron [140] et mesuré à  $\Delta = 0.42J$  (donc proche des simulations), puis les premières excitations, le triplet magnétiques de la Fig. 1.6, ont aussi été étudiées par mesure du taux de relaxation du proton, résonance électron-spin à haute fréquence et diffusion inélastique de neutron (pour le gap entre chaque état du triplet) et trouvées conformes à la théorie [141, 142, 143]. Par la suite, d'autres systèmes, variantes du NENP, ont été examinés et se sont avérés posséder eux-aussi ce gap de Haldane. C'est le cas du NINO [144], du NI-NAZ ou du TMNIN [145], du  $Y_2BaNiO_5$  [146] ou du  $CsNiCl_3$  [147] Quelque soit le composé évoqué jusqu'à présent, tous sont décrits par des chaînes de spin 1. Pour des spins plus grands, le gap de Haldane n'a jusqu'à présent jamais été observé (excepté le cas de spin 2 [148]). Afin de pouvoir observer plus précisément la phase de Haldane et les phases SPT qui peuvent apparaître dans des conditions plus générales (plus grand spin, ou utilisant des représentations de  $SU(N)$  plutôt que  $SU(2)$  seulement), des systèmes appropriés (et jusqu'à présent inexistant) sont nécessaires. Les systèmes de matière condensée étant relativement rigides une fois synthétisés, il est intéressant, dans un premier temps, de s'intéresser à des systèmes plus flexibles tels que les atomes froids [149, 150, 151].

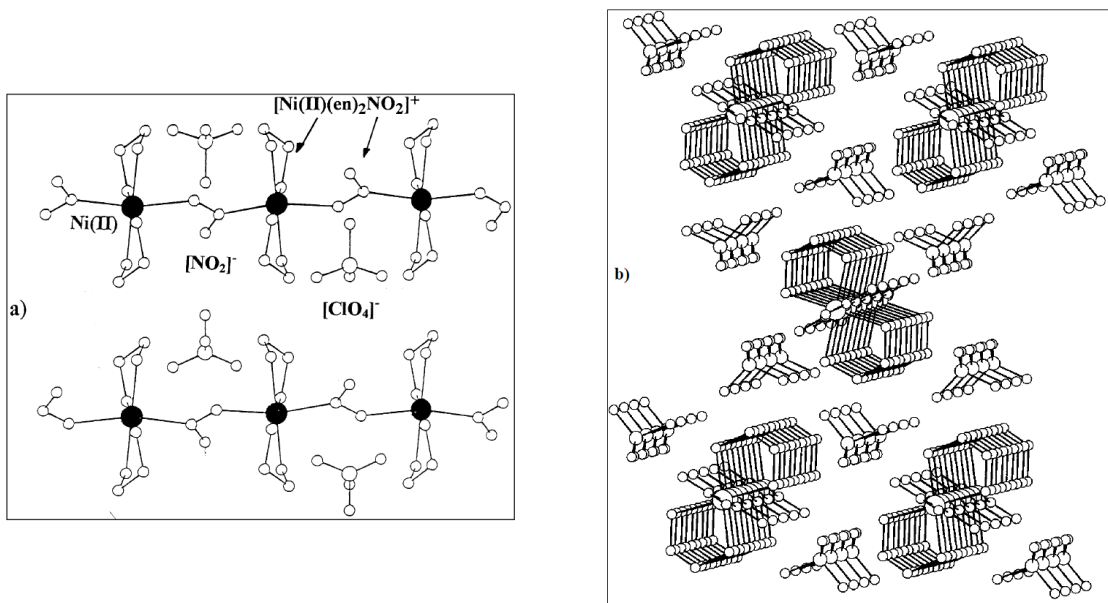


Figure 1.12 – (a) Représentation des chaînes du composé NENP, les ions  $Ni^{2+}$  sont chacun maintenus par deux molécules d'éthanediamines (en) et pontés entre eux par la molécule ionique  $NO_2^-$ . Le motif de la chaîne est alors  $[Ni(II)(en)_2NO_2]^+$ . La neutralité du système est assurée par la contre molécule ionique  $[ClO_4]^-$ . Les composés voisins du NENP disposant d'un gap de Haldane ont une structure similaire mais utilisent d'autres composés chimiques. (b) Représentation en perspective des chaînes du NENP. Le perchlorate assure l'isolation magnétique entre les chaînes, rendant le système quasi-unidimensionnel. Le modèle effectif devient alors une chaîne antiferromagnétique d'Heisenberg de spin 1 (le spin est porté par le Nickel). Si on note  $J$  son couplage,  $J'$  le couplage magnétique interchaîne et  $D$  l'anisotropie à un ion le long d'une chaîne (i.e. en  $(S^z)^2$ ), les mesures donnent en effet  $|J'/J| < 10^{-3}$  et  $|D/J| < 2.10^{-2}$ . La figure est adaptée de la Ref. [26].

### 1.5.2 Implémentations par l'intermédiaire d'atomes froids

En effet, là où la plupart des systèmes de matière condensée ont des paramètres essentiellement fixes une fois fabriqués, ne permettant que l'exploration de quelques régimes dépendants d'un champ extérieur, les systèmes d'atomes froids sont en général beaucoup plus réglables et permettent l'observation d'une zone plus vaste du diagramme de phase. Ces derniers, en utilisant des particules non-chargées, peuvent d'ailleurs servir à simuler des systèmes de matière condensée pour trouver le régime voulu avant de les fabriquer. Ils ont alors l'avantage d'être des véritables simulateurs quantiques où on mesure le résultat de la simulation essentiellement impossible à réaliser avec un ordinateur "classique". C'est aussi pour cela que ces systèmes d'atomes froids sont très prisés en information quantique. Les systèmes typiques sont composés que de gaz de particules dilués (un gaz dense est en général peu compris et peu utilisable car sujet à de nombreuses interactions à plusieurs corps), c'est-à-dire où la portée des interactions est petite face à la distance entre particules. Ainsi, seules les interactions de contacts sont considérées. Naturellement, celles-ci sont

d'amplitudes suffisamment faibles (sauf cas particuliers e.g. [152]) pour ne considérer que le cas des gaz parfaits perturbés. Les systèmes d'atomes froids semblent alors être drastiquement différents des systèmes de matière condensée étudiés actuellement (tels que ceux qui font apparaître une phase topologique) décrits (et presque définis) par un nombre réduit mais crucial d'interactions. Heureusement, il est possible de sélectivement régénérer ces interactions dans les systèmes d'atomes froids sans changer l'espèce chimique utilisée initialement et d'accéder ainsi au régime de fort couplage, ou plus généralement, de fortes corrélations typique des systèmes solides. Les deux (seules) méthodes cumulables utilisables sont la résonance de Feshbach [153, 154] et l'utilisation de potentiels optiques [155]. En effet, l'amplitude des interactions du modèle effectif sur réseau (naturel pour des simulations de systèmes condensés où existe un potentiel cristallin) pour des interactions de contact seulement dépend de deux sources sur lesquelles vont jouer les deux méthodes.

D'une part il y a le couplage entre deux particules (i.e. l'amplitude de la force de contact), souvent exprimé en fonction de la longueur de diffusion car cette dernière est la quantité tabulée expérimentalement (mais rarement mesurée directement, voir [156] pour une mesure quasidirecte dans le contexte de la résonance de Feshbach). C'est celle-ci qui peut-être complètement modifiée (y compris son signe) par résonance de Feshbach. Dans le cas (historique) de système de spin  $SU(2)$  (i.e., les "vrais" spins usuels), aussi appelée résonance de Feshbach magnétique, son principe est souvent résumé par la Fig. 1.13. On y considère deux particules interagissant par le potentiel en rouge (quitte à considérer le mouvement relatif des deux particules, on peut supposer l'une des deux fixe au centre) qui engendre une longueur de diffusion (i.e. un couplage) de fond faible. Chacune de ces particules est dans un état avec leurs propres nombres quantiques, typiquement le nombre magnétique de spin secondaire. Sans résonance de Feshbach un état libre reste libre dans le canal ouvert à l'énergie considérée (prise nulle) : les désexcitations spontanées sont négligées. La résonance de Feshbach consiste à augmenter l'amplitude de l'interaction entre cet état libre et (au moins) un état lié avec les mêmes nombres quantiques que l'état libre en rapprochant l'énergie de l'état lié de 0 grâce à un champ extérieur. S'ensuit un phénomène de résonance qui domine complètement la longueur de diffusion qui dépend alors de manière non linéaire entre la longueur de diffusion de fond (souvent négligeable), de l'amplitude de l'interaction responsable de l'état lié et surtout du champ extérieur. Changer la valeur de ce dernier, c'est choisir la longueur de diffusion effectivement perçue par le système. Puisque celle-ci diverge à la résonance, de grandes longueurs sont possibles. Dans le cas de système  $SU(N)$ ,  $N > 2$ , la résonance de Feshbach magnétique ne fonctionne plus, mais une autre, la résonance de Feshbach optique [157], de principe similaire mais de mise en place plus délicate, est possible et est de plus en plus maîtrisée.

D'autre part, l'autre source de modification de l'amplitude d'interaction sur réseau est de manipuler le recouvrement des fonctions d'ondes des deux particules en modifiant leur amplitude par l'intermédiaire d'un potentiel optique externe (comme détaillé Chap. 2). L'effet se produit déjà en construisant le réseau optique réglable en plus du piège. Pour des particules chargées, les pièges les plus courants n'utilisent que des champs électriques ou électromag-

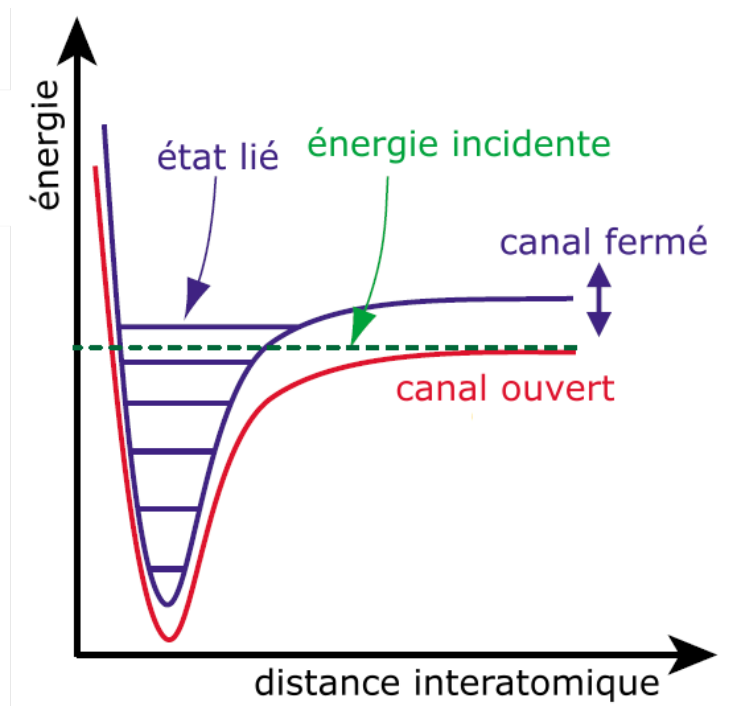


Figure 1.13 – Le modèle à deux canaux de la résonance de Feshbach. Les atomes préparés dans le canal ouvert (en rouge) sont diffusés lorsqu'ils se rapprochent. Lors de la diffusion, le canal ouvert est couplé à un état lié du canal fermé, où une diffusion résonante (ou presque) peut alors se produire. La position relative du canal fermé peut être modifiée par un champ extérieur tel que le champ magnétique pour la résonance de Feshbach magnétique. Figure adaptée de la Fig. 3 de [149]

nétiqes [158, 159]. Pour les particules neutres considérées par la suite, plusieurs autres options sont disponibles. On y trouve les pièges par pressions-radiations, qui peuvent partir d'une haute température et de beaucoup d'atomes [160, 161], mais n'atteignent que rarement une très basse température et seulement pour quelques microsecondes. Il-y-a également les pièges magnétiques [162, 163], efficaces mais qui effacent la structure interne de la particule (la symétrie entre spins), indispensable pour les protocoles évoqués dans la suite de la thèse. Restent les pièges optiques dipolaires, la meilleure option à ce jour [155]. Ce dernier fait interagir les atomes avec un faisceau laser gaussien (que l'on peut traiter par une approche semi-classique), de telle sorte à y induire un dipôle. Si la fréquence est proche d'une résonance, mais suffisamment éloignée pour limiter les émissions stimulées, le potentiel perçu par le dipôle induit est :

$$V_{\text{dip}}(\vec{r}) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \frac{\Lambda}{\Delta} I(\vec{r}), \quad (1.61)$$

où  $c$  est la célérité de la lumière,  $\omega_0$  la fréquence de résonance du dipôle,  $\Lambda$  le taux de désexcitation de l'état excité du dipôle,  $\Delta = \omega_L - \omega_0$ , l'écart à la résonance où  $\omega_L$  est la fréquence du

laser et  $I$  l'intensité du faisceau que l'on peut moyenner sur le temps dans le régime étudié :  $\omega_L \sim \omega_0 \gg |\Delta| \gg \Lambda, 1/T$  où  $T$  est le temps typique du mouvement de centre de masse du dipôle (i.e. d'un éventuel phonon, où de l'inverse de la fréquence de la structure fine que parfois utile par ailleurs). L'influence d'un tel potentiel sur la longueur de diffusion dans un tel régime est négligeable. Dans le cas où le potentiel est attractif ( $\Delta < 0$ , *red detuning*), les atomes se rassembleront au *waist* du faisceau où le potentiel du piège est essentiellement harmonique. Il est possible de rendre cette zone plus plate, afin de rendre les réseaux qui s'y trouvent plus homogènes [164]. En effet, si on rajoute un faisceau de même longueur d'onde et en phase contrapropageant au premier, les deux faisceaux interféreront alors, modulant ainsi l'intensité par une sinusoïde le long de la direction de propagation. Les atomes se rassembleront aux ventres de celle-ci. Au besoin, il est possible de rajouter le même type de dispositif dans d'autres directions de l'espace afin de compléter ce réseau (i.e. le rendre 2D ou 3D) voire d'en régler sa forme (la fréquence des lasers supplémentaires commande l'espacement entre les sites dans leur direction de propagation, tandis que choisir des directions non orthogonales les unes aux autres permet d'aller au delà de la simple géométrie carré ou cubique du réseau [165, 166]). Il est possible de rajouter en plus un champ similaire mais dépendant du spin [167, 168, 169, 170], qui permet en particulier la sélection de la structure interne des particules piégées.

## 1.6 Résumé du chapitre

Un modèle paradigmatique des chaînes de spin quantique à une dimension est la chaîne de Heisenberg 1.1. Dans le cas antiferromagnétique, et pour des spins  $1/2$ , la phase est amagnétique sans gap, avec des corrélations spins-spins en loi de puissance conformément à la résolution exacte par Ansatz de Bethe et à l'approche de théorie des champs. Dans le cas des spins 1, qui n'est plus intégrable, la phase est aussi amagnétique mais a cette fois-ci un gap et une longueur de corrélation. Cette alternance sans gap / gap se répète pour les spins demi-entiers et entier respectivement, c'est la conjecture de Haldane.

La phase de la chaîne de spins 1 est cependant particulièrement intéressante, car elle est distincte de la phase triviale lorsque le hamiltonien vérifie la symétrie diédrale  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$  (sous-groupe de  $SU(2)$ ), l'invariance par renversement du temps, ou l'inversion, particulièrement visible par la construction AKLT. Il s'agit d'une phase topologique protégée par la symétrie qui ne peut pas s'expliquer par une brisure spontanée de symétrie comme dans le paradigme de Ginzburg-Landau. Elle est entre-autre systématiquement caractérisée par des états de bords dégénérés (alors que le *bulk* est, lui, non-dégénéré en général) et un spectre d'intrication avec une énergie d'intrication la plus basse dégénérée autant de fois que les états de bord (pour un seul bord). Dans le cas de la phase de spin 1 dite de Haldane, les états de bords se comportent comme des spins  $1/2$  libres (un à chaque bord). La dégénérescence est donc 2 par bord. Il existe des expériences utilisant des systèmes de matière condensée telle que le NENP qui ont permis l'observation de cette phase.

La phase de Haldane n'est en fait qu'un exemple des phases SPT qui existent à toutes dimensions. Une classification de ces phases a été réalisée sans et avec interactions. L'ajout d'interaction permet même l'apparition d'un autre type de phase topologique : les ordres topologiques. À une dimension, ceux-ci ne sont jamais présents. Une généralisation de la phase de Haldane est possible lorsque la symétrie du hamiltonien à un corps passe de  $SU(2)$  à  $SU(N)$ ,  $N > 2$ , où jusqu'à  $N - 1$  phases topologiques non triviales sont attendues. Une "généralisation" de la conjecture de Haldane, le théorème LSMA n'autorise cependant ces phases topologiques que si la représentation en chaque site de la chaîne est une "vraie représentation" (lorsqu'il y a invariance par translation). Une réalisation de ces nouvelles phases en utilisant des systèmes de matière condensée semble, avec la technologie actuelle, peu probable, mais devient envisageable lorsqu'on se tourne vers les systèmes d'atomes froids. L'utilisation couplée de la technique de résonance de Feshbach et d'un réseau optique bien choisi permet d'explorer le régime de fort couplage où ces phases sont attendues et pourront être plus facilement localisées en jouant sur les réglages de l'expérience. Le modèle à deux canaux de la résonance de Feshbach.





## 2 Le modèle du double-puits

L'idée la plus naturelle pour réaliser une phase de Haldane à partir d'atomes froids est probablement de construire une chaîne de spin 1 directement à partir de bosons (de spin 1) avec une interaction fortement répulsive (obtenue artificiellement par résonance de Feshbach et le réseau 1D). Si la symétrie  $SU(2)$  de spin n'est pas explicitement brisée, l'interaction la plus simple, et donc *a priori* dominante sera de type Heisenberg, si bien qu'en régime de fort couplage, la phase de Haldane sera attendue. Un tel dispositif est envisageable (voir [171] pour un traitement théorique du cas bosonique sans spin, et [172, 173] en tracent le diagramme de phase et discutent du paramètre d'ordre non-local de "l'isolant de Haldane" (nom de la phase de Haldane de spin-1 obtenue à partir de ces bosons)) mais souffre de deux inconvénients majeurs. D'une part, atteindre le régime de fort couplage sera difficile (mais a déjà été réalisé [174]) car le *hopping* (ou saut en français, mais si le terme *hopping* est autant utilisé et est gardé par la suite) entre site est *a priori* particulièrement grand pour les bosons qui, à température nulle, auront tendance à condenser. Un tel phénomène est incompatible avec la phase de Haldane. D'autre part, l'obtention de systèmes avec la symétrie  $SU(N)$ ,  $N > 2$  avec des bosons n'est pas courante à ce jour (en utilisant des états internes du composé). Mais la difficulté la plus grande est la réalisation d'une constante d'interaction (notée  $V$  plus loin) à premiers voisins suffisamment grande (possible par l'utilisation d'interactions dipolaires). Ainsi, les fermions sont plus indiqués, car ils se repoussent naturellement au point de former couramment des isolants avec le composé localisé en chaque site (isolant de bande pour certains remplissages). Cependant, à cause de leur statistique, seuls les spins demi-entiers sont accessibles pour une chaîne simple, rendant les phases topologiques de type Haldane inaccessibles avec des interactions très courtes portées. Même dans le cas de "spin"  $SU(N)$ , en localisant plus d'un composé par site, seule une anti-symétrisation de ceux-ci est possible à cause de leur nature fermionique<sup>1</sup>. Il est alors impossible, singulets mis à part, d'obtenir une "vraie" représentation de  $SU(N)$  en chaque site, excluant une fois encore d'obtenir une phase topologique. Il faut un degré de liberté supplémentaire sur lequel une symétrisation est

---

<sup>1</sup>En réalité, si chaque site est suffisamment large, i.e. si les niveaux d'énergies dues au réseau sont suffisamment proches les uns des autres, des symétrisations sont possibles [175, 176]. C'est dans une certaine mesure, la stratégie utilisée pour les modèles *p-band* et double-puits à venir.

## Chapitre 2. Le modèle du double-puits

---

possible pour pouvoir obtenir une chaîne effective de spin entier (et généralisation en "spin"  $SU(N)$ ) à partir de fermions. Dans ce chapitre, après avoir détaillé les composés utilisables avec la symétrie  $SU(N)$ , trois stratégies qui peuvent réaliser ce degré de liberté supplémentaire seront examinées, justifiant alors la sélection de la méthode retenue dans le reste de la thèse : la chaîne de double-puits.

## 2.1 Réalisation de la symétrie SU(N)

Parmi les fermions les plus utilisés dans les atomes froids, les alcalins sont les plus courants [177, 150]. Ceux-ci sont particulièrement adaptés à l'implémentation de la symétrie SU(2) de la phase de Haldane de spin 1. Dans le cas SU(N), les alcalino-terreux sont plus adaptés.

### 2.1.1 Par des alcalins

Les interactions entre alcalins, ou presque tous les autres atomes, sont déterminées, à basse température, par leurs électrons. Plus particulièrement, entre les électrons de valence (lorsque le concept s'applique), au nombre d'un seul pour tous les alcalins. Celui-ci (de spin  $S = 1/2$ ) rempli à moitié le niveau Xs (2s pour le lithium, 3s pour le sodium, etc) à l'état fondamental, et occupe le niveau Xp après une première excitation. C'est la structure électronique de l'atome. Les niveaux Xs, Xp, ... désignent les orbitales de l'atome, c'est-à-dire les niveaux de moment cinétique  $L$  (du système noyau et électron) différents. (L'opérateur de) ce dernier étant une représentation de SO(3) (et non SU(2) comme les spins), le moment cinétique total prend uniquement des valeurs entières (0 pour s, 1 pour p,...). Pour une description plus précise, il faut prendre en compte le couplage spin-orbite, c'est à dire le couplage qui existe entre le spin de l'électron et le champ magnétique créé par le mouvement de l'électron autour du noyau (dans l'image classique). Ce couplage a une intensité variable en fonction de l'espèce chimique, mais reste de la forme  $\vec{L} \cdot \vec{S}$ .  $L$  et  $S$  ne sont alors plus associés à de bons nombres quantiques, et il faut préférer le moment angulaire total  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  (et le Cartan <sup>2</sup>  $J^z$  associé). Ce dernier couplage n'a aucune influence sur les niveaux Xs (puisque  $L^2 = 0$ ), mais induit systématiquement des levées de dégénérescence dans les niveaux orbitaux supérieurs. Puisque l'invariance par renversement du temps n'est pas brisée, si le nombre d'électrons de valence est impair, chaque niveau reste au moins deux fois dégénéré (dégénérescence de Kramers). C'est la structure fine de l'atome. Dans le noyau, les nucléons eux-mêmes ont chacun un spin 1/2 et un moment angulaire les uns par rapport aux autres, et le même genre de construction est possible [178]. Le nombre de particules est cependant trop important pour pouvoir en faire une étude systématique, mais le moment angulaire nucléaire total peut néanmoins être observé expérimentalement. Il est entier (et souvent nul) pour les isotopes avec un nombre pair de nucléons et demi-entier pour un nombre impair de nucléons. Le bon nombre quantique du problème total est alors associé au moment angulaire atomique total  $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$  (et son Cartan  $F^z$ ). Celui-ci indexe la structure hyperfine de l'atome, cf Fig. 2.1 pour pour le lithium 6 et 7 (les deux seuls isotopes stables du lithium). L'espèce chimique est qualifiée de bosonique si  $F$  est entier, et fermionique sinon.

Ainsi, il est possible d'utiliser les deux niveaux d'énergie hyperfins du lithium 6 pour réaliser le cas  $N = 2$  de la chaîne à double-puits. Les techniques de réseaux optiques et de résonance de Feshbach magnétique sont particulièrement maîtrisés pour cette espèce. En se limitant

<sup>2</sup>Dans la suite, on nomme Cartans les opérateurs de la sous-algèbre de SU(N) qui commutent avec le ou les opérateurs de Casimir et entre eux. Il n'y a qu'un seul de ces opérateurs (linéairement indépendant) pour SU(2), deux pour SU(3), etc, et qui sont par convention explicités sous forme de matrices diagonales.

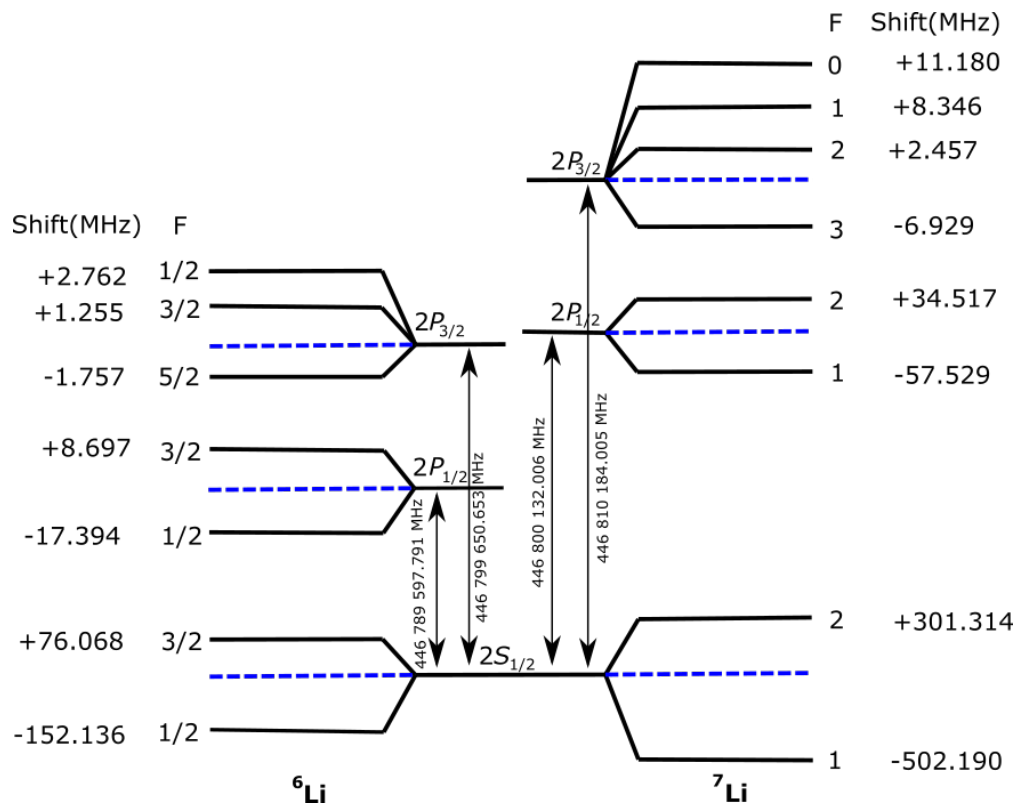


Figure 2.1 – Structure fine (au milieu) et hyperfine (sur les côtés) du lithium 6 (à gauche) et 7 (à droite).  $F$  est le moment angulaire atomique, et le shift d'un niveau hyperfin est donnée par rapport à la valeur (extrapolée) du niveau fin correspondant. Le moment angulaire nucléaire total est  $I = 1$  pour <sup>6</sup>Li et  $I = 3/2$  pour <sup>7</sup>Li. La figure, ainsi que les valeurs numériques (obtenues expérimentalement) sont adaptés de [179]. L'incertitude typique y est de l'ordre de 10kHz.

aux interactions entre deux atomes de lithium dans ces deux niveaux les plus bas, une seule longueur de diffusion peut être définie car les deux atomes fermioniques doivent avoir un nombre magnétique du moment atomique angulaire total différent. En principe, il est possible d'explorer le cas SO(5) (pour des fermions, la représentation de spin 3/2 y est isomorphe [180, 181]) ou SU(3) avec des alcalins de spin hyperfins  $F > 1/2$  [182], ce qui a déjà été réalisé expérimentalement (et très approximativement comparé aux alcalino-terreux) mais dans un cas très contraint [183, 184]. En effet, grâce à l'utilisation de plusieurs résonances de Feshbach, il est possible de rapprocher la longueur de diffusion sus-citée des deux autres longueurs de diffusion que l'on peut définir lorsqu'on autorise l'un des atomes à être dans un troisième état (le niveau  $m_F = -3/2$ <sup>3</sup> du niveau hyperfin supérieur en l'occurrence). Les trois niveaux d'énergie seront également (approximativement) égaux. L'égalité entre les niveaux d'énergie et les amplitudes de leurs interactions assure la symétrie (effective) SU(3) du système restreint à ces trois niveaux<sup>4</sup>. De tels systèmes sont trop approximatifs et engendrent par ailleurs trop

<sup>3</sup> $m_F$  étant le nombre quantique magnétique associé au spin  $F$ .

<sup>4</sup>Correspondant initialement à des spins de SU(2), même si les résonances de Feshbach induisent des hybridations empêchant le moment angulaire atomique total d'être un bon nombre quantique. La symétrie SU(3)

de pertes, comparés à certains alcalino-terreux.

### 2.1.2 Par des alcalino-terreux

Les alcalino-terreux (et assimilés, comme l'ytterbium) ont, quant à eux, deux électrons de valence. Ainsi, ceux-ci formeront un singulet magnétique à température ultrabasse, et donc de spin total  $S = 0$ . Puisqu'ils peuplent une orbital s, le moment cinétique est lui aussi nul  $L = 0$ , et donc  $F = I$  : il n'y a pas de structure hyperfine pour le niveau s. Il s'avère qu'à l'ordre dominant, le même phénomène se produit pour le premier état excité métastable : le spin nucléaire est découplé du spin électronique [185]. L'interaction entre deux de ces particules étant essentiellement pilotée par leurs électrons de valence, les longueurs de diffusions en ondes s (et le premier état excité) ne dépendront pas du spin nucléaire ainsi spectateur. Des interactions d'ordres supérieurs viendront briser légèrement cette symétrie. Dans le cas du strontium 87, la correction relative (à la longueur de diffusion) est estimée de l'ordre de  $10^{-9}$  pour l'orbital  $^3S_0$  et  $10^{-3}$  pour  $^3P_0$  [186, 187, 188, 189, 190, 191, 192, 193]. La généralisation de ce résultat à d'autres espèces d'alcalino-terreux est probable mais n'est pas immédiate (et reste à faire).

C'est ainsi que certains isotopes du strontium et de l'ytterbium peuvent effectivement réaliser la symétrie SU(N) (cf Tab. 2.1) grâce au spin nucléaire. Toutes les longueurs de diffusion en ondes s sont connues pour ces deux espèces [194, 195], et lorsqu'intervient l'état excité métastable [196, 197, 190, 191, 192]. Il est envisageable de réduire au besoin cette symétrie en préparant le système de telle manière à supprimer certains spins nucléaires. Ceux-ci ne seront pas (rapidement) régénérés précisément à cause de la conservation du nombre de chaque spin dû à la (plus grosse) symétrie SU(N) [191]. Cela peut d'ailleurs servir de test de la symétrie car le phénomène ne se produit pas si seule la symétrie SU(2) (même dans une représentation non fondamentale) est vérifiée.

Espèce d'alcalino-terreux	$^{87}\text{Sr}$	$^{173}\text{Yb}$	$^{171}\text{Yb}$
Spin nucléaire $I$	9/2	5/2	1/2
Symétrie ( $N = 2I + 1$ )	SU(10)	SU(6)	SU(2)
Longueur de diffusion homonucléaire en onde s (en nm)	5.10	10.55	-0.15

Table 2.1 – Tableau récapitulatif des trois principales espèces d'alcalino-terreux (ou assimilées) privilégiées pour la réalisation de la symétrie SU(N) dans des gaz fermioniques ultrafroids. Les valeurs des longueurs de diffusions sont évaluées par des expériences [194, 195] et données ici sans l'incertitude de mesure.

---

effective n'a donc absolument rien à voir avec les couleurs des quarks, à l'analogie près.

## 2.2 Dérivation du modèle discret du double-puits

Afin de pouvoir entamer des discussions (analytiques) plus avancées, il est indispensable de dériver un modèle (effectif) plus simple que la description en opérateur de champ, qui rend compte de la géométrie périodique de la seule chaîne étudiée en détails : un modèle discret dont il faut examiner les symétries.

### 2.2.1 Fonctions de Wannier

La description en termes d'opérateurs de champ (fermioniques) est plus aisée en seconde quantification. L'opérateur (de création) qui décrit un atome dans l'état  $\alpha$  s'écrit alors :  $\psi_\alpha^\dagger(\vec{r})$ . Dans le cas des alcalino-terreux,  $\alpha$  peut désigner à la fois le "spin" (nucléaire)  $SU(N)$  et prendre  $N$  valeurs, et aussi l'orbitale électronique,  $^3S_0$  et  $^3P_0$  pour le strontium par exemple. Pour le modèle double-puits, ce dernier degré de liberté dit "orbital" n'est pas utile, et la totalité des atomes sont supposés être dans l'orbitale  $s$ . Les opérateurs de champ vérifient les relations d'anti-commutation fermioniques habituelles :

$$\{\psi_\alpha^\dagger(\vec{r}), \psi_\beta^\dagger(\vec{r}')\} = 0 \quad (2.1a)$$

$$\{\psi_\alpha^\dagger(\vec{r}), \psi_\beta(\vec{r}')\} = \delta_{\alpha\beta} \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2.1b)$$

où  $\delta_{\alpha\beta}$  est le symbole de Kronecker et  $\delta^{(3)}$  la distribution de Dirac tridimensionnelle. Le hamiltonien pilotant la dynamique d'une seule particule dans le réseau optique est alors [198] :

$$\mathcal{H}_0 = \sum_\alpha \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r} \psi_\alpha^\dagger(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{latt}}(\vec{r}) \right) \psi_\alpha(\vec{r}), \quad (2.2)$$

où  $m$  est la masse de l'atome et  $V_{\text{latt}}$  est le potentiel du réseau en double-puits, donné par :

$$V_{\text{latt}}(\vec{r}) = V_{0y} (\sin^2(ky) + r_y \cos^2(2ky)) + V_{0x} \sin^2(2kx) + V_{0z} \sin^2(2kz), \quad (2.3)$$

représentée Fig. 2.2 (à droite) où  $1/k$  est la longueur d'onde réduite et  $r_y$  un paramètre réglable, tous deux pilotés différemment en fonction du potentiel optique choisi : soit un réseau dichromatique [199], soit en utilisant l'interférence entre deux faisceaux laser polarisés différemment [200].  $V_{0y}$  et  $V_{0z}$  sont supposés suffisamment grands (par rapport à  $V_{0x}$ ) pour considérer les chaînes (selon  $x$ ) indépendantes les unes des autres. Celles-ci peuvent soit être utilisées pour faire des répliques ou des moyennes sur les réalisations, soit être complètement ignorées au profit d'une seule chaîne.

L'équation aux valeurs propres induites par le hamiltonien à une particule Eq. 2.2 est à variables séparables et peut donc être résolue direction par direction. Pour la direction  $z$ , deux approches quantitativement équivalentes sont possibles. D'une part, considérer la périodicité

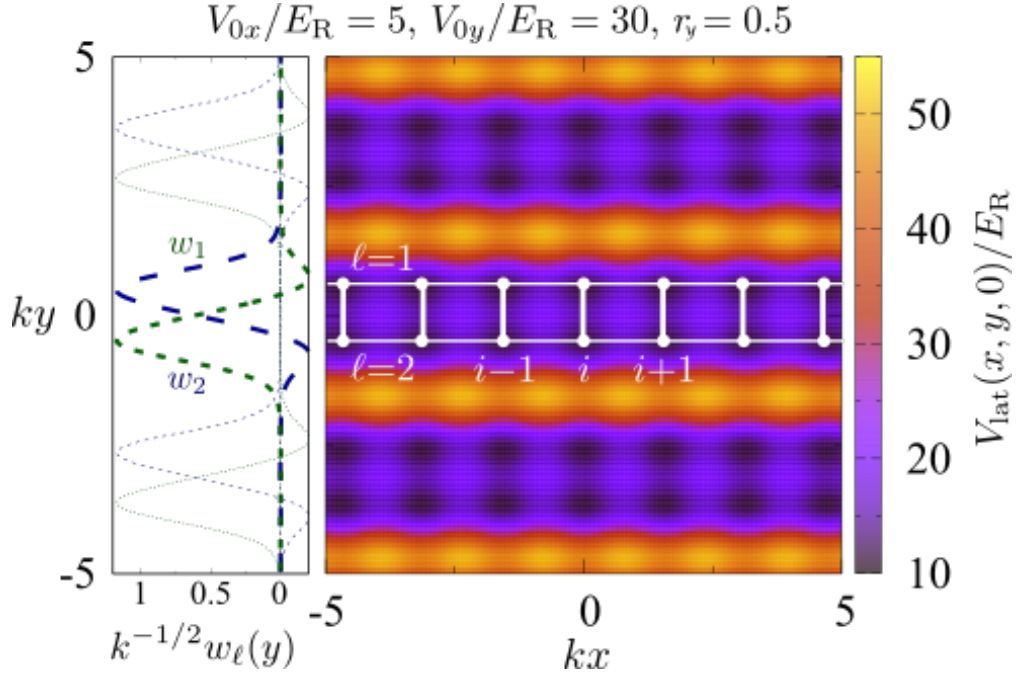


Figure 2.2 – (à droite) : Potentiel du réseau optique dans le plan  $xy$  : trois échelles (chaînes de double-puits) sont visibles. Les allures des deux fonctions de Wannier orthonormales  $w_1(y)$  et  $w_2(y)$  dans la direction  $y$  sont tracées à gauche (en vert et bleu) et les fonctions sont centrées sur l'un ou l'autre des deux puits d'une échelle. Les longueurs et les énergies sont exprimées en unités de la longueur d'onde réduite  $1/k$  et de l'énergie de recul  $E_R = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Le potentiel illustré conduit aux paramètres discrets :  $t_\perp / t = 2.9$  et  $V/U = 0.086$ .

du réseau dans cette direction <sup>5</sup> puis utiliser la base de Wannier [201, 149]. D'autre part, puisque les chaînes sont isolées les unes des autres, cette direction du potentiel peut être approximée par un puits harmonique et l'équation aux valeurs propres devient :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_z^2 + \frac{1}{2} m \omega_z^2 z^2 \right) \phi_{n_z}(z) = \epsilon_{n_z} \phi_{n_z}(z), \quad (2.4)$$

où  $\phi_{n_z}(z)$  est la "dépendance fonctionnelle selon  $z$ " de l'opérateur de champ donnée par une gaussienne pondérée d'un polynôme de Hermite, d'énergie  $\epsilon_{n_z} = \hbar \omega_z (n_z + 1/2)$  où  $n_z \in \mathbb{N}$  et  $\omega_z = 2k\sqrt{2V_{0z}/m}$ . Si on ne garde que le premier niveau d'énergie (ce qui n'est pas le cas du modèle p-bande, cf Sec. 2.3.2) pour lequel  $n_z = 0$ , la dépendance est donc purement gaussienne d'étendue  $\sigma \sim \sqrt{\hbar/m\omega_z}$ . Le même traitement est possible pour la direction  $y$ , à l'existence du double-puits près. L'expression analytique de l'ensemble du spectre de ce dernier n'est jusqu'à présent pas connue [202] mais peut être déterminée numériquement. Par ailleurs, la moitié du spectre correspond à des solutions paires et l'autre moitié à des solutions impaires. Dans l'hypothèse où l'écart en énergie entre l'état fondamental (forcement pair) et le premier état excité impair est petit, en particulier par rapport à l'écart avec le premier état

<sup>5</sup>Les effets de bords dus à la gaussianité du faisceau laser dans cette direction, ainsi que dans la direction  $y$  sont complètement négligeables dans cette expérience qui se concentre surtout sur une chaîne suivant  $x$ .



excité pair, il est possible de prendre la combinaison symétrique et antisymétrique des deux premiers états propres pour obtenir des fonctions d'ondes quasi états propres du potentiel localisés dans l'un ou l'autre des puits. Un résultat similaire est obtenu en considérant directement des fonctions de Wannier [198] et ainsi, deux fonctions de Wannier,  $w_1(y)$  et  $w_2(y)$  sont obtenues (et peuvent être choisies indépendantes du "spin"  $\alpha$ ). L'allure de l'amplitude de ces fonctions d'ondes est donnée Fig. 2.2. Leur allure dépend surtout de la forme du fond du puits en général, justifiant ainsi l'approximation harmonique, mais pour  $r_y \sim 0.5$ , l'approche par fonction de Wannier est significativement plus précise. L'index  $\ell = 1, 2$  désignera l'un ou l'autre des puits et constitue ainsi un degré de liberté "orbital" artificiel. Enfin, dans la direction de la chaîne où la périodicité doit explicitement être prise en compte, le théorème de Bloch s'applique [203, 201] :

**Théorème de Bloch** - Soit  $V(x)$  un potentiel de périodicité  $x_0$ , c'est-à-dire tel que  $V(x + x_0) = V(x)$  (ici,  $x_0 = \pi/2k$ ), alors il existe une base de solution de l'équation de Schrödinger (pour le hamiltonien indépendant du temps) de la forme :

$$\psi_{k_x, \sigma}(x) = e^{i k_x x} u_{k_x, \sigma}(x) \quad (2.5)$$

où  $k_x \in PZB$ <sup>6</sup> est la quasi-impulsion de l'état propre,  $u_{k_x, \sigma}(x)$  est une fonction de période  $x_0$  et l'indice  $\sigma$  permet de différencier les différents états propres correspondants à une même énergie  $E_k$  (et donc regroupe tous les types d'indices introduits jusqu'à présent) et en plus, l'indice de bande. Ces fonctions d'onde sont appelées les fonctions d'ondes de Bloch [204].

Dans la suite, les états seront tous systématiquement dans la première bande, et l'énergie nécessaire pour atteindre la seconde est supposée grande par rapport aux autres énergies du problème. Les fonctions de Wannier  $\{w_\sigma(x - X_i)\}_{i, \sigma}$ <sup>7</sup> (où  $X_{i+1} - X_i = a_0$  avec  $X_0$  conventionnellement choisi au centre d'un puits, de telle sorte que  $i$  labelle le site) sont définis sur tout l'espace à partir de la transformée de Fourier de cet état propre sur la première zone de Brillouin :

$$w_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k_x \in PZB} \psi_{k_x, \sigma}(x). \quad (2.6)$$

L'ensemble de ces états forme une base complète de l'espace de Hilbert à une particule, lesquels sont centrés autour de  $X_i$  au moins pour la bande la plus basse en énergie (comme pour le traitement approximatif avec le potentiel harmonique qui aura lui tous ses états

---

<sup>6</sup>PZB signifie Première Zone de Brouillouin et contient toutes les quasi-impulsions de l'inverse de la taille de la chaîne périodique au pas du réseau. Dans le cas (à suivre) d'une chaîne considérée infinie mais sans condition périodique (où le théorème peut s'appliquer), il s'agit explicitement de l'intervalle  $[-\pi/a_0; \pi/a_0]$ , où  $a_0$  est la taille du pas du réseau.

<sup>7</sup>La dénomination de la fonction  $w$  est réutilisée ici sans ambiguïté avec les fonctions  $w_\ell(y)$ , différentes a priori, qui portent sur une autre direction.

localisés au centre). La condition d'orthonormalisation s'écrit :

$$\int_{\mathbb{R}} dx w_{\sigma}^*(x - X_i) w_{\sigma'}(x - X_j) = \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{ij}. \quad (2.7)$$

Cette base est idéale pour concevoir le problème sous forme de particules interagissantes (d'extension spatiale limitée) et avec une description discrète. Dans le cas de la chaîne de double-puits,  $\sigma = (\ell, \alpha)$  et chaque opérateur de champ à une particule peut être exprimé en fonction des opérateurs (fermioniques) discrets de création et d'annihilation d'une particule de "spin"  $\alpha$  au puits  $\ell$  de site  $i$  :  $c_{\alpha\ell,i}^{\dagger}$ ,  $c_{\alpha\ell,i}$ , et s'exprime de la manière suivante :

$$\psi_{\alpha}^{\dagger}(x, y, z) = \sum_{\ell,i} w_{\alpha}(x - X_i) w_{\ell}(y) \phi_0(z) c_{\alpha\ell,i}^{\dagger}, \quad (2.8)$$

ou, en utilisant exclusivement des fonctions de Wannier depuis le début, et en remarquant comme pour la direction  $y$  que les fonctions de Wannier ne dépendent pas du spin nucléaire :

$$\psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) = \sum_{\ell,i} W_{\ell}(\vec{r} - \vec{R}_i) c_{\alpha\ell,i}^{\dagger}, \quad (2.9)$$

où les  $W_{\ell,i}$  sont les fonctions de Wannier tridimensionnelles et  $\vec{R}_i$  la position des sites. En ne sélectionnant qu'une chaîne, il est possible de réécrire le hamiltonien 2.2 sous la forme suivante <sup>8</sup> :

$$H_0 \approx -t \sum_i \sum_{\ell\alpha} \left( c_{\ell\alpha,i}^{\dagger} c_{\ell\alpha,i+1} + h.c. \right) - t_{\perp} \sum_i \sum_{\alpha} \left( c_{1\alpha,i}^{\dagger} c_{2\alpha,i} + h.c. \right) - \mu \sum_i n_i \quad (2.10)$$

où  $n_i = \sum_{\ell\alpha} c_{\alpha\ell,i}^{\dagger} c_{\alpha\ell,i}$  est le nombre d'atome de tout type au site, ou barreau, ou *rung*  $i$  et où les paramètres expérimentaux  $t, t_{\perp}, \mu$  sont donnés par les intégrales de recouvrement des fonctions de Wannier associées :

$$-t = \int d^3\vec{r} W_1^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{latt}}(\vec{r}) \right) W_1(\vec{r} - \vec{x}_0), \quad (2.11a)$$

$$-t_{\perp} = \int d^3\vec{r} W_1^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{latt}}(\vec{r}) \right) W_2(\vec{r}), \quad (2.11b)$$

$$-\mu = \int d^3\vec{r} W_1^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{latt}}(\vec{r}) \right) W_1(\vec{r}). \quad (2.11c)$$

Ces paramètres ne dépendent pas de  $\alpha$  car les fonctions de Wannier n'en dépendent pas non plus, ils ne dépendent pas de  $\ell$  d'après la symétrie  $y \rightarrow -y$  qui laisse le hamiltonien invariant et ils ne dépendent pas du site  $i$  puisque le hamiltonien est invariant par translation. Enfin, ils peuvent être pris réels sans perte de généralité (quitte à redéfinir les opérateurs de création et d'annihilation). Les *hopping* plus lointain qu'aux plus proches voisins, ou interchaînes, sont d'emblée négligés car le recouvrement des fonctions de Wannier correspondantes est néglige-

---

<sup>8</sup>J'utiliserai désormais la lettre H cursive pour désigner tous types de hamiltoniens continus dans l'espace réel (comme jusqu'à présent ou après la limite continue du chapitre suivant, densité de hamiltonien ou non) et le H droit pour les hamiltoniens discrets dans l'espace réel.

able. Le modèle avec le seul *hopping*  $t$  est le modèle des liaisons fortes [205] pour "fortement lié au site". Puisque l'allure des fonctions de Wannier est déterminée par le potentiel du réseau et que ces paramètres dépendent des fonctions de Wannier, il s'agit véritablement de paramètres expérimentaux réglables. La dépendance n'est cependant ni simple et ni explicite (régime extrême mis à part) et leur obtention se fait donc numériquement [206].

En utilisant la même reformulation pour les termes d'interactions, il est possible de les réécrire sous forme discrète. En ne se restreignant qu'aux interactions de contacts, et aux seules diffusions à deux corps : deux atomes ne différant que par leur spin nucléaire dans les hypothèses choisies jusqu'à présent, le potentiel d'interactions du processus  $X$  s'écrit :

$$V_X^{\text{int}}(\vec{r}, \vec{r}') = g_X \delta^{(3)}(\vec{r}, \vec{r}') \quad (2.12)$$

où  $g_X$  est l'amplitude du processus (celui-là même qui peut potentiellement être changé par résonance de Feshbach) et qui vérifie  $g_X = g$  pour tous les processus de spin nucléaire différent d'après la Sec. 2.1.2. Le terme d'interaction est donc :

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = g \sum_{\alpha < \beta} \int d^3\vec{r} \psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}) \psi_{\beta}(\vec{r}) \psi_{\alpha}(\vec{r}), \quad (2.13)$$

qui se réécrit sous la forme discrète suivante :

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} = & \frac{U}{2} \sum_i \sum_{\ell=1}^2 \sum_{\alpha \neq \beta} n_{\ell\alpha,i} n_{\ell\beta,i} \\ & + V \sum_i \sum_{\alpha \neq \beta} \left\{ n_{1\alpha,i} n_{2\beta,i} + c_{1\alpha,i}^{\dagger} c_{2\beta,i}^{\dagger} c_{1\beta,i} c_{2\alpha,i} + \frac{1}{2} \left( c_{1\alpha,i}^{\dagger} c_{1\beta,i}^{\dagger} c_{2\beta,i} c_{2\alpha,i} + \text{h.c.} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

où  $n_{\ell\alpha,i} = c_{\ell\alpha,i}^{\dagger} c_{\ell\alpha,i}$  (sans somme) et où l'interaction sur site  $U$  et l'interaction entre puits  $V$  sont données par :

$$U = g \int d^3\vec{r} |W_1(\vec{r})|^4 \quad (2.15a)$$

$$V = g \int d^3\vec{r} |W_1(\vec{r})|^2 |W_2(\vec{r})|^2 \quad (2.15b)$$

qui ne dépendent pas non plus de  $\alpha$  et  $\ell$  pour les mêmes raisons que  $t$ ,  $t_{\perp}$  et  $\mu$ . D'autres termes d'interactions existent et sont négligeables, comme par exemple le terme de saut assisté par la densité [207] qui dépend de  $\int W_1^*(\vec{r}) W_2(\vec{r}) |W_2(\vec{r})|^2$  et est fortement supprimé par le changement de signe des fonctions de Wannier (100 fois moins important au moins pour les espèces considérées). Le hamiltonien discret total du modèle double-puits est donc :

$$H_{\text{dw}} = H_0 + H_{\text{int}}. \quad (2.16)$$

### 2.2.2 Modèle de Hubbard généralisé

Une manière plus graphique de comprendre le hamiltonien 2.16 est donné par la Fig. 2.3. Chaque terme du hamiltonien peut être compris directement dans le contexte discretisé.

$\mu$  est le potentiel chimique. Il est contrôlé expérimentalement en modifiant le remplissage du réseau, c'est à dire en ajoutant ou retirant des atomes dans l'expérience. On définit le remplissage comme étant le rapport entre nombre d'atomes présents par le nombre d'états disponibles étant données les hypothèses posées jusqu'à présent, c'est à dire, avant de peupler des bandes d'énergie supérieures. Pour le double-puits avec la symétrie  $SU(N)$ , le nombre d'états possibles est  $2NL$ . Le remplissage est dit commensurable lorsque le rapport est fractionnaire, le plus souvent  $1/2$  ou  $1/N$ . Il est dit incommensurable sinon. Ce dernier régime ne permet pas au système sur réseau de concevoir un "motif" qui puisse être répété le long de la chaîne (qui nécessite un nombre entier d'atomes par motif) rendant une phase ordonnée et gappée impossible. Les phases sans gap qui peuvent néanmoins apparaître se distinguent les unes des autres par des "instabilités dominantes", qui peuvent être comprises comme un reliquat, ou un précurseur, d'une phase ordonnée qui ne peut pas s'établir. L'étude incommensurable de modèles proches du double-puits par la méthode de faible couplage présentée Chap. 3 a été réalisée dans le cadre de cette thèse : Ref. [208], et sera publiée dans un article ultérieur pour le cas du double-puits. Cependant, puisqu'un tel régime ne peut donner lieu à une phase gappée et donc à une phase topologique de type Haldane, cette étude ne sera pas détaillée dans le présent manuscrit.

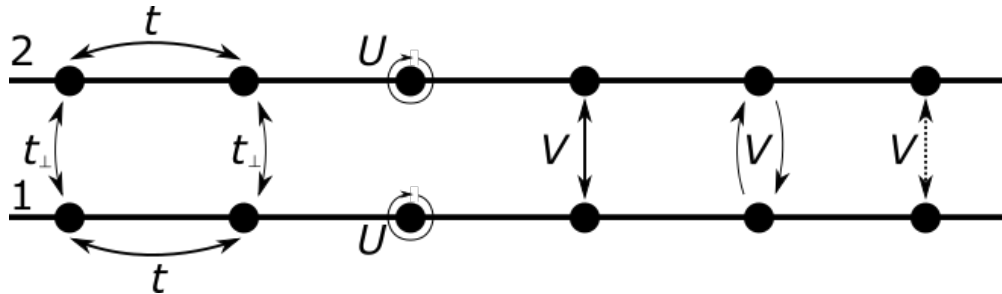


Figure 2.3 – Représentation graphique du modèle d'échelle de double-puits.

$t$  est l'amplitude de *hopping* longitudinal. Il autorise la mobilité des particules le long de la chaîne et permet ainsi au nombre de particules par site de changer dynamiquement (le nombre moyen étant fixé par le remplissage). Dans le régime de faible couplage, c'est lui qui pilote la majorité des propriétés du système, et c'est son influence qu'il faut contrer pour obtenir un isolant de Mott en fort couplage. C'est un paramètre qui est complètement déterminé par la forme détaillée du réseau choisi puisqu'il est obtenu d'après l'Eq. 2.11a qui fait intervenir à la fois les fonctions de Wannier et directement le potentiel optique. Le même constat s'applique au *hopping* transversal  $t_{\perp}$ , qui rend compte de la différence d'énergie entre les combinaisons liantes et anti-liantes des deux états localisés dans chacun des puits du double-puits, et agit comme un champ magnétique pour ces combinaisons. Le hamiltonien

## Chapitre 2. Le modèle du double-puits

---

sans interaction est diagonalisable dans ces combinaisons et après transformation de Fourier comme abordé Sec. 3.1.1.

$U$  est l'amplitude de l'interaction de Hubbard, caractéristique du modèle éponyme [209], faisant du modèle de double-puits un modèle de Hubbard généralisé. Si  $U > 0$ , cette interaction est une répulsion entre atome dans un même puits (une attraction dans le cas négatif). Afin de diminuer la délocalisation d'une particule sur la chaîne rendue possible par  $t$  et donc la localiser dans un puits, c'est cette interaction qu'il faut maximiser. L'amplitude est contrôlée par la forme du réseau optique mais aussi potentiellement par résonance de Feshbach et peut grâce à cette dernière être modifiée (relativement) indépendamment des *hopping* et donc pouvoir atteindre le régime de fort couplage dans lequel la phase de Haldane est attendue. C'est également le cas de l'amplitude d'interaction  $V$  dont l'action est triple (dans le cas  $V > 0$ ) :

- une répulsion entre atomes d'un des deux puits sur un site vis-à-vis des atomes du second,
- une interaction de "super-échange" entre ces mêmes deux puits, c'est-à-dire la permutation entre le spin nucléaire total contenu dans un puits et le second. Cette interprétation est légèrement plus compliquée lorsque la représentation de  $SU(N)$  n'est pas la même dans chacun des deux puits, et sera abordée Chap. 4.
- le *hopping* simultané de deux atomes de l'un des puits vers celui d'en face.

Ces trois actions sont d'ailleurs plus évidentes en réécrivant le hamiltonien d'interaction Eq. 2.14 sous une forme plus courante dite du "modèle d'échelle" :

$$H_{\text{int}} = \frac{U}{2} \sum_i \sum_{\ell=1}^2 n_{\ell,i}^2 + V \sum_i \left( \left( 1 - \frac{1}{N} \right) n_{1,i} n_{2,i} - 2S_1^A S_2^A \right) - \frac{V}{2} \sum_i \sum_{\alpha,\beta} \left( c_{1\alpha,i}^\dagger c_{2\alpha,i} c_{1\beta,i}^\dagger c_{2\beta,i} + h.c. \right) \quad (2.17)$$

où  $n_{\ell,i} = \sum_{\alpha} c_{\ell\alpha,i}^\dagger c_{\ell\alpha,i}$  est le nombre d'atomes dans le puits  $\ell$  du site  $i$ ,  $S_{\ell i}^A = \sum_{\alpha\beta} c_{\ell\alpha,i}^\dagger T_{\alpha\beta}^A c_{\ell\beta,i}$  est l'opérateur de spin dans le puits  $\ell$  du site  $i$  où  $T_{\alpha\beta}^A$  sont les  $N^2 - 1$  générateurs du groupe de Lie  $\mathfrak{su}(N)$  (voir Ann. A pour plus de détails). Pour atteindre le régime de la phase de Haldane, il faut que cette amplitude  $V$  soit positive mais inférieure à  $U$  (cf Chap 4). En effet, dans le régime de fort couplage avec des fermions de spin 1/2 où  $U$  est la quantité (positive) la plus importante, les fermions auront tendance, au demi-remplissage, à se localiser sur un site différent chacun. Pour une amplitude  $V$  sous-dominante par rapport à  $U$  et positive, la première des trois actions de  $V$  ne suffit pas à modifier cette localisation, tandis que la troisième action est effectivement nulle. Seule la deuxième action induit un couplage antiferromagnétique entre les deux spins 1/2 qui se font face dans chaque barreau les appariant effectivement en un spin 1. Une chaîne effective de spin 1 en chaque site est ainsi obtenue, et l'action perturbative du (petit) paramètre restant  $t$  s'avère induire un couplage antiferromagnétique entre chacun de

ces spins<sup>9</sup>. La chaîne de Heisenberg antiferromagnétique de spin 1, prompt à faire apparaître la phase de Haldane est ainsi obtenue. Ce dernier régime est atteint (théoriquement) dans la Ref. [198] (réalisée dans le cadre de cette thèse) pour lequel  $t_{\perp}/t = 2.9$ ,  $V/U = 0.086$ . Modifier la forme du double-puits permet de modifier ces deux derniers rapports, et la forme proposée dans Ref. [198] est proche du cas idéal.

### 2.2.3 Symétries du hamiltonien

Puisque les symétries du hamiltonien sont responsables des quantités conservées (des nombres quantiques), les identifier permet de construire, au moins partiellement, l'Ensemble Complet d'Observables qui Commutent (ECOC) et donc de proposer une base qui diagonalise (par bloc si l'ECOC est incomplet) le hamiltonien. Les identifier permet également de comprendre une partie des propriétés de la totalité des phases qui peuvent apparaître : lorsque la symétrie est continue, puisque celle-ci ne peut pas être brisée spontanément (i.e. sans un terme qui brise explicitement la symétrie dans le hamiltonien), la quantité conservée correspondante reste un bon nombre quantique. Par ailleurs, si le hamiltonien possède des symétries discrètes, celle-ci peuvent être brisées spontanément et autoriser ainsi une phase gappée. C'est bien sûr le cas du hamiltonien du double-puits qui reste invariant par translation discrète (notée  $\mathbb{Z}$ ) :

$$\forall \ell, \alpha, i, \quad c_{\ell\alpha, i} \rightarrow c_{\ell\alpha, i+1}. \quad (2.18)$$

Cette symétrie n'est rigoureusement vérifiée que pour le cas d'une chaîne infinie, ou pour des conditions aux limites périodiques, mais peut être considérée comme valide pour une chaîne suffisamment grande. Une autre symétrie discrète existe, celle qui échange les degrés de liberté orbitaux indexés par  $\ell$  et notée  $\mathbb{Z}_2$  :

$$\forall \alpha, i, \quad \begin{cases} c_{1\alpha, i} & \rightarrow & c_{2\alpha, i}, \\ c_{2\alpha, i} & \rightarrow & c_{1\alpha, i}. \end{cases} \quad (2.19)$$

De même, le hamiltonien est invariant par renversement du temps  $t \rightarrow -t$  car il est indépendant du temps et ne fait intervenir que des carrés d'opérateurs de spin. Dans le cas de la chaîne infinie (ou périodique), la symétrie d'inversion  $i \rightarrow -i$  est également vérifiée. Ces symétries sont déjà compatibles avec la phase de Haldane d'après Sec. 1.3.2.

La symétrie nucléaire  $SU(N)$  vient renforcer ce trait, et se traduit pour le hamiltonien discret par son invariance par la transformation unitaire  $\tilde{U}$  :

$$\forall \ell, \alpha, i \text{ et } \forall \tilde{U} \in SU(N) \quad c_{\ell\alpha, i} \rightarrow \sum_{\beta} \tilde{U}_{\alpha\beta} c_{\ell\beta, i}. \quad (2.20)$$

Cette symétrie assure (entre autres) la conservation du spin nucléaire total de la chaîne  $S^A = S_1^A + S_2^A$  où  $S_{\ell}^A = \sum_i S_{\ell, i}^A$ , et ces opérateurs commutent naturellement avec le hamiltonien

---

<sup>9</sup>Plus de détails Chap. 4.

## Chapitre 2. Le modèle du double-puits

---

:

$$\forall A \in \llbracket 1, N^2 - 1 \rrbracket, [S^A, H_{dw}] = 0. \quad (2.21)$$

La charge totale (c'est-à-dire le nombre d'atome total) de la chaîne est également conservée grâce à la symétrie de charge U(1) (parfois notée U(1)<sub>c</sub> pour ne pas confondre avec une autre symétrie discutée par la suite) qui se traduit par l'invariance du hamiltonien vis-à-vis de la transformation :

$$\forall \ell, \alpha, i \text{ et } \forall \theta \in [0; 2\pi[ \quad c_{\ell\alpha,i} \rightarrow e^{i\theta} c_{\ell\alpha,i}, \quad (2.22)$$

et donc :

$$\left[ \sum_i n_i, H_{dw} \right] = 0. \quad (2.23)$$

Pour discuter des autres symétries du hamiltonien 2.14 plus cachées et utiliser l'expression obtenue par la suite, il est préférable de se placer dans la base (anti-)liante :

$$d_{1\alpha,i}, d_{2\alpha,i} = (c_{1\alpha,i} \mp c_{2\alpha,i}) / \sqrt{2}. \quad (2.24)$$

Dans cette base, le hamiltonien s'écrit :

$$\begin{aligned} H_{dw} = & -t \sum_{\ell\alpha,i} \left( d_{\ell\alpha,i+1}^\dagger d_{\ell\alpha,i} + h.c. \right) - t_\perp \sum_{\ell\alpha,i} (-1)^l \left( d_{\ell\alpha,i}^\dagger d_{\ell\alpha,i} \right) - \tilde{\mu} \sum_i \tilde{n}_i \\ & + \frac{\tilde{U}}{2} \sum_{\ell,i} \tilde{n}_{\ell,i}^2 + \tilde{V} \sum_i \tilde{n}_{1,i} \tilde{n}_{2,i} + \tilde{J}_H \sum_i \sum_{A=1}^{N^2-1} \tilde{S}_{1,i}^A \tilde{S}_{2,i}^A + \tilde{W} \sum_{\alpha\beta,i} \left( d_{2\alpha,i}^\dagger d_{1\alpha,i} d_{2\beta,i}^\dagger d_{2\beta,i} + h.c. \right), \end{aligned} \quad (2.25)$$

où :

$$\tilde{U} = \frac{U}{2} + \frac{3V}{2}, \quad (2.26a)$$

$$\tilde{V} = \frac{U-V}{2} \left( 1 - \frac{1}{N} \right), \quad (2.26b)$$

$$\tilde{J}_H = V - U, \quad (2.26c)$$

$$\tilde{W} = \frac{U-V}{4}, \quad (2.26d)$$

et où les autres quantités tildées sont les mêmes quantités que celles définies précédemment, mais dans les variables  $d$ . Pour plus de lisibilité, ces tildes seront omises dans toute la suite et ainsi, sauf mention contraire (pour les résultats numériques notamment), la totalité des raisonnements dans la suite se basent sur cette formulation des fermions  $d$ . Alternativement,

## 2.2. Dérivation du modèle discret du double-puits

le hamiltonien peut être formulé sous la forme d'un modèle *p-band* [210, 211, 212] avec :

$$H_{dw} = -t \sum_{\ell\alpha,i} \left( d_{\ell\alpha,i+1}^\dagger d_{\ell\alpha,i} + h.c. \right) + 2t_\perp \sum_i T_i^z - \left( \mu + \frac{U+V}{2} \right) \sum_i n_i + \frac{U+V}{4} \sum_i n_i^2 + 2V \sum_i (T_i^z)^2 + (U-V) \sum_i (T_i^x)^2, \quad (2.27)$$

où :

$$T_i^j = \sum_{\ell\ell'\alpha} d_{\ell\alpha,i}^\dagger \frac{\sigma_{\ell\ell'}^j}{2} d_{\ell'\alpha,i} \text{ avec } j \in \{x, y, z\}, \quad (2.28)$$

sont les opérateurs du "spin SU(2) orbital" et  $\sigma_{\ell\ell'}^j$  sont les matrices de Pauli usuelles définies Ann. A.2. A demi-remplissage, régime traité dans le reste du manuscrit,  $\mu = (N-1)(U+V)/2$ , pour lequel il-y-a en moyenne  $N$  fermions par barreau.

Il apparaît alors que lorsque  $U = V$ , la symétrie  $U(1)_o$  correspondant à la transformation :

$$\forall \ell, \alpha, i \text{ et } \forall \theta \in [0; 2\pi[ \quad c_{\ell\alpha,i} \rightarrow e^{i(-1)^\ell \theta} c_{\ell\alpha,i}, \quad (2.29)$$

laisse le hamiltonien invariant. Cette symétrie correspond à la conservation de la différence entre le nombre d'atome dans la chaîne 2 et la chaîne 1 (ou du nombre d'états liants (occupés) par le nombre d'états anti-liants dans les variables  $c$ ) :

$$\left[ \sum_i T_i^z, H_{dw} \right] = 0. \quad (2.30)$$

Couplée avec la symétrie de charge, elle assure de manière équivalente la conservation individuelle du nombre d'atomes sur la chaîne 1 et la chaîne 2. Cette symétrie devient encore plus grande lorsque  $V = 0$  et  $t_\perp = 0$  où elle devient  $SU(2)_o$  qui, couplée à la symétrie  $\mathbb{Z}_2$  d'échange entre 1 et 2 devient  $U(2)_o$ . Le cas correspond alors à deux chaînes de Hubbard indépendantes moins intéressantes *a priori*. Cette symétrie  $U(2)_o$ , couplée à  $U(1)_c$  et  $SU(N)$  peut même s'agrandir en  $U(2N)$  en chaque site lorsque... seul le terme en potentiel chimique subsiste dans le hamiltonien. Évidemment, ce cas n'est plus du tout intéressant mais illustre la symétrie (continue) maximale que peut avoir le hamiltonien. Cela signifie également que quelque-soit les symétries (continues) émergentes qui peuvent apparaître dans les divers hamiltoniens effectifs obtenus par la suite, celles-ci seront forcément un sous-groupe de  $U(2N)$ .



## 2.3 Les implémentations alternatives avec les alcalino-terreux

La configuration du double-puits n'est pas la seule à aboutir à un modèle d'échelle avec une symétrie  $SU(N)$  en utilisant des alcalino-terreux. Deux autres méthodes sans double-puits : le modèle  $g$ - $e$  et le modèle  $p$ -band sont également envisageables et présentées (et comparées) dans cette section.

### 2.3.1 Le modèle $g$ - $e$

Lors de la dérivation du modèle précédent, la totalité des atomes n'occupaient que l'orbitale électronique la plus basse notée  $g$  ( $^3S_0$  pour le strontium). Mais d'après la Sec. 2.1.2, un des premiers niveaux électroniques notée  $e$ , l'orbitale  $^3P_0$  pour le strontium, une orbitale  $p$  de moment angulaire total ( $J$ ) nul, est elle aussi découplée du spin nucléaire et autorise la symétrie  $SU(N)$ . Ce niveau métastable de temps moyen de désexcitation spontané de plusieurs centaines de secondes [213] constitue, s'il est autorisé avec l'orbitale  $s$ , un degré de liberté supplémentaire qui joue le rôle de degré de liberté orbital<sup>10</sup> et peut ainsi remplacer l'utilisation de double-puits. En autorisant les opérateurs de champ initiaux à occuper ces deux niveaux d'énergie (les opérateurs sont alors notés  $\psi_{ma}(\vec{r})$  où  $m = g, e$  est l'indice orbital), le même type de dérivation que dans la Sec. 2.2.1 est possible à la différence près que les fonctions de Wannier dépendent ici de cet indice supplémentaire. De plus, indépendamment du spin nucléaire, jusqu'à quatre processus d'interactions (de contact) sont désormais disponibles : entre deux particules dans l'état  $g$ , deux dans l'état  $e$ , la première dans l'état  $g$  avec la seconde dans l'état  $e$  et le contraire. En supposant la conservation du moment cinétique total au cours du processus, les états finaux seront les mêmes que les états initiaux, sauf pour les deux derniers où une permutation est possible. En notant  $\{|gg\rangle, |ee\rangle, |ge\rangle, |eg\rangle\}$  les quatre configurations initiales, le tenseur de l'amplitude d'interaction  $g_X$ <sup>11</sup> dans cette base s'écrit alors :

$$g_X = \begin{pmatrix} g_{gg} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{ee} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_{ge \rightarrow ge} & g_{eg \rightarrow ge} \\ 0 & 0 & g_{ge \rightarrow eg} & g_{eg \rightarrow eg} \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

où, par symétrie  $g_{ge \rightarrow ge} = g_{eg \rightarrow eg}$  et  $g_{eg \rightarrow ge} = g_{ge \rightarrow eg}^*$ . La matrice est diagonalisable et ses valeurs propres sont forcément réelles (en l'absence de pertes) puisqu'ils sont proportionnels à quatre longueurs de diffusion observables. Les deux valeurs propres obtenues après

---

<sup>10</sup>C'est de ce modèle que vient la dénomination du degré de liberté.

<sup>11</sup>Un tel tenseur existe aussi pour le spin nucléaire et est proportionnel à l'identité dans le régime d'approximation choisi.

diagonalisation sont  $g_{ge}^{\pm} = g_{ge \rightarrow ge} \pm g_{eg \rightarrow ge}$ . Le hamiltonien discret s'écrit alors :

$$H_{g-e} = - \sum_{m,\alpha,i} t_m \left( c_{m\alpha,i}^{\dagger} c_{m\alpha,i+1} + h.c. \right) - \sum_{m,i} \mu_m n_{m,i} + \sum_{m,i} \frac{U_m}{2} n_{m,i}^2 + V \sum_i n_{g,i} n_{e,i} + V_{\text{ex}} \sum_{\alpha\beta,i} c_{g\alpha,i}^{\dagger} c_{e\beta,i}^{\dagger} c_{g\beta,i} c_{e\alpha,i}, \quad (2.32)$$

où :

$$-t_m = \int d^3\vec{r} W_m^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{latt}}(\vec{r}) \right) W_m(\vec{r} - \vec{x}_0), \quad (2.33a)$$

$$-\mu_m = \int d^3\vec{r} W_m^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{latt}}(\vec{r}) \right) W_m(\vec{r}), \quad (2.33b)$$

$$U_m = g_{mm} \int d^3\vec{r} |W_m(\vec{r})|^4, \quad (2.33c)$$

$$V = \frac{g_{ge}^+ + g_{ge}^-}{2} \int d^3\vec{r} |W_g(\vec{r})|^2 |W_e(\vec{r})|^2, \quad (2.33d)$$

$$V_{\text{ex}} = \frac{g_{ge}^+ - g_{ge}^-}{2} \int d^3\vec{r} |W_g(\vec{r})|^2 |W_e(\vec{r})|^2. \quad (2.33e)$$

Le hamiltonien est représenté Fig. 2.4. Il dispose des mêmes symétries que le modèle double-puits avec en plus la symétrie  $U(1)_o$  sans *fine tuning*, mais sans la symétrie d'échange  $\mathbb{Z}_2$  qui peut être régénérée en imposant l'égalité des *hopping*, des potentiels chimiques et des amplitudes  $U_m$  (peu réaliste expérimentalement).

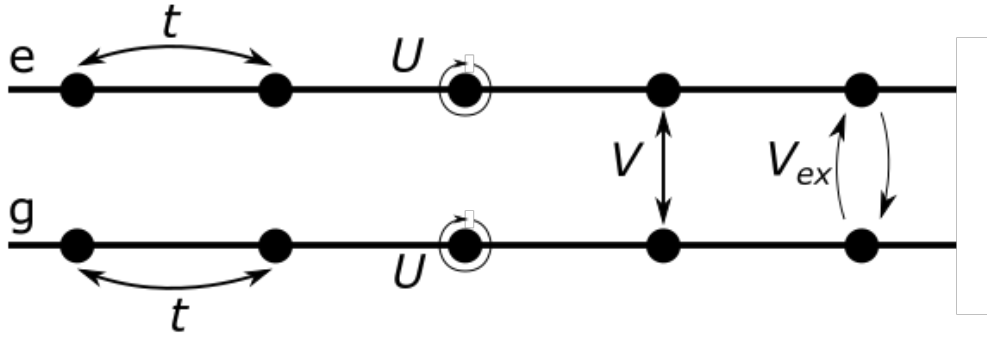


Figure 2.4 – Représentation graphique du modèle g-e. Il n'y a pas de *hopping* transversal.

### 2.3.2 Le modèle p-band

Il est également possible de n'utiliser qu'une chaîne et de ne pas utiliser l'orbitale électronique excitée des alcalino-terreux mais à la place, utiliser les deux premières bandes p du réseau optique. En remplissant totalement les  $NL$  états de la bande s du réseau, il est possible de remplir les premières bandes d'énergie supérieures de celui-ci, à savoir la bande p dans la direction  $y$  et la bande p dans la direction  $z$ . Il est expérimentalement aisé de rendre

ces deux bandes identiques en utilisant exactement le même montage laser dans ces deux directions. La dérivation du modèle discret est très similaire aux dérivations précédentes, avec la particularité cette fois-ci de considérer (exclusivement) les bandes d'indices  $(n_y, n_z) = (1, 0)$  ou  $(0, 1)$ . Les fonctions de Wannier seront donc différentes en fonction des bandes, mais se transforment l'une en l'autre par échange de la direction  $Oy$  et  $Oz$ <sup>12</sup> pour des potentiels optiques identiques dans ces deux directions. Les intégrales sur les fonctions de Wannier étant invariantes par ces transformations, les paramètres du problème ne dépendront pas de l'indice de bande. Le hamiltonien du modèle  $p$ -band [210, 211, 212] obtenu est alors :

$$H_{p\text{-band}} = -t \sum_{m\alpha, i} (c_{m\alpha, i}^\dagger c_{m\alpha, i+1} + h.c.) - \mu \sum_i n_i + \frac{U_1 + U_2}{2} \sum_i n_i^2 + \sum_i [2U_2 (T_i^x)^2 + (U_1 - U_2) (T_i^z)^2], \quad (2.34)$$

où  $m = p_y, p_z$  est cette fois-ci l'indice de bande, et où :

$$-t = \int d^3\vec{r} W_m^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{latt}}(\vec{r}) \right) W_m(\vec{r} - \vec{x}_0), \quad (2.35a)$$

$$U_1 = g \int d^3\vec{r} |W_m(\vec{r})|^4, \quad (2.35b)$$

$$U_2 = g \int d^3\vec{r} |W_{p_y}(\vec{r})|^2 |W_{p_z}(\vec{r})|^2. \quad (2.35c)$$

Le hamiltonien Eq. 2.34 est représenté Fig. 2.5 et est le même que le hamiltonien Eq. 2.27 au terme de *hopping* transversal près. Les deux possèdent donc naturellement les mêmes symétries.

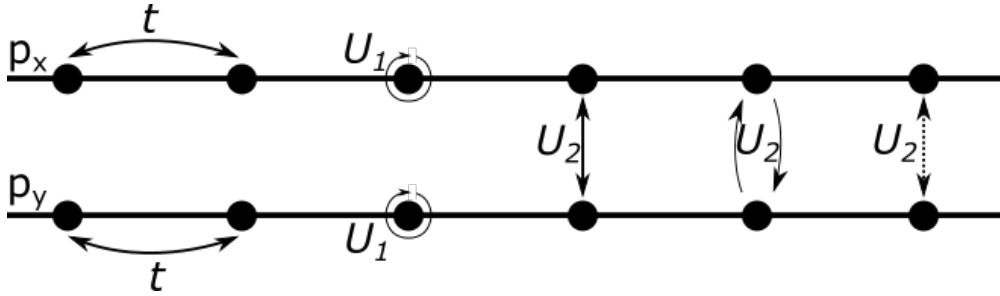


Figure 2.5 – Représentation graphique du modèle  $p$ -band. Il n'y a pas de *hopping* transversal.

### 2.3.3 Comparaisons

Les trois modèles sont vraisemblables et peuvent donner lieu à des expériences et tous sont intéressants. En fonction de l'objectif de l'expérience, l'un ou l'autre de ces modèles est préférable. L'option du double-puits a ainsi été choisie parce qu'elle permet le plus facilement d'atteindre le régime de phase topologique recherché. Il est difficile de le voir dans le cas du

<sup>12</sup>soit une rotation et une symétrie de réflexion.

### 2.3. Les implémentations alternatives avec les alcalino-terreux

---

modèle g-e dont le hamiltonien est relativement différent des deux autres mais dans le cas du modèle double-puits et *p-band*, la marge de manœuvre autorisée par résonance de Feshbach est essentiellement la même. Les fonctions de Wannier seront différentes en fonction de la bande, mais l'ampleur des variations d'allure de celles-ci sont comparables. Le modèle double-puits, en modifiant la forme du double-puits a cependant ce levier supplémentaire qui le favorise (même si celui-ci s'avère être inutilisé). La deuxième grande raison vient des pertes. Le modèle g-e fait naturellement intervenir des collisions e-e pour lesquels les pertes sont significatives par rapport aux autres types de collisions [188]. Le modèle *p-band* nécessite de remplir intégralement la première bande qui est alors vouée à devenir une source de pollution des bandes supérieures et de collisions à température non rigoureusement nulle en plus de piocher dans le nombre d'atomes par ailleurs limité pour remplir le rôle de figurant et réduire ainsi la taille de la chaîne utilisable pour rester à demi remplissage. Plus marginalement, le modèle g-e a l'avantage de demander le montage optique pour créer le réseau le plus simple même s'il demande en échange un dispositif de résonance de Feshbach potentiellement important pour régénérer la symétrie d'échange favorisant la phase SPT recherchée. Le problème de légère brisure de la symétrie  $SU(N)$  de l'orbitale e est secondaire.

## 2.4 Résumé du chapitre

Ainsi, la symétrie  $SU(N)$  est bien plus facile à obtenir en utilisant des alcalino-terreux plutôt que des alcalins, puisque leur structure fine est donnée pour le spin nucléaire découplé de la structure électronique de ces atomes (pour l'orbitale  $s$ ). Les longueurs de diffusion entre ces atomes seront donc indépendantes de ce spin nucléaire assurant ainsi la symétrie  $SU(N)$  sans montage expérimental dédié. La géométrie d'échelle peut-être obtenue par un potentiel optique créant des chaînes de double-puits. Pour étudier le comportement d'un gaz ultra-froid de ces alcalino-terreux dans un tel potentiel, il est possible de dériver un hamiltonien discret grâce aux fonctions de Wannier. Après changement de base dans la base liante et anti-liante, ce hamiltonien s'écrit :

$$H_{\text{dw}} = -t \sum_{\ell\alpha,i} \left( d_{\ell\alpha,i+1}^\dagger d_{\ell\alpha,i} + h.c. \right) + 2t_\perp \sum_i T_i^z - \left( \mu + \frac{U+V}{2} \right) \sum_i n_i + \frac{U+V}{4} \sum_i n_i^2 + 2V \sum_i (T_i^z)^2 + (U-V) \sum_i (T_i^x)^2, \quad (2.36)$$

où,  $t$  est le *hopping* longitudinal,  $t_\perp$  est le *hopping* transversal,  $\mu$  est le potentiel chimique,  $U$  pilote l'interaction sur site de Hubbard et  $V$  pilote à la fois un terme de Hubbard d'un site vis-à-vis de celui qui lui fait face, un terme de superéchange et un terme de *hopping* simultané de deux atomes d'un puits vers celui qui lui fait face.  $d_{\ell\alpha,i}$  est l'opérateur d'annihilation d'une particule de spin  $\alpha = 1 \dots N$  sur le puits  $\ell = 1, 2$  du barreau  $i$ . Les opérateurs  $T_i^j$  vérifient :

$$T_i^j = \sum_{\ell\ell'\alpha} d_{\ell\alpha,i}^\dagger \frac{\sigma_{\ell\ell'}^j}{2} d_{\ell'\alpha,i} \text{ avec } j \in \{x, y, z\}. \quad (2.37)$$

où les  $\{\sigma_{\ell\ell'}^j\}_{j=x,y,z}$  sont les matrices de Pauli usuelles.

Ce hamiltonien est non seulement invariant par la symétrie de "spin"  $SU(N)$  qui conserve le spin total de la chaîne mais aussi notablement par la symétrie de charge  $U(1)_c$  qui conserve le nombre de particule total dans la chaîne et la symétrie d'échange entre les deux montants de l'échelle ( $1 \leftrightarrow 2$ ).

Bien que la réalisation expérimentale du modèle du double-puits est l'option la plus prometteuse pour obtenir une phase de Haldane et ses généralisations, d'autres possibilités existent. C'est le cas du modèle  $g$ - $e$  qui utilise le premier niveau électronique excité de spin nul en plus du niveau fondamental comme degré de liberté qui vient remplacer l'utilisation du double-puits. Ce modèle engendre plus de pertes que le précédent en plus de ne pas naturellement vérifier la symétrie d'échange, le rendant moins compétitif. La troisième option est le modèle  $p$ -band qui, lui, utilise les deux premières bandes (les bandes  $p$  transversales) du réseau au delà de la bande fondamentale utilisée précédemment qu'il faut alors remplir. L'indice de bande devient le degré de liberté qui caractérise le modèle. Celui-ci engendrera aussi trop de pertes pour se comparer au premier modèle.

### 3 L'approche de couplage faible

Les propriétés globales caractéristiques d'un système à température nulle sont naturellement déterminées par ses états à basse énergie. Ce constat se répète pour des températures plus élevées mais à condition de partir du bon modèle effectif et avec une plus grande emphase sur la statistique. Dans les deux cas, l'approche de théorie des champs s'est avérée particulièrement efficace pour décrire de tels systèmes dans le cadre du paradigme de Ginzburg-Landau mais aussi au delà lorsqu'elle explique les phénomènes d'excitations fractionnaires ou de séparation spin-charge [32]. De manière plus pragmatique, cette approche permet de calculer plus facilement des quantités physiques telles que les fonctions de corrélations, la susceptibilité magnétique ou la chaleur spécifique [214] puisqu'elle se concentre sur les propriétés à grandes longueurs d'onde du système naturellement plus susceptibles d'en expliquer les propriétés globales. De la même manière, il est possible d'aboutir sur une théorie des champs (effective) en partant du modèle discret du double-puits en effaçant les plus petites longueurs du système, c'est-à-dire, en faisant "tendre le pas du réseau vers zéro" tout en veillant à la préservation des symétries caractéristiques du modèle initial. La théorie des champs ainsi obtenue constituera une bonne description du système initial à condition de ne pas sonder des longueurs trop petites (i.e. des vecteurs d'onde trop grands) comparées à une longueur seuil  $\Lambda^{-1}$  : le *cut-off*. Cette théorie des champs s'avère être conforme (avant perturbation), qualité particulièrement utile à 1 + 1 dimensions car intégrable, en plus de proposer un schéma de renormalisation, technique typique de théorie des champs. Cette technique permet de trouver à quelle classe d'universalité<sup>1</sup> chaque ensemble de paramètres expérimentaux appartient ainsi que les propriétés dites universelles qui caractérisent cette classe. Au demi-remplissage, il est quasi-systématique d'observer l'ouverture de gaps, donc les propriétés dont il est question concerne en priorité le motif induit par ces gaps alors que toutes les fonctions de corrélations sont naturellement exponentiellement décroissantes. En associant une phase à une classe, il est ainsi possible de tracer un premier diagramme de phase du système valide dans le régime

---

<sup>1</sup>On parle d'ici de classe d'universalité dans le sens où on peut définir une relation d'équivalence entre chaque représentant de la classe : ils ont le même comportement infrarouge i.e. de basse énergie. Il ne s'agit *pas* de la classe d'universalité au sens de Wilson Ref. [215] qui correspond à un comportement invariant d'échelle où tous les modèles microscopiques sont tous caractérisées par de mêmes exposants critiques. Cette dernière définition suppose une phase critique et ne s'applique donc pas pour les phases gappées dont on parle dans la suite.

d'approximations qui autorise tout ce raisonnement : le couplage faible, c'est-à-dire le régime où l'effet du *hopping* longitudinal est dominant par rapport aux interactions limitées à un seul barreau (*rung*). Les résultats obtenus seront confirmés par une méthode numérique : le *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG) [216] qui n'est pas limitée à ce seul régime de paramètre, mais qui ne permet pas toujours une identification claire du comportement du système sans une approche analytique complémentaire.

*Cette approche ne s'avère pas aboutir à l'étude de la phase topologique qui apparaît exclusivement dans le régime de couplage fort pour le double-puits. Puisqu'elle a fait l'objet d'une grande partie de cette thèse, elle est décrite ici, mais de manière trop succincte pour le lecteur non spécialiste. Pour une introduction complète à la théorie conforme des champs, voir Ref. [217] et pour son application plus détaillée aux trois modèles introduits Chap. 2, voir [218, 219]. Une étude de ce couplage faible pour des modèles proches peut être trouvée Ref. [208] pour le cas incommensurable, tandis que la Ref. [220] contient le demi-remplissage du modèle double-puits (et potentiellement le cas incommensurable, sinon dans un article qui lui succèdera).*

### 3.1 Théorie des champs conformes

Il s'agit donc d'obtenir une théorie des champs effectives en prenant correctement la limite continue du modèle double-puits de l'Eq. 2.25 dans le cas extrapolée du régime où le *hopping* est dominant : le cas libre, sans interaction. Puisque la théorie des champs s'avère être conforme, il est possible d'utiliser un outil formel très utile : les *Operator Product Expansions* [217], ou OPEs, pour non seulement calculer les fonctions de corrélations, mais aussi d'obtenir les équations de renormalisation, une fois les interactions réintroduites perturbativement. Il faut ensuite résoudre (numériquement) ces équations pour obtenir le diagramme de phases.

#### 3.1.1 Limite continue de la théorie libre

Le modèle sans interaction du double-puits est donné par le hamiltonien Eq. 2.25 (sans les interactions, i.e. pour  $\tilde{U} = \tilde{V} = \tilde{J}_H = \tilde{W} = 0$ ). Ce hamiltonien est diagonalisable dans la base de Fourier  $\hat{d}_{\ell\alpha,k}$  donnée pour une chaîne infinie par :

$$d_{\ell\alpha,j} = \sqrt{\frac{a_0}{2\pi}} \int_0^{\frac{2\pi}{a_0}} dk \hat{d}_{\ell\alpha,k} e^{ik a_0 j}, \quad (3.1a)$$

$$\hat{d}_{\ell\alpha,k} = \sqrt{\frac{a_0}{2\pi}} \sum_{j \in \mathbb{Z}} d_{\ell\alpha,j} e^{-ik a_0 j}, \quad (3.1b)$$

qui vérifie les relations de commutations fermioniques usuelles :

$$\{d_{\ell\alpha,i}, d_{\ell'\beta,j}^\dagger\} = \delta_{\ell\ell'} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}, \quad (3.2a)$$

$$\{\hat{d}_{\ell\alpha,k}, \hat{d}_{\ell'\beta,k'}^\dagger\} = \delta_{\ell\ell'} \delta_{\alpha\beta} \delta(k - k'). \quad (3.2b)$$

Le hamiltonien sans interaction devient alors :

$$H_0 = \sum_{\ell\alpha} \int_0^{\frac{2\pi}{a_0}} dk \epsilon_\ell(k) \hat{d}_{\ell\alpha,k}^\dagger \hat{d}_{\ell\alpha,k}, \quad (3.3)$$

où  $\{\epsilon_\ell(k)\}_k$  est le spectre du hamiltonien qui vérifie :

$$\epsilon_\ell(k) = -2t \cos(a_0 k) - (-1)^\ell t_\perp - \mu. \quad (3.4)$$

Il est dès lors possible de tracer les deux bandes fondamentales du modèle Fig. 3.1.

Puisque les excitations de plus basses énergies sont les plus susceptibles d'intervenir à basse énergie, il est possible de linéariser la relation de dispersion autour des quatre points de Fermi



repérés par les vecteurs de Fermi  $\pm k_F^\ell = \pm (k_F - (-1)^\ell \delta/2)$  où :

$$k_F = \frac{k_F^1 + k_F^2}{2} = \frac{\pi \bar{n}}{a_0 N}, \quad (3.5a)$$

$$\delta = \frac{2}{a_0} \arcsin\left(\frac{t_\perp}{4t \sin(a_0 k_F)}\right), \quad (3.5b)$$

avec  $\bar{n}$  le remplissage. Il est alors possible de définir quatre couples d'opérateurs de création et d'annihilation autour de ces quatre points :

$$R_{\ell\alpha}(p) = \hat{d}_{\ell\alpha, k_F^\ell + p} \quad R_{\ell\alpha}^\dagger(p) = \hat{d}_{\ell\alpha, k_F^\ell + p}^\dagger, \quad (3.6a)$$

$$L_{\ell\alpha}(p) = \hat{d}_{\ell\alpha, -k_F^\ell + p} \quad L_{\ell\alpha}^\dagger(p) = \hat{d}_{\ell\alpha, -k_F^\ell + p}^\dagger, \quad (3.6b)$$

où quatre vides sont implicitement définis (tous les états sont occupés jusqu'à l'énergie de Fermi) et correspondent ensemble à l'état fondamental du modèle sans interaction et sont notés  $|0\rangle$ . Après linéarisation, le hamiltonien devient :

$$H_0 = - \sum_{\ell\alpha} \left[ v_F^\ell a_0 \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dp p \left( L_{\ell\alpha}^\dagger(p) L_{\ell\alpha}(p) - R_{\ell\alpha}^\dagger(p) R_{\ell\alpha}(p) \right) \right. \\ \left. + \tilde{\mu}^\ell a_0 \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dp \left( L_{\ell\alpha}^\dagger(p) L_{\ell\alpha}(p) + R_{\ell\alpha}^\dagger(p) R_{\ell\alpha}(p) \right) \right], \quad (3.7)$$

avec  $\tilde{\mu}^\ell = -\frac{1}{a_0} (\mu + (-1)^\ell t_\perp + 2t \cos(k_F^\ell a_0))$  et  $v_F^\ell = 2t \sin(k_F^\ell a_0)$ . Quitte à étendre l'intégrale sur tout l'espace des phases, processus souvent compris comme faire tendre le pas du réseau vers zéro, et donc autorisant le cut-off  $\Lambda$  à être plus grand, le hamiltonien continu noté  $\mathcal{H}_0$  est enfin obtenu en prenant la transformée de Fourier inverse de ces quatre types d'opérateur :

$$L_{\ell\alpha}(p) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a_0}} \int_{-\infty}^{\infty} dx L_{\ell\alpha}(x) e^{-ipx}, \quad L_{\ell\alpha}^\dagger(p) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a_0}} \int_{-\infty}^{\infty} dx L_{\ell\alpha}^\dagger(x) e^{ipx}, \quad (3.8a)$$

$$R_{\ell\alpha}(p) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a_0}} \int_{-\infty}^{\infty} dx R_{\ell\alpha}(x) e^{-ipx}, \quad R_{\ell\alpha}^\dagger(p) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a_0}} \int_{-\infty}^{\infty} dx R_{\ell\alpha}^\dagger(x) e^{+ipx}, \quad (3.8b)$$

où chaque opérateur vérifie les relations de commutations usuelles des fermions, pour donner le hamiltonien dans sa représentation dans l'espace réel :

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{\ell\alpha} \left[ \frac{v_F^\ell}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \left( L_{\ell\alpha}(y)^\dagger L_{\ell\alpha}(x) - R_{\ell\alpha}(y)^\dagger R_{\ell\alpha}(x) \right) \int_{-\infty}^{\infty} dp p e^{ip(y-x)} \right. \\ \left. + \frac{\tilde{\mu}^\ell}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \left( L_{\ell\alpha}(y)^\dagger L_{\ell\alpha}(x) + R_{\ell\alpha}(y)^\dagger R_{\ell\alpha}(x) \right) \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ip(y-x)} \right] \quad (3.9)$$

qui doit être correctement régularisé grâce à l'ordre normal noté  $::$  et défini temporairement

de la manière suivante :

$$A(y)B(x) = \langle A(y)B(x) \rangle + :A(y)B(x): \quad (3.10a)$$

$$= \langle A(y)B(x) \rangle + :AB:(x) + (y-x) : \partial_y(A)B:(x) + \mathcal{O}((y-x)^2) \quad (3.10b)$$

avec  $\langle A(y)B(x) \rangle$  le corrélateur à deux points qui diverge en général lorsque  $y \rightarrow x$  et qu'il faut supprimer car ils interviennent pour des longueurs bien en deçà du pas du réseau. L'ordre normal régularise donc cette divergence et la supprime. Le hamiltonien régularisé devient :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = - \sum_{\ell\alpha} \left[ (-i)v_F^\ell \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( : \partial_x(L_{\ell\alpha}^\dagger)L_{\ell\alpha}:(x) - : \partial_x(R_{\ell\alpha}^\dagger)R_{\ell\alpha}:(x) \right) \right. \\ \left. + \tilde{\mu}^\ell \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( : L_{\ell\alpha}^\dagger L_{\ell\alpha}:(x) + : R_{\ell\alpha}^\dagger R_{\ell\alpha}:(x) \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Afin de supprimer l'*off-set* d'énergie de la mer de Fermi, il est d'usage de fixer l'énergie du vide à zéro, et obtenir la forme usuelle du hamiltonien continu à basse énergie :

$$\mathcal{H}_0 = -i \sum_{\ell\alpha} v_F^\ell \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left( : R_{\ell\alpha}^\dagger(x) \partial_x R_{\ell\alpha}(x) : - : L_{\ell\alpha}^\dagger(x) \partial_x L_{\ell\alpha}(x) : \right). \quad (3.12)$$

Ce hamiltonien aurait pu être obtenu plus directement en prenant :

$$d_{\ell\alpha,j}^\dagger \sim \sqrt{a_0} \left[ e^{-ik_F^\ell x} R_{\ell\alpha}^\dagger(x) + e^{ik_F^\ell x} L_{\ell\alpha}^\dagger(x) \right], \quad (3.13)$$

qui est une conséquence du raisonnement précédent, et qui est particulièrement efficace pour obtenir la formulation continue des termes d'interactions encore manquants.

### 3.1.2 Champs conformes

Pour trouver la dépendance temporelle des opérateurs de champ précédents, le plus simple est de partir de la densité de hamiltonien implicitement définie dans l'Eq. 3.7 à la fois diagonale et indépendante du temps. Les énergies des états  $R_{\ell\alpha}^\dagger|0\rangle$  et  $L_{\ell\alpha}^\dagger|0\rangle$  sont donc :

$$\epsilon_{R,\ell\alpha}(p) = v_F^\ell a_0 p, \quad (3.14a)$$

$$\epsilon_{L,\ell\alpha}(p) = -v_F^\ell a_0 p, \quad (3.14b)$$

où les termes de potentiels chimiques n'interviennent pas étant donnée la définition du vide. Alors, en notant  $x_R = x - v_F^\ell t$ , coordonnée pilotant toute la dynamique globale d'un objet se déplaçant de la gauche vers la droite (ou *right-mover*) et  $x_L = x + v_F^\ell t$  coordonnée du *left-mover*<sup>2</sup>, la dernière transformée de Fourier permet d'intégrer la dépendance temporelle dans les opérateurs de champs  $R_{\ell\alpha}$  et  $L_{\ell\alpha}$  ainsi fonction des variables  $x_R$  et  $x_L$  respectivement. Le

<sup>2</sup>La dépendance dans l'indice de montant  $\ell$  peut être négligée pour simplifier le traitement analytique général ici et dans la définition de la variable holomorphe et antiholomorphe à suivre. Dans le cas du demi-remplissage du double-puits, les deux vitesses sont exactement égales et le problème ne se pose pas.

même résultat peut-être obtenu en remarquant que, pour  $\ell$  et  $\alpha$  donnés, les deux opérateurs constituent les deux composantes d'un bispineurs de Dirac dont les équations d'évolutions données par les équations de Lagrange sont :

$$\frac{\partial R_{\ell\alpha}(x_R, x_L)}{\partial x_L} = 0, \quad (3.15a)$$

$$\frac{\partial L_{\ell\alpha}(x_R, x_L)}{\partial x_R} = 0. \quad (3.15b)$$

Il est alors possible [221, 222], grâce à une rotation de Wick, de transformer le problème quantique à une dimension et à température nulle mais avec une dépendance temporelle, en un problème statistique à deux dimensions spatiales seulement. La rotation s'écrit :  $t \rightarrow -i\tau$  où  $\tau$  est le "temps statistique" et les nouvelles variables deviennent les deux quantités complexes suivantes :

$$z = v_F^\ell \tau + ix, \quad (3.16a)$$

$$\bar{z} = v_F^\ell \tau - ix. \quad (3.16b)$$

La dérivation par rapport à ces variables est notée  $\partial$  et  $\bar{\partial}$  respectivement. La trajectoire classique vérifie alors les équations  $\partial R_{\ell\alpha} = 0$  et  $\bar{\partial} L_{\ell\alpha} = 0$  rendant les opérateurs droits et gauches<sup>3</sup> antiholomorphes et holomorphes respectivement. L'action associée, définie périodiquement sur le temps statistique de  $\tau = 0$  à  $\tau = \beta$  où  $\beta$  est l'inverse de la température, s'écrit alors :

$$\mathcal{S}_0 = \sum_{\ell\alpha} \int_{\mathbb{C}} dz d\bar{z} \left( : R_{\ell\alpha}^\dagger \partial R_{\ell\alpha} : + : L_{\ell\alpha}^\dagger \bar{\partial} L_{\ell\alpha} : \right). \quad (3.17)$$

Cette action est particulièrement commode parce qu'elle est invariante par les transformations conformes de l'espace-temps qui, à 1+1 D disposent d'une infinité de générateurs holomorphes et antiholomorphes notés :

$$\ell_n = -z^{n+1} \partial, \quad (3.18a)$$

$$\bar{\ell}_n = -\bar{z}^{n+1} \bar{\partial}, \quad (3.18b)$$

avec  $n \in \mathbb{Z}$  et qui vérifient une algèbre de Witt [217]. Parmi eux, les plus couramment cités sont les générateurs des translations  $\ell_{-1}$  (de même pour le générateur antiholomorphe), des rotations et dilatations  $\ell_0$  et des inversions ou transformations conformes spéciales  $\ell_1$ . Non seulement une infinité de quantités conservées peuvent alors être définies, mais l'invariance conforme donne aussi la dépendance des fonctions de corrélations d'opérateurs primaires définis comme étant les opérateurs  $\mathcal{O}(z, \bar{z})$  qui par les transformations holomorphes et antiholomorphes  $\omega = f(z), \bar{\omega} = g(\bar{z})$  se comportent de la manière suivante :

$$\mathcal{O}'(\omega, \bar{\omega}) = \left( \frac{d\omega}{dz} \right)^{-h} \left( \frac{d\bar{\omega}}{d\bar{z}} \right)^{-\bar{h}} \mathcal{O}(z, \bar{z}), \quad (3.19)$$

---

<sup>3</sup>Sur la trajectoire "réelle" ou "classique" par opposition aux trajectoires "virtuelles" qui apparaissent dans l'action 3.17 et utilisent donc des opérateurs qui dépendent des deux variables.

où  $h$  et  $\bar{h}$  sont respectivement les dimensions conformes holomorphes et antiholomorphes. Ainsi, les opérateurs de création et d'annihilation droits sont primaires de dimensions conformes  $(0, 1/2)$  tandis que les opérateurs gauches sont de dimensions  $(1/2, 0)$ . En se limitant pour simplifier aux opérateurs holomorphes seulement, tels que  $A(z)$  et  $B(\omega)$  il est possible de développer en série de Laurent [217] (p173) le produit ordonné des deux opérateurs :

$$\mathcal{R}(A(z)B(\omega)) = \sum_{n=-\infty}^N \frac{\{AB\}_n(\omega)}{(z-\omega)^n} \quad (3.20)$$

où  $\mathcal{R}$  est l'ordre radial, c'est-à-dire l'identité si  $|z| > |\omega|$ , mais qui permute les deux opérateurs et change le signe dans le cas contraire. Cet ordre est la version conforme de l'ordre temporel du théorème de Wick [217] (p35). Par ailleurs, les opérateurs  $\{AB\}_n(\omega)$  sont donnés par la formule de Cauchy :

$$\{AB\}_n(\omega) = \frac{1}{2i\pi} \oint_{\omega} \frac{A(z)B(\omega)}{(z-\omega)^{1-n}} dz, \quad (3.21)$$

où l'intégrale est réalisée autour du pôle  $\omega$ . De la même manière que pour le théorème de Wick, il est alors possible de définir plus proprement l'ordre normal :  $AB :$  et la contraction  $\overline{AB}$  par :

$$:A(z)B(\omega): = \sum_{n=-\infty}^0 \frac{\{AB\}_n(\omega)}{(z-\omega)^n}, \quad (3.22a)$$

$$\overline{A(z)B(\omega)} = \sum_{n=1}^N \frac{\{AB\}_n(\omega)}{(z-\omega)^n}, \quad (3.22b)$$

qui séparent les termes réguliers et singuliers. L'*Operator Product Expansion* ou OPE (développement en produit d'opérateur) notée " $\sim$ " entre deux opérateurs ordonnés est alors définie comme étant la contraction de ces opérateurs :

$$A(z)B(\omega) \sim \overline{A(z)B(\omega)}. \quad (3.23)$$

De même, le terme régulier d'ordre le plus bas est le terme d'ordre normal usuel défini en un point  $\{AB\}_0(\omega) = :AB:(\omega)$ . Le théorème de Wick implique alors que la valeur moyenne sur le vide de Fermi (noté  $|0\rangle$  plus haut) du produit ordonné des deux opérateurs est exactement la contraction des deux. Ainsi :

$$L_{\ell\alpha}^{\dagger}(z)L_{m\beta}(\omega) \sim \langle L_{\ell\alpha}^{\dagger}(z)L_{m\beta}(\omega) \rangle = \frac{\delta_{\ell m}\delta_{\alpha\beta}}{2\pi(z-\omega)}, \quad (3.24a)$$

$$R_{\ell\alpha}^{\dagger}(\bar{z})R_{m\beta}(\bar{\omega}) \sim \langle R_{\ell\alpha}^{\dagger}(\bar{z})R_{m\beta}(\bar{\omega}) \rangle = \frac{\delta_{\ell m}\delta_{\alpha\beta}}{2\pi(\bar{z}-\bar{\omega})}. \quad (3.24b)$$

Ce résultat n'est valable que pour une théorie conforme mais peut être utilisé pour un traitement perturbatif des interactions qui brisent, eux, la symétrie conforme. Par ailleurs, ce type de décomposition est généralisable pour un opérateur de dimensions conformes  $(h, \bar{h})$ . Grâce

### Chapitre 3. L'approche de couplage faible

---

à ce type d'opération, il est possible d'écrire la partie interaction du hamiltonien 2.25 sous forme continue. Pour rendre le résultat obtenu plus explicite, il est utile de décomposer les interactions en courants (locaux de la symétrie  $U(2N)$ ) de Wess-Zumino-Witten comme fait pour l'échelle de Hubbard  $SU(2)$  dans Ref. [223]. Plusieurs décompositions sont possibles en fonction du prolongement conforme <sup>4</sup> (*conformal embedding*) choisi [217] (p733). Deux s'avéreront être utiles par la suite. D'une part le prolongement conforme en chaque secteur orbital :

$$U(2N) \sim (U(1) \times SU(N)_1)_1 \times (U(1) \times SU(N)_1)_2. \quad (3.25)$$

Par exemple, les courants  $L$  et  $R$  associés à la symétrie  $U(1)_c$  pour chaque secteur orbital s'écrivent :

$$J_{\ell L}(z) = \sum_{\alpha} : L_{\ell\alpha}^{\dagger}(z) L_{\ell\alpha}(z) :, \quad (3.26a)$$

$$J_{\ell R}(\bar{z}) = \sum_{\alpha} : R_{\ell\alpha}^{\dagger}(\bar{z}) R_{\ell\alpha}(\bar{z}) :. \quad (3.26b)$$

D'autre part, le prolongement conforme plus naturel pour rendre compte de la potentielle symétrie orbitale  $SU(2)_o$  :

$$U(2N) = U(1)_c \times SU(2N)_1 \sim U(1)_c \times SU(2)_N \times SU(N)_2. \quad (3.27)$$

Les courants associés à la symétrie  $U(1)_c$  par exemple sont :

$$J_L(z) = \sum_{\ell} J_{\ell L}(z), \quad (3.28a)$$

$$J_R(\bar{z}) = \sum_{\ell} J_{\ell R}(\bar{z}), \quad (3.28b)$$

qui, une fois sommés et intégrés sur tout l'espace, donne la charge conservée (lorsque la symétrie correspondante,  $U(1)_c$  dans ce cas, est vérifiée) à savoir, le nombre de particules. L'ensemble de ces deux ensembles de courants sont définis dans l'Ann. B.1. De la même manière que pour un hamiltonien de Wess-Zumino-Witten [217], le hamiltonien d'interaction peut s'écrire en une somme de produits ordonnés normalement de deux de ces courants. De tels produits sont appelés opérateurs d'interactions. Lorsque les deux courants qui les composent sont de même chiralité (deux courants  $L$  ou deux courants  $R$ ), l'opérateur est dit chiral, sinon, il est achiral. C'est ainsi que (le seul) opérateur achiral qui peut être définie à partir des seuls courants 3.28 s'écrit :

$$O_8(z, \bar{z}) =: J_L(z) J_R(\bar{z}) :, \quad (3.29)$$

où il est équivalent de mettre la dépendance dans les variables complexes  $z$  et  $\bar{z}$  à l'intérieur ou à l'extérieur du produit normal puisque l'une est une dépendance holomorphe et l'autre antiholomorphe rendant la confusion bénigne et rendant du même coup la mention de l'ordre

---

<sup>4</sup>qui code, pour une théorie conforme, la manière dont la symétrie  $U(2N)$  est brisée explicitement.

normal redondant et donc souvent ignorée. La dépendance sera à l'extérieur seulement pour les courants chiraux, et la mention de l'ordre normal est alors nécessaire. L'ensemble de ces opérateurs d'interactions  $\{O_i\}_i$  sont donnés Ann. B.2. Il est ainsi possible d'écrire le hamiltonien d'interaction (voir Ann. B.3 pour quelques détails du calcul) sous la forme suivante :

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \sum_{i=1}^{12} g_i \int dz d\bar{z} O_i(z, \bar{z}) \quad (3.30)$$

où les coefficients  $g_i$  sont les couplages des interactions et constituent les petits paramètres perturbatifs. Ils s'expriment en fonction des paramètres initiaux selon :

$$g_1^{(0)} = -a_0 (U + V) \quad (3.31a)$$

$$g_{1,C}^{(0)} = -a_0 \left( U \left( \frac{1}{2(N+1)} - 1 \right) + V \left( \frac{3}{2(N+1)} + 1 \right) \right) \quad (3.31b)$$

$$g_2^{(0)} = -a_0 (U - V) (1 + \delta_{k_1 k_2}) \quad (3.31c)$$

$$g_3^{(0)} = -a_0 (U - V) (-1 + \delta_{k_1 k_2}) \quad (3.31d)$$

$$g_4^{(0)} = -4a_0 V \quad (3.31e)$$

$$g_{4,C}^{(0)} = -2a_0 \left( U \left( \frac{1}{2(N+1)} + 1 \right) + V \left( \frac{3}{2(N+1)} - 1 \right) \right) \quad (3.31f)$$

$$g_5^{(0)} = a_0 (U - V) \left( 1 - \frac{1}{N} \right) (1 + \delta_{k^1 k^2}) \quad (3.31g)$$

$$g_6^{(0)} = a_0 (U - V) \left( 1 - \frac{1}{N} \right) (-1 + \delta_{k^1 k^2}) \quad (3.31h)$$

$$g_7^{(0)} = 4a_0 V \left( 1 - \frac{1}{N} \right) \quad (3.31i)$$

$$g_{7,C}^{(0)} = 4a_0 V \left( 1 - \frac{1}{N} \right) \quad (3.31j)$$

$$g_8^{(0)} = \frac{a_0}{2} \frac{N-1}{N} (U + V) \quad (3.31k)$$

$$g_{8,C}^{(0)} = \frac{a_0}{2} \frac{N-1}{N} (U + V) \quad (3.31l)$$

$$g_9^{(0)} = 0 \quad (3.31m)$$

$$g_{10}^{(0)} = \delta_{2(k_F^1 + k_F^2)} \delta_{k^1 k^2} a_0 \left( \frac{U}{2} + \frac{3V}{2} \right) \quad (3.31n)$$

$$g_{11}^{(0)} = \delta_{2(k_F^1 + k_F^2)} a_0 (U - V) \quad (3.31o)$$

$$g_{12}^{(0)} = \delta_{2(k_F^1 + k_F^2)} a_0 \left( \frac{U}{2} - \frac{V}{2} \right) \quad (3.31p)$$

où  $\delta_{k_1 k_2} = 1$  lorsque  $k_1 = k_2$ , qui ne se produit pour le double-puits que lorsque  $t_{\perp} = 0$ , et  $\delta_{2(k_F^1 + k_F^2)} = 1$  si et seulement si  $2(k_F^1 + k_F^2) = \frac{2\pi}{a_0}$ , vérifié au demi-remplissage seulement.

### 3.1.3 Renormalisation

Le hamiltonien complet avec interactions, même perturbatives n'est plus intégrable, et il n'existe pas de manière générique pour le diagonaliser. Cependant il n'est pas nécessaire de le résoudre exactement car seules les excitations de grandes longueurs d'onde sont pertinentes parce qu'elles régissent les propriétés globales du système. C'est cette idée qui justifie l'approche de couplage faible et qui peut être utilisée à nouveau dans le cadre du groupe de renormalisation [224] une fois la théorie des champs obtenue. Plusieurs implémentations de cette idée correspondant à plusieurs schémas de renormalisation sont possibles mais pas toujours équivalents. Étant donnée l'invariance conforme du hamiltonien sans interaction, un schéma d'intégration sur les petites longueurs suivie d'une dilatation (le tout constituant une itération du schéma) semble le schéma le plus adapté car il laissera le hamiltonien sans interaction invariant (à un *off-set* près). Le phénomène n'est plus vrai pour le hamiltonien d'interaction qui voit ses couplages renormalisés à chaque itération. Puisque l'ensemble des opérateurs d'interactions définis Ann. B.2 sont des opérateurs marginaux, ce n'est pas la dilatation qui renormalise les coefficients (ou, pour être plus précis, qui change différemment un couplage par rapport à un autre) mais l'intégration sur les petites longueurs. En effet, si on note  $Z$  la fonction de partition du système (à partir de laquelle la plupart des propriétés globales du système peuvent être obtenues), alors la nature perturbative de l'interaction permet le développement en série de la fonction de partition vis-à-vis des couplages (la température statistique peut être mise à 1):

$$Z = \text{Tr} \left( e^{-\mathcal{H}_0 - \mathcal{H}_{\text{int}}} \right), \quad (3.32a)$$

$$= \text{Tr} \left[ e^{-\mathcal{H}_0} \left( 1 - \sum_k g_k \int_{\Lambda^{-1} \leq |z|} dz d\bar{z} O_k(z, \bar{z}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} g_i g_j \int_{\Lambda^{-1} \leq |z|, |\omega|} dz d\bar{z} d\omega d\bar{\omega} O_i(z, \bar{z}) O_j(\omega, \bar{\omega}) + \mathcal{O}(g^3) \right) \right]. \quad (3.32b)$$

où  $\Lambda^{-1}$  est typiquement de l'ordre du pas du réseau. Intégrer sur les petites longueurs consiste à séparer chacune des intégrales ci-dessus en deux : une partie intègre sur  $\Lambda^{-1} < |z| < \alpha \Lambda^{-1}$  et l'autre sur  $\alpha \Lambda^{-1} < |z|$  avec  $\alpha > 1$ . Le terme dans l'Eq. 3.32b au second ordre dans les couplages étant une double intégrale, cette séparation engendre quatre termes dont deux égaux. Ainsi, l'ensemble des termes de l'équation avec au moins une intégration sur les petites longueurs s'écrit :

$$- \sum_k g_k \int_{\Lambda^{-1} \leq |z| \leq \alpha \Lambda^{-1}} dz d\bar{z} O_k(z, \bar{z}) + \sum_{i,j} g_i g_j \int_{\Lambda^{-1} \leq |z| \leq \alpha \Lambda^{-1}} \int_{\alpha \Lambda^{-1} \leq |\omega|} dz d\bar{z} d\omega d\bar{\omega} O_i(z, \bar{z}) O_j(\omega, \bar{\omega}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} g_i g_j \int_{\Lambda^{-1} \leq |z|, |\omega| \leq \alpha \Lambda^{-1}} dz d\bar{z} d\omega d\bar{\omega} O_i(z, \bar{z}) O_j(\omega, \bar{\omega}). \quad (3.33)$$

Le premier et le dernier terme de l'Eq. 3.33 sont intégrés complètement et ne contribuent pas aux grandes longueurs du hamiltonien d'interaction à une constante près (qu'il est possible d'absorber par la même redéfinition globale des couplages, donc sans conséquence). Le second terme, lui, diverge, car les opérateurs d'interactions forment une algèbre non triviale au sens des OPEs puisque tous ces opérateurs sont marginaux (car ils sont des opérateurs primaires de dimensions conformes (1,1)), leurs OPEs s'écrivent <sup>5</sup> :

$$O_i(z, \bar{z})O_j(\omega, \bar{\omega}) \sim \frac{A_{ij}}{|z-\omega|^4} + \sum_k \frac{C_{ij}^k}{|z-\omega|^2} O_k(\omega, \bar{\omega}). \quad (3.34)$$

Le premier terme, parfois nul, contribue à son tour à une constante globale sans importance, mais le second terme lui, une fois intégré, aura une contribution non négligeable (marginale pertinente). Ainsi, la fonction de partition devient :

$$Z = \text{Tr} \left[ e^{-\mathcal{H}_0} \left( 1 - \sum_k \left( g_k - \pi \log(\alpha) \sum_{i,j} C_{ij}^k g_i g_j \right) \int_{\alpha\Lambda^{-1} \leq |z|} dz d\bar{z} O_k(z, \bar{z}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} g_i g_j \int_{\alpha\Lambda^{-1} \leq |z|, |\omega|} dz d\bar{z} d\omega d\bar{\omega} O_i(z, \bar{z}) O_j(\omega, \bar{\omega}) + \mathcal{O}(g^3) \right) \right]. \quad (3.35)$$

La dilatation  $(z, \bar{z}) \rightarrow (\alpha z, \alpha \bar{z})$  permet de retrouver la fonction de partition renormalisée sous la forme de l'Eq. 3.32b mais avec de nouveaux couplages :

$$g_k(\alpha a_0) = g_k - \pi \log(\alpha) \sum_{i,j} C_{ij}^k g_i g_j. \quad (3.36)$$

En posant  $\beta = \log(\alpha)$  le "temps de renormalisation", les équations de renormalisation à la première boucle sont alors :

$$\dot{g}_k = \frac{dg_k}{d\beta} = -\pi \sum_{i,j} C_{ij}^k g_i g_j. \quad (3.37)$$

Une version explicite de ces équations est donnée Ann. B.5. Pour une meilleure lisibilité de ces équations il est pertinent de les redéfinir dans une version avec les couplages  $f_i$  proportionnels aux  $g_i$ . Cette version sera désormais systématiquement préférée et est aussi explicitée Ann. B.5. La résolution du système d'équation 3.37 est faite numériquement par une procédure de Runge-Kuta (voir le Chap. 17 de la Ref. [225]), mais peut être comprise en étudiant seulement l'équation :

$$\dot{f} = f^2. \quad (3.38)$$

Sa solution est de la forme  $f(\beta) = 1/(c - \beta)$  où  $c$  est déterminée par la condition initiale sur  $f$ . Ainsi, le flot de renormalisation (les itérations sur  $\beta$ ) aura tendance à faire tendre  $f$  vers zéro, ou le faire diverger vers plus ou moins l'infini sans jamais aller au delà. Le même type de

---

<sup>5</sup>la méthode de calcul est donnée Ann. B.4.



### Chapitre 3. L'approche de couplage faible

comportement se produit pour le système 3.37 d'après Ref. [226] : une partie des couplages seront les premiers à diverger au cours de la renormalisation, tous au même pôle et de la même amplitude au signe près (grâce à la définition des couplages en  $f_i$ ), tandis que les autres, soit parce qu'ils divergent plus tard (et donc la divergence ne sera jamais atteinte), soit parce qu'ils ne divergent plus (les conditions initiales les placent après la divergence), seront négligeables en comparaison. Divers comportements asymptotiques de ces couplages peuvent alors être obtenus en fonction des conditions initiales Eqs. 3.31. Pour les désigner, il est d'usage de normaliser chacun de ces couplages par (la valeur absolue de) l'amplitude du couplage le plus grand pour chaque ensemble d'asymptotes. Normalisé ainsi, chaque couplage, à l'issue du flot de renormalisation, peut prendre trois valeurs : +1, -1 ou 0. A chaque ensemble de ces valeurs, par exemple ( $f_1 = 1, f_2 = 1, f_3 = 1, f_4 = 0, f_5 = 1, f_6 = -1, f_7 = 0, f_8 = 0, f_9 = 1, f_{10} = 1, f_{11} = 0, f_{12} = -1$ ) va correspondre une classe d'universalité avec un modèle asymptotique qu'il faut étudier pour caractériser la classe, et donc la phase qu'elle représente. Ainsi, associer à chaque ensemble de couplages initiaux le ensemble de couplages asymptotique permet de tracer le diagramme de phase à couplage faible.

Pour le double-puits, à demi-remplissage, celui-ci est donné par les Fig. 3.2 dont les ensembles de couplages asymptotiques sont donnés par les Tab. 3.1 et 3.2 respectivement.

Phases	$\frac{f_1}{ f_{\max} }$	$\frac{f_2}{ f_{\max} }$	$\frac{f_3}{ f_{\max} }$	$\frac{f_4}{ f_{\max} }$	$\frac{f_5}{ f_{\max} }$	$\frac{f_6}{ f_{\max} }$	$\frac{f_7}{ f_{\max} }$	$\frac{f_8}{ f_{\max} }$	$\frac{f_9}{ f_{\max} }$	$\frac{f_{10}}{ f_{\max} }$	$\frac{f_{11}}{ f_{\max} }$	$\frac{f_{12}}{ f_{\max} }$
I	+1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	0	+1	+1
II	+1	+1	-1	-1	+1	-1	-1	+1	+1	0	-1	-1
III	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	+1	0	+1	-1
IV	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	0	-1	+1
V	+1	-1	+1	+1	+1	-1	-1	+1	+1	0	+1	+1

Table 3.1 – Ensemble de couplages asymptotiques pour les phases du diagramme Fig. 3.2.  $f_{\max}$  est l'amplitude du couplage le plus grand (éventuellement exaequo, et potentiellement différent pour chaque phase) lors de sa divergence le long du flot de renormalisation.

Phases	$\frac{f_1}{ f_{\max} }$	$\frac{f_2}{ f_{\max} }$	$\frac{f_3}{ f_{\max} }$	$\frac{f_4}{ f_{\max} }$	$\frac{f_5}{ f_{\max} }$	$\frac{f_6}{ f_{\max} }$	$\frac{f_7}{ f_{\max} }$	$\frac{f_8}{ f_{\max} }$	$\frac{f_9}{ f_{\max} }$	$\frac{f_{10}}{ f_{\max} }$	$\frac{f_{11}}{ f_{\max} }$	$\frac{f_{12}}{ f_{\max} }$
I	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	0	1	1
II	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	0	-1	-1
III	1	0	0	1	0	0	0	1	-1	0	-1	0
IV	1	0	0	1	0	0	0	1	1	0	1	0

Table 3.2 – Ensemble de couplages asymptotiques pour les phases du diagramme Fig. 3.2.  $f_{\max}$  est l'amplitude du couplage le plus grand (éventuellement exaequo, et potentiellement différent pour chaque phase) lors de sa divergence le long du flot de renormalisation.

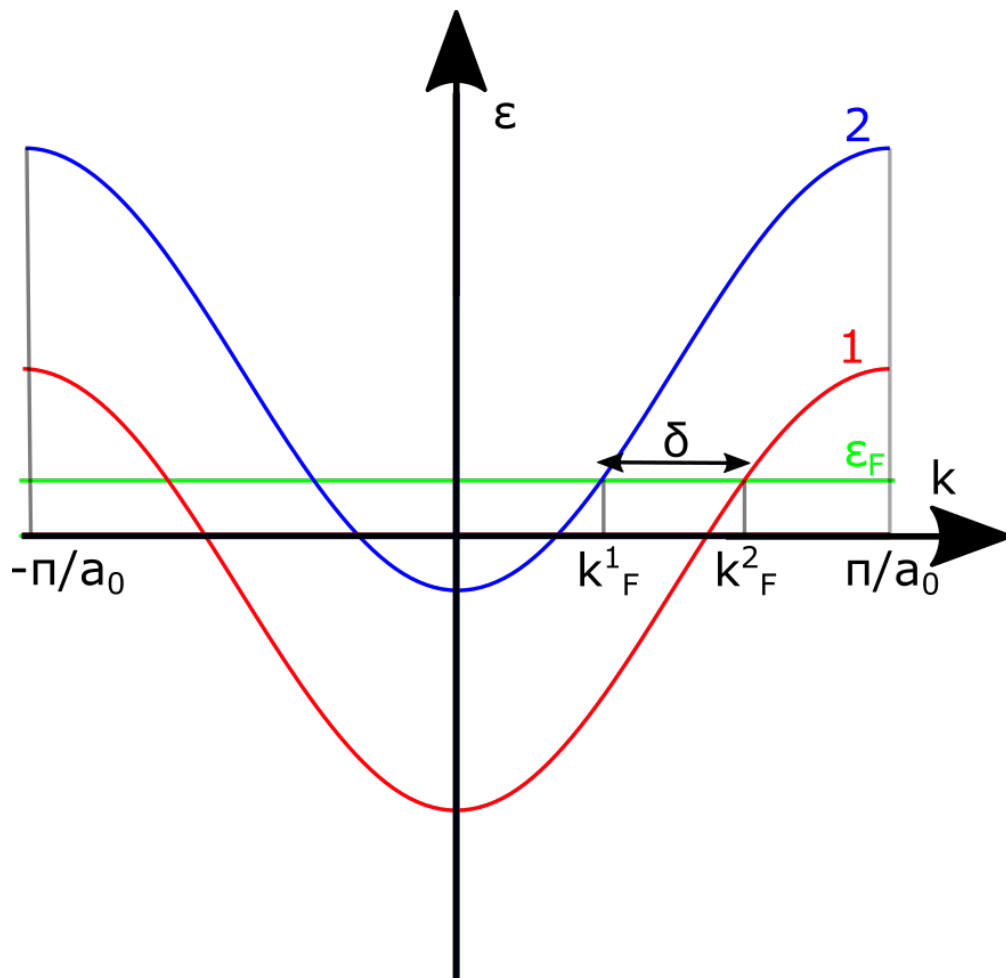


Figure 3.1 – Relations de dispersion du modèle sans interaction en fonction du vecteur d'onde  $k$ . À cause de la différence d'énergie de  $2t_{\perp}$  (supposée inférieure à  $t$  pour que les deux bandes se superposent largement et représentée ici pour  $t = t_{\perp}$ ), les deux bandes ou branches ne sont pas individuellement remplies de manière égale si bien que le vecteur d'onde de Fermi  $k_F^{\ell}$  dépend de la bande. Le remplissage global reste le demi-remplissage. La théorie de basse énergie néglige les excitations particules-trous loin des quatre points de Fermi (les points d'intersections entre l'énergie de Fermi (en vert) et les deux bandes (en rouge et bleu)), il est donc cohérent de linéariser autour de ceux-ci sur une zone d'amplitude  $\Lambda$  et décrire alors le système par quatre types de fermions avec une relation de dispersion linéaire : des fermions de Dirac. La "mer de Fermi" est l'ensemble des états occupés, initiaux ou effectifs.

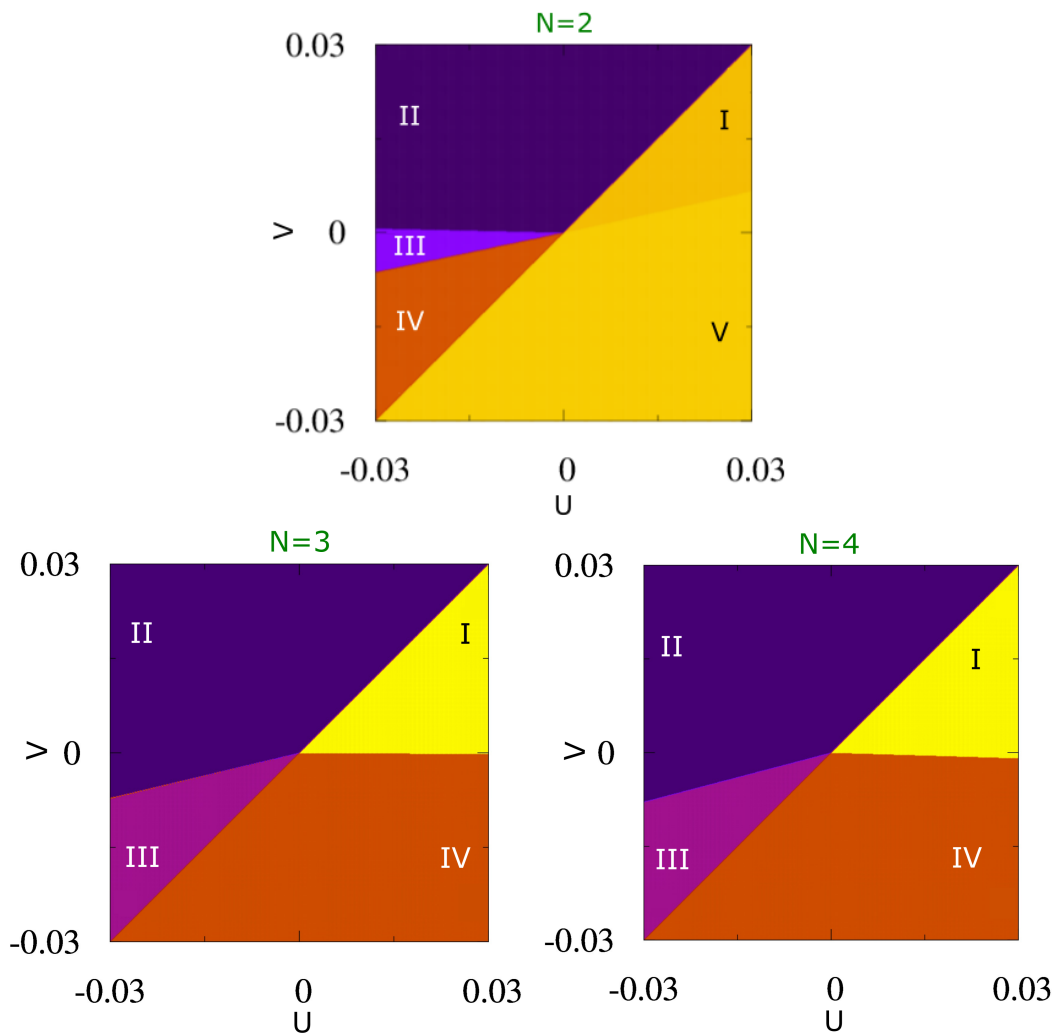


Figure 3.2 – Diagrammes des phases obtenus par l'approche de couplage faible pour  $N = 2$  (en haut), 3 (en bas à gauche) et 4 (en bas à droite) en fonction des paramètres d'interactions  $U$  et  $V$  (en unité du *hopping*  $t$ ). Chaque couleur correspond à un ensemble de couplages asymptotiques différent (donné dans le Tab. 3.1 pour  $N = 2$ , Tab. 3.2 pour  $N = 3$  et 4) et donc à une phase différente.

## 3.2 Interprétations des diagrammes de phase

Une fois les asymptotes obtenues, il faut les interpréter. Il faut alors regarder le modèle effectif correspondant à chaque asymptote. Parfois, celui-ci est connu ou peut être déduit d'un modèle connu et permet alors une caractérisation au moins partielle (lorsqu'il est massif pour quelques degrés de liberté au moins) qu'il est possible de compléter par bosonisation abélienne [32, 221] ou non abélienne [86, 227, 228]. Le cas  $N = 2$  est significativement différent du cas  $N > 2$  car des annulations de certains couplages se produisent. L'étude de ce cas n'est donc pas détaillée dans la suite, même si les mêmes techniques s'appliquent. La suite traite donc du cas  $N = 3$  et  $N = 4$  essentiellement identiques.

### 3.2.1 L'asymptote intégrable : le modèle de Gross-Neveu

La caractérisation la plus immédiate est celle de la phase II. Il est préférable pour le montrer, d'appliquer la transformation (réversible) chirale  $\Omega$  sur les fermions de Dirac gauches :

$$\Omega : L_{1\alpha} \rightarrow iL_{2\alpha}, L_{2\alpha} \rightarrow iL_{1\alpha}, \quad (3.39)$$

et qui laisse les fermions droits invariants. Alors, après cette transformation, les couplages sont tous égaux (de 1 à 9, nuls de 10 à 12) lorsqu'ils ne sont pas nuls et vérifient alors l'équation de renormalisation :

$$\dot{f} = \frac{2N-1}{N} f^2, \quad (3.40)$$

avec  $f$  positif. La densité de hamiltonien effectif <sup>6</sup> devient la densité du hamiltonien de Gross-Neveu (GN)  $SO(4N)$  [229] qui s'écrit :

$$\mathcal{H}_{GN} = -i\nu_F \sum_{\ell\alpha} \left( R_{\ell\alpha}^\dagger \partial_x R_{\ell\alpha} - L_{\ell\alpha}^\dagger \partial_x L_{\ell\alpha} \right) + \frac{\pi f}{2N} \left( L_{\ell\alpha}^\dagger R_{\ell\alpha} - h.c. \right)^2, \quad (3.41)$$

où la symétrie  $SO(4N)$  vient de la décomposition des fermions de Dirac en fermions de Majorana [230] :  $L_{\ell\alpha} = \zeta_{\ell\alpha} + i\chi_{\ell\alpha}$  ( $\zeta_{\ell\alpha}$  et  $\chi_{\ell\alpha}$  sont des fermions de Majorana) particulièrement utile pour le cas  $N = 2$ . La symétrie  $SO(4N)$  est également la symétrie continue maximale que peuvent vérifier les  $2N$  fermions de Dirac. Le modèle est donc devenu plus symétrique au cours de la renormalisation. Ce phénomène appelé élargissement dynamique de la symétrie *Dynamical Symmetry Enlargement (DSE)* [231] est courant au cours de la renormalisation. Le hamiltonien de Gross-Neveu est intégrable [232, 233], de charge centrale  $c = 0$  et est une phase gappée : donc tous les degrés de liberté sont fixés. Le paramètre d'ordre local est lu dans l'Eq. 3.41 et s'écrit :

$$\mathcal{O}_{II}^\Omega = i \left( L_{\ell\alpha}^\dagger R_{\ell\alpha} - h.c. \right), \quad (3.42)$$

<sup>6</sup>Le hamiltonien effectif est dominé par les termes d'interactions. On regarde donc le régime de couplage fort du modèle effectif asymptotique de la classe d'universalité dans lequel appartient le hamiltonien effectif de faible couplage dans un certain régime de paramètre.

de telle sorte que le hamiltonien Eq. 3.41 peut se réécrire :

$$\mathcal{H}_{GN} = -i\nu_F \sum_{\ell\alpha} \left( R_{\ell\alpha}^\dagger \partial_x R_{\ell\alpha} - L_{\ell\alpha}^\dagger \partial_x L_{\ell\alpha} \right) - \frac{\pi f}{2N} (\mathcal{O}_{II}^\Omega)^2, \quad (3.43)$$

et donc l'état fondamental maximise ce paramètre qui dispose ainsi d'une valeur moyenne non nulle. Avant la transformation  $\Omega$ , ce même paramètre d'ordre s'exprime :

$$\mathcal{O}_{II} = \sum_{\alpha} L_{1\alpha}^\dagger R_{2\alpha} + L_{2\alpha}^\dagger R_{1\alpha} + h.c., \quad (3.44)$$

qui, avant limite continue s'écrit :

$$\mathcal{O}_{II}(i) = \sum_{\alpha} (-1)^i \left( d_{1\alpha,i}^\dagger d_{2\alpha,i} + h.c. \right). \quad (3.45)$$

Dans les fermions initiaux  $c$ , ce paramètre d'ordre devient finalement :

$$\mathcal{O}_{ODW}(i) = \sum_{\alpha} (-1)^i \left( c_{1\alpha,i}^\dagger c_{1\alpha,i} - c_{2\alpha,i}^\dagger c_{2\alpha,i} \right). \quad (3.46)$$

Ce paramètre d'ordre caractérise la phase deux fois dégénérée d'onde de densité orbitale (ODW) qui brise (spontanément) la symétrie de translation d'un site à l'autre en translation tous les deux sites seulement. Une représentation graphique simplifiée de la phase est donnée Fig. 3.3.

### 3.2.2 Dualité

La phase I est très semblable à la phase II. En fait, il existe une transformation qui permet de passer de l'une à l'autre : une dualité [234]. Celle-ci s'écrit :

$$\tilde{\Omega} : L_{\ell\alpha} \rightarrow iL_{\ell\alpha}, \quad (3.47)$$

et laisse invariant les fermions droits. Puisque tous les degrés de liberté de la phase II sont fixés (gappés), le même constat doit s'appliquer à la phase I qui est alors  $SO(4N)$  symétrique. Les états de ces degrés de liberté sont par contre différents pour la nouvelle phase, et sont codés dans un nouveau paramètre d'ordre local : celui de la phase de Spin-Peierls alternée ( $SP_\pi$ ) qui s'exprime dans la base initiale :

$$\mathcal{O}_{SP_\pi}(i) = \sum_{\alpha} (-1)^i \left( c_{1\alpha,i+1}^\dagger c_{1\alpha,i} - c_{2\alpha,i+1}^\dagger c_{2\alpha,i} + h.c. \right). \quad (3.48)$$

Cette phase est elle aussi deux fois dégénérée et présente des dimères représentés Fig. 3.3. Pour vérifier que le paramètre d'ordre local 3.48 est le bon, la simple application de la dualité est suffisante à une subtilité près. En effet, dans les variables liantes et antiliantes Eq. 2.24, le

paramètre d'ordre devient :

$$\mathcal{O}_{\text{SP}_\pi}(i) = \sum_{\alpha} (-1)^i \left( d_{1\alpha, i+1}^{\dagger} d_{2\alpha, i} + d_{2\alpha, i+1}^{\dagger} d_{1\alpha, i} + h.c. \right), \quad (3.49)$$

qui, à la limite continue 3.13 s'écrit :

$$\mathcal{O}_{\text{SP}_\pi} \simeq \sum_{\alpha} \left( e^{ik_F^1 a_0} + e^{ik_F^2 a_0} \right) \left( L_{1\alpha}^{\dagger} R_{2\alpha} + L_{2\alpha}^{\dagger} R_{1\alpha} \right) + h.c.. \quad (3.50)$$

Celui-ci devient, après application des transformations  $\Omega$  et  $\tilde{\Omega}$  (les deux commutent) :

$$\mathcal{O}_{\text{SP}_\pi}^{\Omega\tilde{\Omega}} \simeq - \sum_{\ell\alpha} \left( e^{ik_F^1 a_0} + e^{ik_F^2 a_0} \right) L_{\ell\alpha}^{\dagger} R_{\ell\alpha} + h.c., \quad (3.51a)$$

$$\simeq -4i \cos\left(\frac{\delta}{2}\right) \sum_{\ell\alpha} \left( L_{\ell\alpha}^{\dagger} R_{\ell\alpha} - h.c. \right), \quad (3.51b)$$

qui a bien la même expression que le paramètre d'ordre Eq. 3.42 au préfacteur réel non nul près, sans conséquence. Le diagramme montre dans le même temps, que la ligne  $V = 0$  qui correspond au modèle de Hubbard  $\text{SU}(N)$  à deux chaînes à demi rempli et répulsif est lui aussi une phase  $\text{SP}_\pi$  conformément à l'analyse basée sur la  $g$ -ologie de la Ref. [235]. Par ailleurs, ce secteur du premier cadran du diagramme de phase est le secteur privilégié pour l'apparition de la phase topologique qui est donc absente à faible couplage d'après cette approche. Par souci d'exhaustivité, les deux phases restantes des diagrammes Fig. 3.1 ( $N = 3$  et 4) sont également interprétées.

### 3.2.3 Non-intégrabilité : bosonisation

Les phases III et IV se ressemblent et se déduisent l'une de l'autre par la transformation Eq. 3.47 à la limite infra-rouge (IR). Mais ni l'une, ni l'autre ne voient leurs symétries augmenter dynamiquement au cours de la renormalisation qui n'aboutit pas sur un modèle intégrable. Il ne sera donc pas possible de s'arrêter au régime de couplage fort du modèle IR effectif et les phases ne peuvent pas être déduites par dualité. Pour écrire le hamiltonien IR, il est utile d'utiliser les courants du prolongement conforme Eq. 3.25. Après transformation 3.39, le hamiltonien effectif des deux phases devient :

$$\mathcal{H}_{III(IV)}^{\text{eff}} = \mathcal{O}_{\text{Thirring}} + \frac{\pi f}{2N^2} J_R J_L + \mathcal{O}_{III(IV)}, \quad (3.52a)$$

$$\mathcal{O}_{\text{Thirring}} = \frac{2\pi f}{N} (J_{1R}^a J_{1L}^a + J_{2R}^a J_{2L}^a), \quad (3.52b)$$

$$\mathcal{O}_{III(IV)} = \mp \frac{\pi f}{N} \left( L_{2\alpha}^{\dagger} R_{2\alpha} L_{1\beta}^{\dagger} R_{1\beta} + h.c. \right), \quad (3.52c)$$

avec  $f > 0$ . Les deux hamiltoniens ne sont pas intégrables, mais le premier terme  $\mathcal{O}_{\text{Thirring}}$  seul, lui, correspond à un modèle de Thirring (ou chiral GN) massif et intégrable de deux chaînes découplées [236]. Puisqu'il fait intervenir les deux courants  $\text{SU}(N)_1$  de spin, ce sont

naturellement les degrés de liberté de spin (nucléaire) qui sont gappés, tandis que la charge par secteur, elle, est critique. Le modèle de Thirring à deux chaînes a donc une charge centrale  $c = 1 + 1 = 2$ . Ce cas est d'ailleurs réalisé sur la ligne  $U = V < 0$  qui correspond à deux chaînes de Hubbard attractives découplées au remplissage incommensurable, où la criticalité y est stabilisée [237]. Le second terme du modèle 3.52a n'introduit pas de gaps mais pilote en partie le degré de charge (global) s'il reste sans gap. Le troisième terme pilote à la fois le comportement du degré de charge et celui du degré orbital. Pour comprendre ce troisième terme, il est utile de le reformuler dans le contexte de la bosonisation non abélienne<sup>7</sup> [221, 86, 228, 238] :

$$L_{\ell\alpha}^\dagger R_{\ell\beta} \sim e^{i\sqrt{4\pi/N}\phi_\ell} g_{\beta\alpha}^{(\ell)} \quad (3.53a)$$

$$R_{\ell\alpha}^\dagger L_{\ell\beta} \sim e^{-i\sqrt{4\pi/N}\phi_\ell} g_{\alpha\beta}^{\dagger(\ell)}, \quad (3.53b)$$

où  $g^{(\ell)}$  est le champs primaire de dimension d'échelle  $(N-1)/N$  qui agit sur le secteur du spin nucléaire du puits  $\ell$ . Le champs bosonique  $\phi_\ell$  décrit les fluctuations de charge  $U(1)$  de chaque puits (et donc à la fois la charge globale et la charge orbitale). La partie cinétique du hamiltonien 3.12 en plus des termes d'interactions chiraux (en  $\mathcal{O}_i^C$ ) peuvent s'exprimer aussi en fonction de ces bosons :

$$\mathcal{H}_{0+C}^{U(1)\times U(1)} = \sum_{\ell} \left( \frac{v_\ell}{2K_\ell} (\partial_x \phi_\ell)^2 + \frac{v_\ell K_\ell}{2} (\partial_x \Theta_\ell)^2 \right), \quad (3.54)$$

où  $0+C$  signifie sans interaction ( $0$ ) plus les termes chiraux ( $C$ ) et où les  $\Theta_\ell$  sont les champs bosoniques duaux et la somme est sur les  $\ell = 1, 2$  ou, de manière équivalente,  $\ell = c, o$  en définissant le boson de charge et d'orbite  $\phi_{c,o} = (\phi_1 \pm \phi_2)/\sqrt{2}$ <sup>8</sup>. Les facteurs  $K_{m=c,o}$  et  $v_{m=c,o}$  sont respectivement les paramètres et vitesses de Luttinger [239, 240] du boson de charge et orbital, et s'écrivent :

$$K_c = \left( 1 + \frac{a_0(N-1)(U+V)}{\pi v_F} \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (3.55a)$$

$$K_o = \left( 1 + \frac{2Va_0(N-1)}{\pi v_F} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.55b)$$

Ces paramètres sont par ailleurs renormalisés à cause des termes achiraux de charge et d'orbites  $\mathcal{O}_7$  et  $\mathcal{O}_8$  qui, dans le cas de la phase III et IV vont fortement réduire  $K_c (< 1)$  et laisser  $K_o \simeq 1$ . Le troisième terme de l'Eq. 3.52a peut être réécrit après bosonisation 3.53 :

$$\mathcal{O}_{IV} \simeq \frac{\pi f}{N} e^{i\sqrt{4\pi/N}(\phi_1+\phi_2)} \text{Tr } g^{(1)} \text{Tr } g^{(2)} + h.c. \quad (3.56)$$

<sup>7</sup>qui mériterait d'être introduite en détail tant elle a été importante (en volume horaire) au cours de ces trois ans de thèse, mais qui n'intervient que dans cette sous-section étant donnée l'orientation choisie du manuscrit.

<sup>8</sup>C'est formellement à eux que la dénomination "degré de charge et degré orbital" fait référence.  $N-1$  champs bosoniques par chaîne peuvent être définis de manière similaire pour décrire le degré spin.

### 3.2. Interprétations des diagrammes de phase

Le terme de Thirring gappe le degré de spin, et tend à fixer les champs  $g^{(\ell)}$  à une même valeur indépendante de  $\ell$  (le double modèle de Thirring est symétrique vis-à-vis des chaînes). Ainsi, à basse énergie où ce gap n'est pas franchi, l'écriture  $\langle \text{Tr } g^{(\ell)} \rangle = \rho e^{i\mathcal{V}/2} \neq 0$  est valable pour les deux états fondamentaux des deux modèles de Thirring  $\text{SU}(N)$ . En intégrant sur les degrés de spin, tous gappés, et quitte à redéfinir l'amplitude :

$$\mathcal{O}_{IV} \simeq \tilde{\rho} \cos \left( \sqrt{\frac{8\pi}{N}} \phi_c + \mathcal{V} \right) \quad (3.57)$$

où  $\tilde{\rho} > 0$ . L'interaction est pertinente (sa dimension d'échelle est  $2K_c/N < 2$ ) et donc ouvre un gap de charge en fixant le degré de charge à la valeur :

$$\langle \phi_c \rangle = (\pi - \mathcal{V}) \sqrt{\frac{N}{8\pi}}. \quad (3.58)$$

Les fluctuations orbitales (décrites par le champ bosonique  $\phi_o$ ) ne sont donc pas contrôlées par le hamiltonien IR total 3.52a qui se trouve donc être critique vis-à-vis de ce seul mode. La phase que ce hamiltonien décrit est donc sans gap et de charge centrale  $c = 1$ <sup>9</sup>. L'instabilité dominante (i.e. l'ordre qui échoue à s'établir qui ici régit forcément le degré orbital, le seul non gappé) de la phase IV est une onde de densité de lien (*bound density wave BDW*) de paramètre d'ordre local :

$$\mathcal{O}_{BDW}(i) = \sum_{\alpha} c_{1\alpha,i}^{\dagger} c_{2\alpha,i} + h.c., \quad (3.59)$$

dans les opérateurs discrets d'origine, c'est-à-dire, à la limite continue :

$$\mathcal{O}_{BDW}(x) \simeq \sum_{\ell=1,2} (-1)^{\ell} \left( J_{\ell L} + J_{\ell R} + e^{i2k_F^{\ell} x} L_{\ell\alpha}^{\dagger} R_{\ell\alpha} + h.c. \right). \quad (3.60)$$

En terme des bosons définis Eq. 3.53 et après moyenne sur les degrés de spin et de charge, celui-ci peut aussi s'écrire :

$$\mathcal{O}_{BDW}(x) \simeq -\sqrt{\frac{2N}{\pi}} \partial_x \phi_o - 2i\rho e^{i2k_F^1 x} e^{i\sqrt{2\pi/N}\phi_o} + 2i\rho e^{i2k_F^2 x} e^{-i\sqrt{2\pi/N}\phi_o}. \quad (3.61)$$

La composante asymptotique dominante de sa fonction de corrélation à deux points et temps égaux se calcule également à l'aide de ces bosons et donne :

$$\langle \mathcal{O}_{BDW}(x) \mathcal{O}_{BDW}(0) \rangle \sim -\frac{\cos(\delta x)}{x^{K_o/N}}, \quad (3.62)$$

avec  $K_o \simeq 1$ , qui est donc une loi de puissance typique d'une instabilité d'une phase sans gap<sup>10</sup>.

<sup>9</sup>Dite C1S0 à demi-remplissage et  $N > 2$  dans la classification standard de Balents-Fisher des phases de l'échelle électronique à deux montants de la Ref. [223]

<sup>10</sup>le terme en  $\partial_x \phi_o$  de l'Eq. 3.61 engendre un terme additionnel sous-dominant universel en  $x^{-2}$ .



Pour la phase III, le même type de raisonnement s'applique avec cette fois-ci :

$$\mathcal{O}_{III} = -\tilde{\rho} \cos \left( \sqrt{\frac{8\pi}{N}} \phi_c + \mathcal{V} \right), \quad (3.63)$$

qui ouvre un gap de charge et fixe la valeur moyenne du boson de charge :

$$\langle \phi_c \rangle = -\mathcal{V} \sqrt{\frac{N}{8\pi}}. \quad (3.64)$$

La phase est elle aussi sans gap vis-à-vis du degré orbital mais l'instabilité dominante est cette fois-ci une onde de densité de charge  $2k_F$  (*charge density wave CDW*). Aux énergies plus faibles que le gap du spin et de la charge, l'instabilité est décrite à l'aide de la densité totale :

$$n(x) \sim e^{i2k_F^1 x} e^{i\sqrt{2\pi/N}\phi_o} + e^{i2k_F^2 x} e^{-i\sqrt{2\pi/N}\phi_o}, \quad (3.65)$$

dont la composante asymptotique dominante de sa fonction de corrélation s'écrit :

$$\langle n(x)n(0) \rangle \sim -\frac{\cos(\delta x)}{x^{K_o/N}}, \quad (3.66)$$

qui, elle, ne contient pas la contribution sous-dominante en  $x^{-2}$ .

La criticalité de ces deux phases est cependant fragile et certains termes sous-dominants par ailleurs peuvent dans certains cas particulier piloter le degré orbital et lui donner un gap. C'est en particulier le cas lorsque le paramètre d'anisotropie  $\delta$  devient commensurable  $\delta = p\pi/q$  où  $p$  et  $q$  sont des nombres entiers premiers entre eux. C'est par exemple le cas lorsque  $t_\perp = t$  qui donne  $\delta = \pi/3$ . Alors, les termes indicés  $q = 2(k_F^1 - k_F^2)$  de l'Ann. B.3.2 auparavant essentiellement nul peuvent désormais donner lieu à une perturbation régulière à l'ordre  $q$  de la forme :

$$\mathcal{O}_q \propto \left( L_{1\alpha}^\dagger R_{1\alpha} R_{2\beta}^\dagger L_{2\beta} \right)^q + h.c., \quad (3.67)$$

avec  $q < N$ . Cette contribution bosonisée prend (pour les deux phases) la forme d'un terme de sine-Gordon vis-à-vis du boson orbital :

$$\mathcal{O}_q \propto -g_o \cos \left( q \sqrt{\frac{8\pi}{N}} \phi_o + q\mathcal{V} \right), \quad (3.68)$$

de dimension d'échelle  $2q^2 K_o/N$  et donc susceptible d'ouvrir un gap lorsque  $K_o < N/q^2$ .

### 3.2. Interprétations des diagrammes de phase

Alors, le champs orbital sera fixé à une valeur différente en fonction du signe de  $g_o$ , à savoir :

$$\langle \phi_o \rangle = -\sqrt{\frac{N}{8\pi}} \mathcal{V}, \quad \text{lorsque } g_o > 0, \quad (3.69a)$$

$$\langle \phi_o \rangle = -\sqrt{\frac{N}{8\pi}} \mathcal{V} + \sqrt{\frac{N\pi}{8q^2}}, \quad \text{lorsque } g_o < 0. \quad (3.69b)$$

Les phases III et IV deviennent alors respectivement une phase gappée CDW et BDW représentées Fig. 3.3.

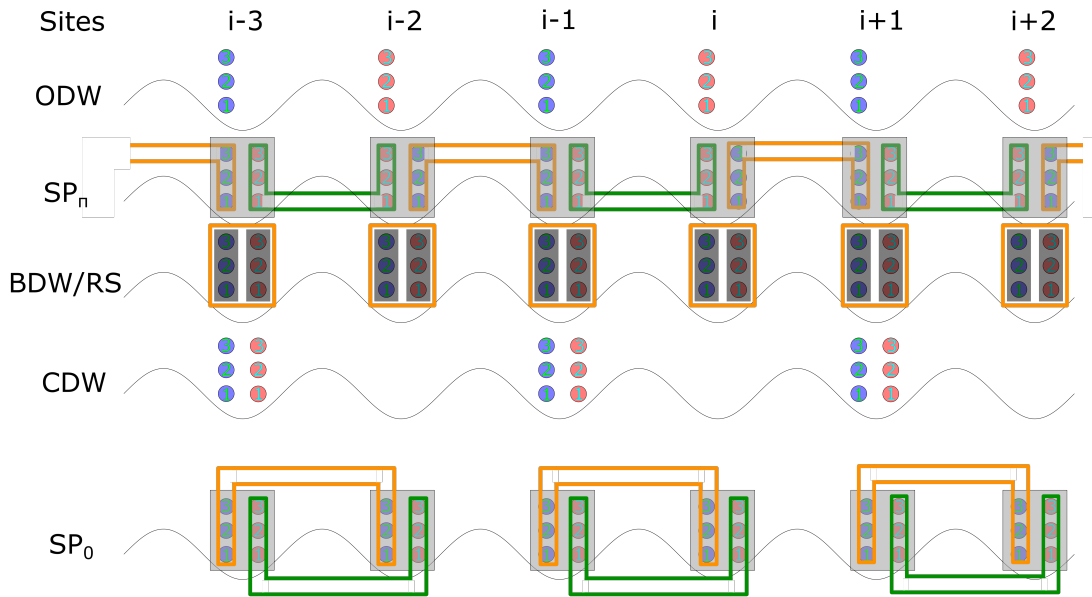


Figure 3.3 – Représentation imagée des phases prédites par l'approche de faible couplage plus une prédite par DMRG seulement pour le modèle double-puits à demi-remplissage dans le cas  $N = 3$ . La "vue" est longitudinale (selon  $x$ ). Chaque disque représente une particule, si elle est bleu, alors elle est dans le puits 1, si elle est rouge, elle est dans le puits 2. Les chiffres notent le spin nucléaire. Un rectangle gris indique une superposition d'état, et donc la densité moyenne d'une particule dans ce rectangle est moitié moindre que recouverte par celui-ci. Les encadrés (orange ou vert, les couleurs ne sont qu'indicatives ici) indiquent un singulet de spin nucléaire (état du type  $1/\sqrt{3}(c_1^\dagger + c_1^\dagger + c_1^\dagger)|0\rangle$  pour un fermion avec seulement un spin nucléaire). La phase CDW forme aussi par construction un état singulet en chaque site. Les phases ODW,  $SP_\pi$ , CDW et  $SP_0$  sont dimérisées, elles ont donc deux états fondamentaux, l'un obtenu par translation d'un site à partir de l'autre tandis que la phase BDW n'en a qu'un seul. Toutes les phases représentées sont topologiquement triviales.

#### 3.2.4 Synthèse des diagrammes

Il est donc désormais possible de remplir les diagrammes Fig. 3.2 comme Fig. 3.4. Certaines phases sont gappées, d'autres ont une criticalité fragile mais aucune de ces phases n'est une

phase topologique. Dans le cas du modèle de double-puits, le couplage faible indique que toutes les phases sont topologiquement triviales. Les éventuelles phases topologiques ne sont donc attendues qu'à couplage fort.

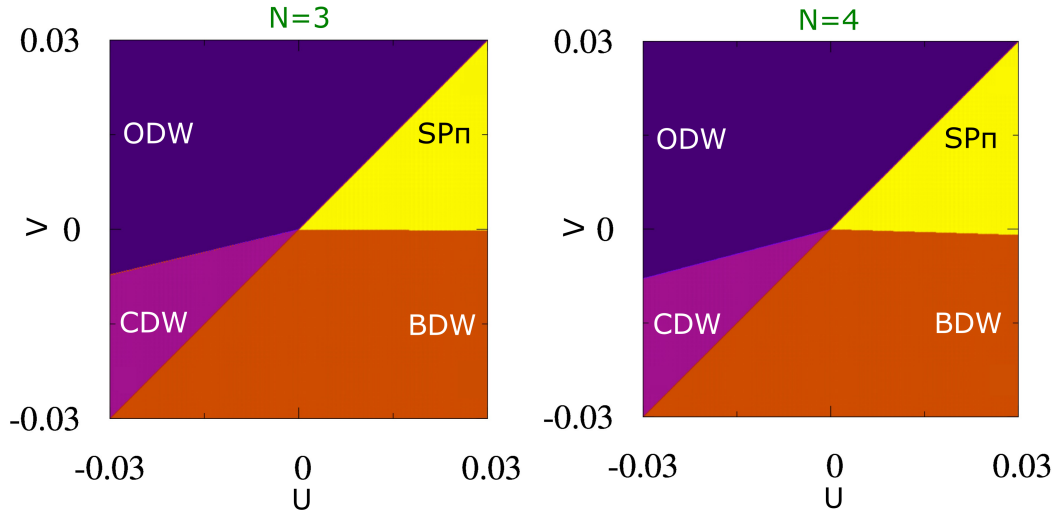


Figure 3.4 – Diagrammes des phases obtenus par l'approche de couplage faible pour  $N = 3$  (à gauche) et  $4$  (à droite ; ce sont bien essentiellement les mêmes diagrammes) en fonction des paramètres d'interactions  $U$  et  $V$  (en unité du *hopping*  $t$ ) une fois interprétés. Aucune des phases mentionnées ne sont topologiques.

### 3.3 S'éloigner du couplage faible : le DMRG

Afin de vérifier ces résultats et surtout d'estimer plus précisément le régime de validité des prédictions du couplage faible, il est utile d'utiliser une méthode numérique indépendante : le groupe de renormalisation de la matrice densité (*Density Matrix Renormalisation Group*, DMRG) [216]. En retour, les résultats de couplage faible vont permettre une caractérisation plus facile des phases observées en DMRG, en plus d'eux-même constituer un moyen de vérification des résultats numériques (si les deux approches s'accordent, le résultat prédit est plus solide).

#### 3.3.1 Courte présentation du DMRG

Le DMRG est un algorithme numérique qui optimise la troncation de l'espace de Hilbert des systèmes quantiques fortement corrélés de basse dimension basé grossièrement sur une décimation comme défini par Schollwöck [241]. Il a été particulièrement efficace pour donner l'énergie du fondamental et le gap de Haldane de la chaîne de Heisenberg de spin  $S = 1$  [84], et paraît donc naturellement la méthode idéale pour aborder les généralisations de la phase de Haldane, en plus des autres phases plus régulières. Il se base originellement sur le même principe que la renormalisation analytique standard [215], i.e. sur les séparations des échelles (d'une part les grandes longueurs de basses énergies qui dominent les propriétés physiques, et d'autre part les fluctuations à petites échelles qui peuvent être moyennées quitte à modifier quantitativement (renormaliser) le comportement à grande longueur). En revanche, la mise en œuvre de l'idée du DMRG n'utilise aucun *cut-off* (qui évalue au moins implicitement le lieu de la séparation des échelles), mais à la place un algorithme constructif.

Cet algorithme est divisé en deux temps. D'abord, "l'algorithme DMRG du système infini" [216] :

- Il consiste à prendre un système  $S$  de petite taille  $\ell$ , un bloc, avec  $M^S$  états connus de même que le hamiltonien  $H^S$  à l'initialisation. La même chose est faite pour un second bloc, souvent pris à l'identique, nommé l'environnement  $E$ .
- L'idée est de rajouter un site (et ses  $N_{\text{site}}$  états) au système  $S$  pour donner le système  $S'$  dont une base d'état est facilement déduite de la base précédente et des états du site. Le hamiltonien du nouveau système peut être exprimé dans cette base, mais cette étape coûteuse n'est pas nécessaire explicitement. La même chose est faite pour l'environnement dans l'algorithme standard.
- Le hamiltonien du superbloc  $S' + E'$  à  $M^S M^E N_{\text{site}}^2$  états est alors une matrice essentiellement vide (en particulier pour des interactions limitées au plus proche voisin) qu'il est possible de diagonaliser par valeur propre dans l'ordre croissant sans l'explicitier. Cette étape est la plus coûteuse. Lorsque seul l'état fondamental  $|\psi\rangle$  est cherché, lui seul suffit, avec sa valeur propre.

- Sa matrice densité réduite sur le système  $S'$ ,  $\rho = \text{Tr}_{E'}(|\psi\rangle\langle\psi|)$ , est alors diagonalisée (relativement aisément) et seuls les  $M^S$  états propres  $|\omega_\alpha\rangle$  de plus grandes valeurs propres  $\omega_\alpha$  sont gardés et le hamiltonien du nouveau système  $S'$  ainsi tronqué est restreint à ces seuls états et devient le nouveau hamiltonien du système. Il est alors de même dimension que le système initial soit  $M^S \times M^S$ . La même procédure est appliquée à l'environnement. L'ensemble des étapes est répété jusqu'à atteindre la taille désirée. Le cas échéant, les représentations d'opérateurs doivent eux-aussi être réécrits dans chaque nouvelle base (au moins implicitement).
- Il ne reste plus qu'à calculer les quantités cherchées à partir du fondamental  $|\psi\rangle$  obtenu.

L'algorithme à ce stade ne donne pas de résultat satisfaisant et doit passer par une deuxième étape : "le DMRG du système fini". Celui-ci a la même action que le précédent à la différence près que lorsqu'un site est ajouté à l'un des blocs, ce site est retranché au second bloc. Lorsque ce second bloc atteint une taille minimale choisie ou est décrit exactement, l'algorithme est renversé. Ce mouvement de va et vient est appelé un *sweep* aussi coûteux que l'algorithme du système infini. Il doit être répété jusqu'à observer une convergence satisfaisante des quantités physiques calculées après chaque *sweep* en prenant garde à ne pas être piégé dans un état métastable loin du fondamental.

Pris dans sa globalité, le DMRG optimise la valeur moyenne [242] d'une observable quelconque de l'ordre des poids tronqués en plus de l'erreur due à l'environnement plus difficile à estimer. Il optimise aussi la fonction d'onde [216, 243] dont l'erreur est aussi pilotée par la troncature, faisant de l'algorithme une méthode variationnelle à cet égard : l'état fondamental (par exemple) peut être approximé par DMRG avec une précision arbitrairement grande, mais l'état obtenu (forcement un état produit de matrice [241]) peut avoir certaines de ses propriétés largement différentes du vrai état initial. C'est notablement le cas lorsque le système est critique, où le DMRG n'étant pas sensible à l'intrication à longue portée peut échouer (ou converge significativement plus lentement) [241]. Il optimise enfin l'intrication [244, 245, 246, 247, 248], puisque l'état obtenu, sous ses contraintes, optimise l'entropie d'intrication (de von Neumann).

L'implémentation des symétries est a priori complètement possible <sup>11</sup> dans l'algorithme et augmente ses performances. Elle est aisée pour les symétries continues abéliennes comme  $U(1)$  mais nettement plus délicates pour les symétries non abéliennes [249, 250, 251, 252, 253, 254, 255, 256]. Elle doit être faite au cas par cas pour les symétries discrètes.

L'algorithme est redoutable pour le calcul des quantités n'utilisant pas l'expression des états. Pour des valeurs  $M^S$  suffisamment grande (et une erreur d'environnement maîtrisée), l'erreur est directement pilotée par l'amplitude tronquée (la somme des poids  $\omega_\alpha$  négligés) couramment mise à  $10^{-10}$  [84, 257]. Lorsque le calcul fait intervenir les états, la convergence est bien

---

<sup>11</sup>Exception faite de l'invariance par translation étant donnée la construction des systèmes. Cette symétrie du problème, même non implémentée, favorise paradoxalement la convergence.

plus lente et l'erreur est plus grande. En particulier, les fonctions de corrélations obtenues par DMRG seront systématiquement asymptotiquement exponentiellement décroissantes. Mais si sur des petites longueurs, l'approximation peut être satisfaisante, les éventuelles lois de puissance ne pourront jamais être obtenues. L'utilité d'une approche complémentaire devient alors claire.

#### 3.3.2 Les résultats du DMRG

Les diagrammes de phases pour le cas  $N = 3$  et  $N = 4$  obtenus par DMRG sont présentés Fig. 3.5 et les résultats sont complètement compatibles avec les prédictions de couplage faible. Chaque point des diagrammes correspond à une utilisation complète de l'algorithme et est identifié grâce aux quantités locales (toutes dans les variables initiales  $c$ ) de densités par puits et par spin  $n_{\ell\alpha,i}$  et d'énergies de liens longitudinales  $x_\ell : \sum_\alpha c_{\ell\alpha,i}^\dagger c_{\ell\alpha,i+1}$  ou transversales (ou de *rung*)  $y : \sum_\alpha c_{1\alpha,i}^\dagger c_{2\alpha,i}$ . Les Figs. 3.6, 3.7, 3.8 proposent des exemples de résultats obtenus par DMRG des comportements de ces quantités pour chacune de ces phases pour  $N = 3$  (les comportements à  $N = 4$  sont similaires).

L'information supplémentaire obtenue par ces diagrammes est l'extension des phases prédites vers le couplage fort <sup>12</sup> et l'apparition de nouvelles phases le cas échéant. C'est en particulier le cas des phases topologiques recherchées. Pour les étudier formellement, l'approche par couplage fort semble bien plus indiquée. La caractérisation de ces phases est cependant déjà possible avec le seul DMRG.

#### 3.3.3 Les phases SPT d'après le DMRG

Pour s'assurer que les états de bord de la Fig. 3.8 (droite) de la phase SPT supposée (à ce stade) ne sont pas des artefacts numériques, il est possible de s'assurer que ceux-ci sont dans une représentation projective de  $SU(N)$  ( $N = 3$  pour les figures précédentes). Pour présenter le principe de calcul, il est utile de prendre un peu d'avance sur le Chap. 4 et considérer les deux types d'états VBS  $SU(3)$  [44] qui eux aussi sont états fondamentaux de la phase chirale Haldane  $SU(3)$  (mais pour un modèle différent) [136]. Pour ces états, il est possible de calculer explicitement les valeurs attendues des deux Cartans (les générateurs  $G^3$  et  $G^8$ , conventionnellement diagonaux des matrices de Gell-Mann, cf Ann. A.2) pour chaque site (version  $SU(3)$  du nombre magnétique de spin), et d'en déduire les valeurs des Cartans des états de bords physiques (en prenant en compte leur extension spatiale). Celles-ci permettent de caractériser la représentation des états de bords, qui doit être projective pour le cas d'une phase de Haldane (d'après le Sec. 1.3.3). Dans le cas des phases chirales Haldane, la représentation fondamentale est attendue sur l'un des bords, et sa représentation conjuguée sur l'autre [258].

<sup>12</sup>Pousser la renormalisation de la Sec. 3.1.3 à l'ordre supérieur peut, dans une certaine mesure, capturer l'extension de ces phases, mais risque d'aboutir à l'apparition de point fixe non physique en plus d'être significativement plus difficile à manipuler.

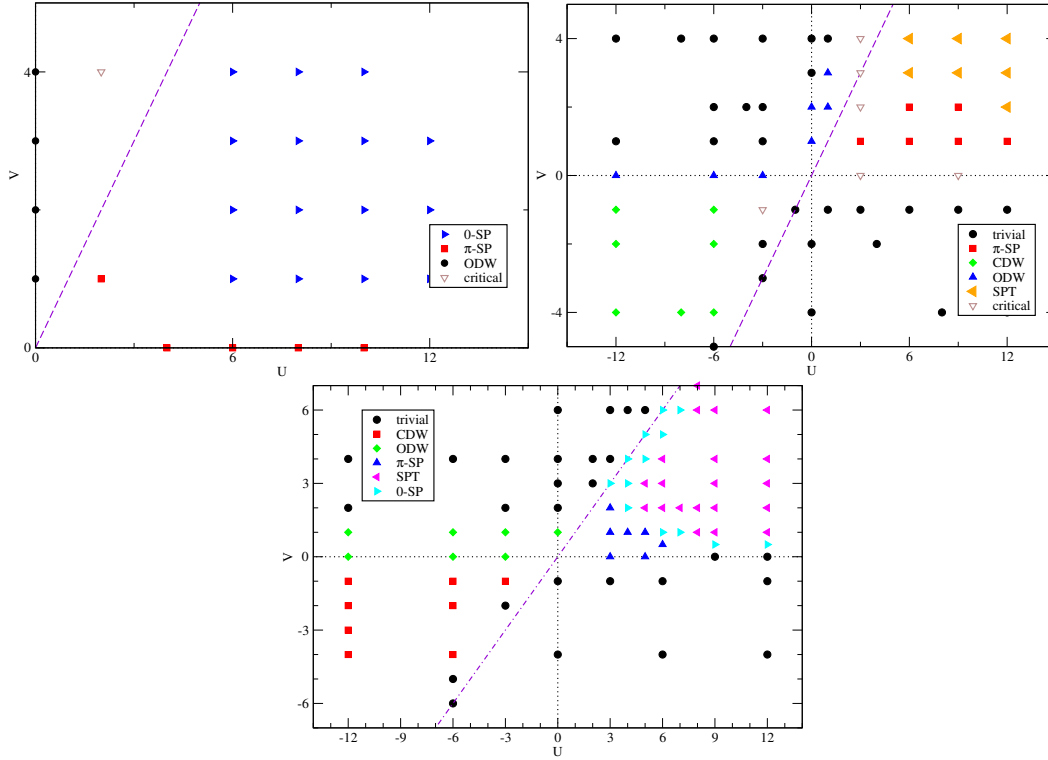


Figure 3.5 – Diagrammes de phase du modèle double-puits à demi-remplissage obtenus par DMRG pour  $N = 3$  en fonction des amplitudes d'interactions  $U$  et  $V$  en unité du *hopping* longitudinal pour  $t_{\perp} = 0.2t$  (à gauche),  $t_{\perp} = t$  (à droite) et  $N = 4$  avec  $t_{\perp} = t$  (en bas). Le couplage faible ne peut rigoureusement décrire que la zone proche du point conforme  $U = V = 0$ , et cette zone est effectivement compatible avec les prédictions faites Sec. 3.2 et aux diagrammes Fig. 3.4. À cet égard, la phase dite triviale (i.e. gappée, topologiquement triviale et non dimérisée) est bien la phase BDW aussi appelée *Rung singlet* du point de vue couplage fort. Les quelques points critiques marquent vraisemblablement les lignes de transitions de phase qui méritent une étude à part entière. Loin de la zone centrale, le couplage fort du Chap. 4 est nécessaire. C'est en particulier le régime où apparaît la phase SPT (et la phase  $SP_0$  représentée Fig. 3.3)

En prenant par exemple l'état VBS avec un bord droit dans la fondamentale (qu'il faut montrer) pour une chaîne semi-infinie (pour simplifier), il est possible de calculer les valeurs des Cartans, appelées aussi les poids (ce ne sont pas (!) les mêmes que les  $\omega_{\alpha}$  de la Sec. 3.3.1), en chaque site à l'aide de l'écriture des états VBS en termes d'états produits de matrices [237]. La représentation fondamentale de  $SU(3)$  est de dimension 3, donc trois expressions sont possibles. Le résultat est :

$$\langle G_i^3, G_i^8 \rangle = \begin{cases} \left( -\frac{9}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{8}\right)^i, -\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{8}\right)^i \right) & \text{lorsque l'état de bord gauche est dans l'état 1} \\ \left( +\frac{9}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{8}\right)^i, -\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{8}\right)^i \right) & \text{lorsque l'état de bord gauche est dans l'état 2} \\ \left( 0, 3\sqrt{6} \left(-\frac{1}{8}\right)^i \right) & \text{lorsque l'état de bord gauche est dans l'état 3} \end{cases} \quad (3.70)$$

### 3.3. S'éloigner du couplage faible : le DMRG

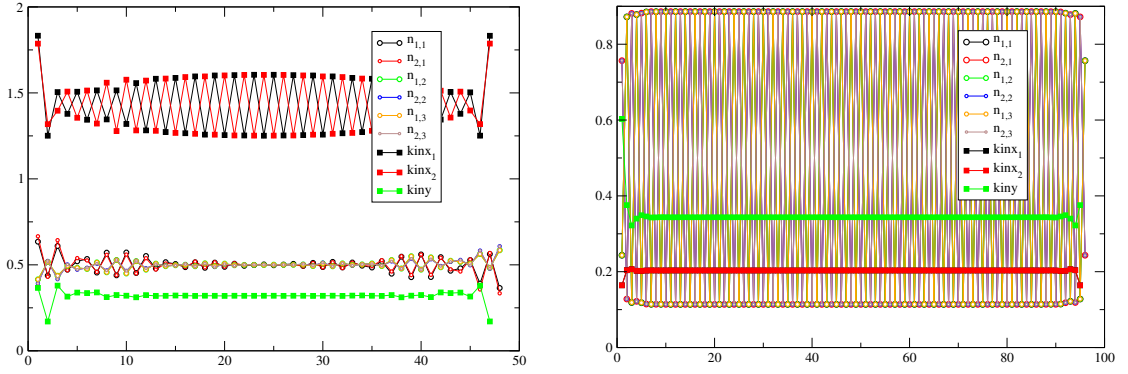


Figure 3.6 – Quantités locales (densités  $n_{\ell\alpha,i}$  et les énergies de liens) obtenues par DMRG pour les phases  $SP_\pi$  (à gauche, pour  $t_\perp = t$ ) et ODW (à droite, pour  $t_\perp = 0.2t$ , choisi différent du premier pour plus de netteté seulement) en fonction des sites (1 site = 2 puits) de la chaîne. Le nombre de site plus élevé pour la seconde chaîne plutôt que pour la première (96 versus 48) n'est pas systématiquement requis, mais aide à effacer des effets de bords non physiques (comme sur le premier diagramme) dûs à la courte taille du système. Les courbes de gauche correspondent au point  $U = 4, V = 2$  (unité de  $t$ ) de la phase  $SP_\pi$  caractérisée par des densités toutes égales (quantités avec des points), sans formation de singulet sur les barreaux (mesuré par les carrés verts, essentiellement à zéro) mais avec formation de singulets alternés le long des montants de l'échelle, similaires à la Fig. 3.3 et conformément au paramètre d'ordre local 3.48. Les courbes de droite correspondent au point  $U = -6, V = 6$  et montrent les quantités de la phase ODW qui alternent entre mettre trois fermions sur un puits et trois sur le second (e.g.  $(n_{1\alpha,i} = 1, n_{2\alpha,i} = 0)$  puis  $(n_{1\alpha,i+1} = 0, n_{2\alpha,i+1} = 1)$ ) sans lien transversal ou longitudinal comme représentée Fig. 3.3 et suivant le paramètre d'ordre local Eq. 3.46.

où la normalisation des générateurs dans la représentation fondamentale est choisie ici telle que  $\text{Tr } G^a G^b = 6\delta_{ab}$  par cohérence avec Ref. [136]. Le *bulk* de la phase de Haldane étant une succession de singulet, la contribution du *bulk* aux poids est donc nul. La non-nullité des poids dans l'Eq. 3.70 vient donc exclusivement de la partie délocalisée sur le site  $i$  du poids de l'état de bord de gauche noté L (et du bord de droit dans le cas d'une chaîne finie). Pour obtenir le poids total de celui-ci, il suffit donc de sommer sur tous les sites. Le résultat devient :

$$\langle\langle G_L^3 G_L^8 \rangle\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle\langle G_i^3, G_i^8 \rangle\rangle = \begin{cases} \left( \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) & \text{lorsque l'état de bord gauche est dans l'état 1} \\ & \text{(dit état de plus haut poids (hws) de la fondamentale)} \\ \left( -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) & \text{lorsque l'état de bord gauche est dans l'état 2} \\ \left( 0, -\sqrt{\frac{2}{3}} \right) & \text{lorsque l'état de bord gauche est dans l'état 3} \end{cases}, \quad (3.71)$$

qui sont les poids attendus des trois états de la représentation fondamentale de  $SU(3)$ . De même, au "bord droit" (noté R) de cette même chaîne semi-infinie qui est par construction



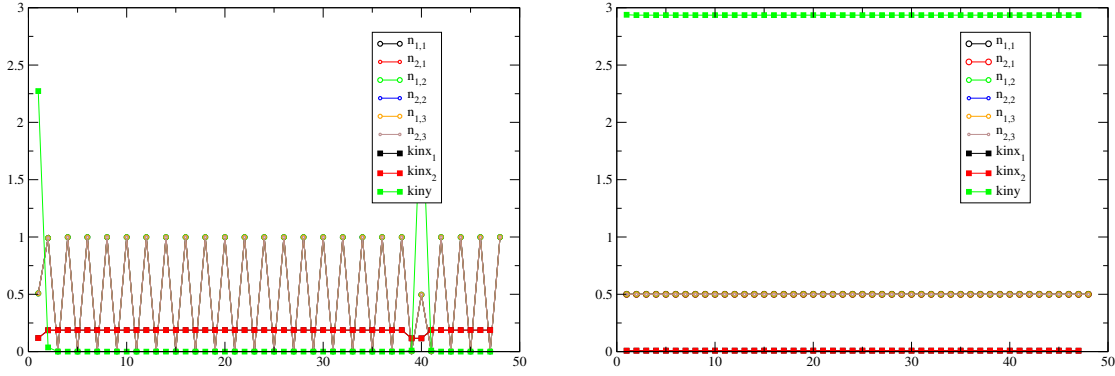


Figure 3.7 – Quantités locales obtenues par DMRG pour les phases CDW (à gauche) et BDW (à droite), les deux pour  $t_{\perp} = t$  et 48 sites. Les courbes de gauche, prises au point  $U = -12, V = -4$ , correspondent à la phase CDW qui alterne entre un double-puits complètement rempli et un double-puits vide (e.g.  $n_{\ell\alpha,i} = 1$  puis  $n_{\ell\alpha,i+1} = 0$ ) sans structure de lien, comme sur la Fig. 3.3 et puisque le paramètre d'ordre local est la densité sur site  $\sum_{\ell\alpha} n_{\ell\alpha,i}$ . Les courbes de droites prises au point  $U = 0, V = -2$  sont typiques de la phase BDW ou Rung Singlet : sur chaque site se forme un singulet (au sens  $SU(N)$ ) le long du barreau comme représenté Fig. 3.3 et d'après le paramètre d'ordre Eq. 3.59.

dans la représentation conjuguée de la fondamentale, le calcul donne :

$$\langle (G_R^3 G_R^8) \rangle = \sum_{i=\text{partie droite}} \langle (G_i^3, G_i^8) \rangle = \begin{cases} \left( -\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{6}} \right) & \text{lorsque l'état de bord droit est dans l'état 1} \\ \left( \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{6}} \right) & \text{lorsque l'état de bord droit est dans l'état 2} \\ \left( 0, \sqrt{\frac{2}{3}} \right) & \text{lorsque l'état de bord gauche est dans l'état 3} \end{cases} \quad (3.72)$$

qui correspondent aux poids de la conjuguée, soit les mêmes que les précédents à un signe global près. D'autres poids signifieraient d'autres représentations qui, si elles ne sont pas projectives, exclues d'emblée une phase SPT.

Les Cartans sur site peuvent par ailleurs s'exprimer en fonctions des densités locales de la même manière que l'expression du spin total selon  $z$  ( $S^z$ , Cartan de  $SU(2)$ ) d'un site :

$$\begin{aligned} \hat{G}_i^a &= \sum_{\alpha,\beta=1}^3 c_{1\alpha,i}^\dagger (G^a)_{\alpha\beta} c_{1\beta,i} + \sum_{\alpha,\beta=1}^3 c_{2\alpha,i}^\dagger (G^a)_{\alpha\beta} c_{2\beta,i} \\ &= \sum_{\alpha,\beta=1}^3 d_{1\alpha,i}^\dagger (G^a)_{\alpha\beta} d_{1\beta,i} + \sum_{\alpha,\beta=1}^3 d_{2\alpha,i}^\dagger (G^a)_{\alpha\beta} d_{2\beta,i} \quad (a = 3, 8) \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(n_{1,i} - n_{2,i}) & \text{si } a = 3 \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(n_{1,i} + n_{2,i} - 2n_{3,i}) & \text{si } a = 8, \end{cases} \end{aligned} \quad (3.73)$$

et les poids peuvent donc être obtenus à partir des données de DMRG tracées Sec. 3.3.2. Si la chaîne simulée numériquement était semi-infinie, il ne resterait plus qu'à sommer sur tous les sites et obtenir les poids attendus pour la représentation fondamentale ou sa conjuguée des

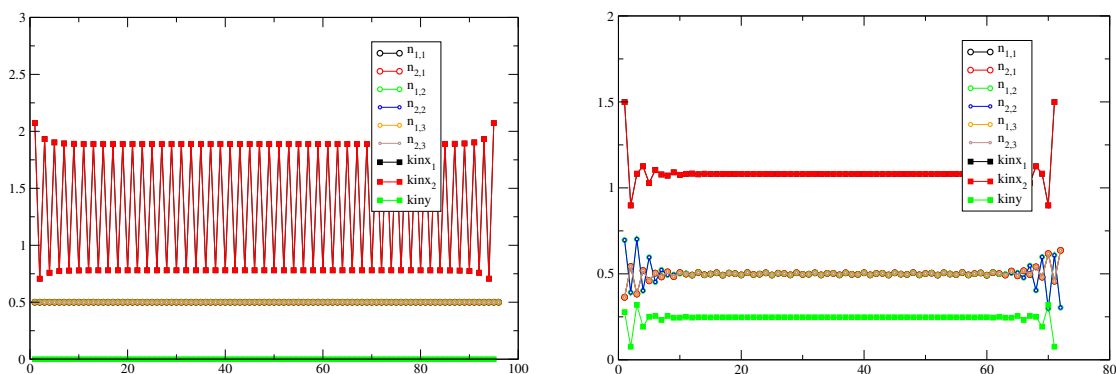


Figure 3.8 – Quantités locales obtenues par DMRG pour les phases  $SP_0$  (à gauche, avec 96 sites et pour  $t_{\perp} = 0.2t$ ) et SPT (à droite, avec 72 sites et pour  $t_{\perp} = t$ ). Les deux phases ne sont pas obtenues par couplage faible et en conséquence n'apparaissent que au delà. La première phase  $SP_0$  (au point  $U = V = 6$ ) est similaire à la phase  $SP_{\pi}$  mais avec cette fois-ci ses singulets longitudinaux en phase. Elle est représentée Fig. 3.3 et son paramètre d'ordre local est :  $\mathcal{O}_{SP_0} = (i) = \sum_{\alpha} (-1)^i (c_{1\alpha, i+1}^{\dagger} c_{1\alpha, i} + c_{2\alpha, i+1}^{\dagger} c_{2\alpha, i+h.c.})$ . Les quantités de droite sont celles de la phase SPT au point  $U = 20, V = 2$ . Le *bulk* a ses densités homogènes, sans structure de barreau (contrairement à la phase BDW) mais avec des liens longitudinaux qui respectent la symétrie orbitale et invariant par translation similaire à un état VBS comme représenté sur la Fig. 1.7. Elle n'a pas de paramètre d'ordre local mais dispose d'états de bord d'extension spatiale exponentiellement décroissante (certes systématique en DMRG, mais suffisamment rapide pour être fiable) qui se comportent comme prévu (d'après calcul des poids, cf Sec. 3.3.3). Ces états de bords brisent d'ailleurs la symétrie par inversion, conformément à ce qui est attendu pour une réalisation (parmi 6 possibles en DMRG rassemblées en deux classes suivant la disposition des représentations des états de bords, cf Sec. 3.3.3), d'où l'adjectif chiral dans le nom attribué à la phase SPT : chirale Haldane.

Eqs. 3.71 et 3.72. Dans le cas de la chaîne finie, ces poids totaux sont forcément nuls car le cas échéant briserait spontanément la symétrie continue  $SU(3)$ , impossible à 1D. Heureusement, dans le cas où la chaîne est suffisamment grande et puisque les états de bords sont d'extension spatiale exponentiellement décroissante, il est raisonnable de considérer que la contribution dans les poids du bord droit est négligeable sur la moitié gauche de la chaîne et vice-versa. Ainsi, pour obtenir les poids du bord gauche, on ne somme que sur la moitié gauche et l'approximation faite est négligeable vis-à-vis d'autres sources d'erreurs.

Ainsi, jusqu'à  $3 \times 3 \times 2 = 18$  (nombres d'états dans la fondamentale à gauche  $\times$  nombres d'états dans la conjuguée à droite + le contraire) réalisations sont possibles. Cependant, pour des raisons techniques évoquées Sec. 3.3.1, la symétrie  $U(1)^3$  qui conserve le nombre globale de chaque spin  $N_{\alpha}$  est implémentée au lieu de la vraie symétrie  $SU(3)$ , et donc seuls 6 états parmi les 18 sont accessibles, l'un d'entre eux étant représenté Fig. 3.8 (à droite). Le DMRG convergera aléatoirement vers l'un d'entre eux.

Une autre caractérisation de la SPT est possible par le DMRG grâce au spectre d'intrication puisque les énergies d'intrications sont les  $\log \omega_{\alpha}$  de la Sec. 3.3.1 qui sont forcément calculées.

Les énergies les plus basses du spectre (et surtout, leur dégénérescence) sont caractéristiques de la phase topologique d'après des prédictions théoriques sur des états produits de matrices de taille infinie [259, 260, 261]. Dans le cas de la chaîne finie de taille  $L$ , ces prédictions doivent être légèrement reconsidérées. Il est une fois encore utile de considérer l'état VBS précédent, en se limitant par exemple à celui d'état de bord gauche dans l'état 1 de la représentation fondamentale et de bord droit dans l'état 1 de la conjuguée (un des six états accessibles par le DMRG tel qu'implémenté). Il est possible de calculer le spectre d'intrication de cet état d'après la procédure Ref. [262] qui sépare le système en deux sous-systèmes pour en faire une décomposition de Schmidt [263, 264] afin d'obtenir :

$$\frac{\sqrt{1+2(-1/8)^{\ell_L}}\sqrt{1+2(-1/8)^{\ell_R}}}{\sqrt{3}\sqrt{1+2(-1/8)^L}}, \frac{\sqrt{1-(-1/8)^{\ell_L}}\sqrt{1-(-1/8)^{\ell_R}}}{\sqrt{3}\sqrt{1+2(-1/8)^L}} (\times 2), \quad (3.74)$$

où  $\ell_L$  et  $\ell_R$  sont les tailles du sous-système droit et gauche respectivement ( $L = \ell_L + \ell_R$ ). La prédiction théorique d'une dégénérescence de 3 pour l'énergie fondamentale d'intrication est donc légèrement brisée à taille finie. Cette levée peut être comprise par l'existence de l'interaction désormais non nulle entre les deux bords [265]. La levée décroît exponentiellement avec la taille du système (pour des moitiés comme sous-systèmes) et devient négligeable pour les tailles considérées Sec. 3.3.2. et les prédictions théoriques s'appliquent. Les spectres d'intrications des phases SPT qui apparaissent Figs. 3.5 sont tracés Fig. 3.9.

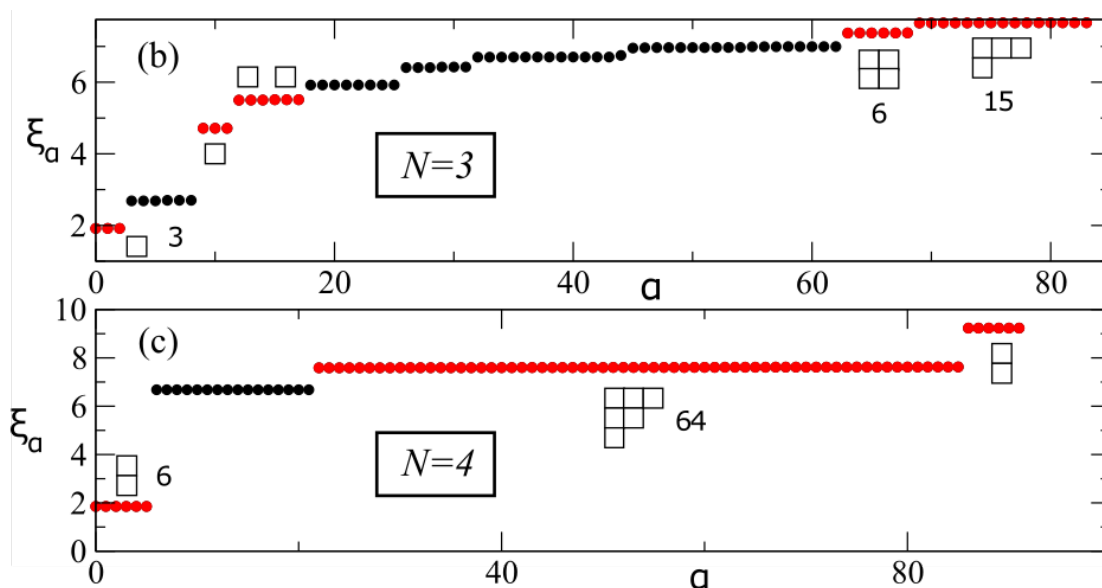


Figure 3.9 – Spectre d'intrication  $\xi_\alpha \propto \log \omega_\alpha$  des phases SPT pour  $N = 3$  et  $N = 4$  (de haut en bas) avec  $t_\perp = 1$ ,  $U = 20$  et  $V = 2$  (en unité de  $t$ ). L'abscisse est arbitraire et ne sert qu'à compter les dégénérescences). Le spectre des SPT obtenu à partir de chaîne de spin (effective ; niveaux dits bosoniques) sont en rouge tandis que la partie noire n'apparait que lorsqu'on autorise des fluctuations de charge (les niveaux sont dits fermioniques). Les nombres indiquent la dégénérescence, et le tableau d'Young est la représentation correspondante (à la conjugaison près, indistinguable par seule étude du spectre). Le fondamental (d'intrication) est dans la représentation de l'état de bord du sous-système de la décomposition de Schmidt conservé (par opposition au sous-système sur lequel on effectue la trace partielle). Cet état est créé au niveau de la coupure en deux sous-systèmes. Puisque cette représentation est projective pour  $SU(3)$ , respectivement  $SU(4)$ , il s'agit bien de SPT. Les autres niveaux bosoniques doivent aussi correspondre à des représentations projectives, mais potentiellement plus grandes. Ce n'est plus vrai pour les niveaux fermioniques.

### 3.4 Résumé du chapitre

En conclusion, le hamiltonien discret 2.36 restreint à ses termes sans interaction peut être diagonalisé pour donner deux bandes superposées. Il est alors utile de linéariser la relation de dispersion autour des quatre points de Fermi (deux par bande, cf Fig. 3.1). À la limite continue, les quatre types d'excitations particules-trous autour de ces points de Fermi (un type par point) peuvent être interprétés par des fermions de Dirac et décrits par des opérateurs de champ holomorphes  $L_{\ell\alpha}(z)$  ou antiholomorphes  $R_{\ell\alpha}(\bar{z})$  à une rotation de Wick près. Le hamiltonien (sans interaction) de la théorie des champs obtenue, est invariant conforme :

$$\mathcal{H}_0 = -i \sum_{\ell\alpha} v_F^\ell \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left( : R_{\ell\alpha}^\dagger(x) \partial_x R_{\ell\alpha}(x) : - : L_{\ell\alpha}^\dagger(x) \partial_x L_{\ell\alpha}(x) : \right), \quad (3.75)$$

où  $v_F^\ell = 2t \sin(k_F^\ell a_0)$  est la vitesse de Fermi avec  $k_F^\ell > 0$  le vecteur de Fermi pour chaque bande et  $a_0$  est le pas du réseau. À 1+1 D, l'invariance conforme propose une méthode pour calculer des fonctions de corrélations entre opérateurs primaires grâce à une technique appelée *Operator Product Expansion* (OPE), exploitable même pour le modèle avec des interactions perturbatives. Le terme d'interaction du hamiltonien dans la limite continue peut alors s'écrire en fonction d'opérateurs d'interactions  $O_i(z, \bar{z})$  justement primaires :

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \sum_{i=1}^{12} g_i \int dz d\bar{z} O_i(z, \bar{z}) \quad (3.76)$$

où les  $g_i(U, V)$  sont les couplages. L'invariance conforme du hamiltonien 3.75 suggère un schéma de renormalisation pour supprimer le détail des fluctuations des courtes longueurs d'ondes et obtenir un hamiltonien effectif plus descriptif des propriétés globales (qui caractérisent une phase). Celui-ci est donné par la résolution (numérique) des équations de renormalisation des couplages établies grâce aux OPEs.

Chaque point du diagramme de phase du couplage faible donnant le même hamiltonien effectif est dans la même phase pour finalement obtenir la Fig. 3.4. Lorsque le hamiltonien effectif est intégrable connu et complètement massif, à une transformation (une dualité) près, tous les degrés de liberté (de charge, orbital et de spin) sont fixés est la phase résultante est gappée. Grâce au paramètre d'ordre local de celle-ci, il est possible de remonter au paramètre d'ordre local exprimée dans les variables fermioniques initiales  $c$ . Ainsi sont caractérisées les phases d'onde de densité orbitale (ODW) et Spin-Peierls alternée ( $SP_\pi$ ) représentée Fig. 3.3. Sinon, la caractérisation est moins aisée. Il est néanmoins possible d'utiliser des techniques de bosonisation pour en faire l'étude. C'est ainsi que sont caractérisées les phases d'onde de densité de charge (CDW) ou d'onde de densité de lien (*bound*; BDW), faiblement gappées voire pas du tout pour un degré de liberté (et fortement gappées vis-à-vis de tous les autres).

Une méthode numérique, le DMRG, confirme ces résultats à couplage faible mais permet aussi d'explorer une partie du couplage fort et trouve alors la signature typique d'une phase topologique, là où toutes les phases de couplage faible étaient topologiquement triviales.

## 4 L'approche de couplage fort

D'après le DMRG, l'approche de couplage fort semble donc idéale pour étudier l'apparition de phases SPTs dans le modèle du double-puits. Elle est l'approche opposée au couplage faible puisqu'elle se base dans le régime de paramètres où les interactions dominent face au *hopping* longitudinal. Cette approche considère naturellement des configurations de particules quasi-classiques localisées dans les divers puits, rendant une partie du raisonnement plus intuitive que l'approche précédente. Comme celle-ci, elle est perturbative et ne prétend pas non plus explorer le régime de couplage moyen contrairement à l'approche numérique.

*La plupart de ces résultats sont discutés Refs. [198] et [136] réalisées dans le cadre de cette thèse.*

### 4.1 La limite atomique

L'ordre zéro de l'approche de couplage fort consiste à mettre le *hopping* longitudinal à zéro, et donc, de n'avoir à considérer qu'un seul site. À ce titre, les symétries sur site et l'algèbre sous-jacente vont jouer un rôle crucial dans la formulation et la résolution du problème. Ainsi, après une introduction sommaire de quelques notions utiles d'algèbre appliquées au problème du double-puits, il s'agira de trouver un premier diagramme de phase à cet ordre zéro : la limite atomique (i.e. d'un site).

#### 4.1.1 Tableaux d'Young, considérations sur les symétries

Il s'agit d'abord de présenter ces quelques notions d'algèbres qui seront utiles. Pour une introduction plus complète, voir Ref. [266] qui s'attarde particulièrement sur la symétrie  $SU(2)$ . Le lecteur familier avec ces notions peut sans problème sauter cette sous-section.

En chaque site, le hamiltonien avec les seules interactions (et le potentiel chimique, voire optionnellement le *hopping* transversal) Eq. 2.27 vérifie la symétrie  $SU(N)$ . Cela signifie (par abus de langage) que l'espace de Hilbert (en chaque site) est une représentation de ce même groupe de symétrie. Admettons pour commencer qu'il n'existe (en chaque site) qu'un seul puits, et que  $N = 2$ . L'ensemble des états possibles pour des fermions indiscernables sont : aucune particule, une particule de spin *up* ou *down*, un singulet (magnétique) de deux spins *up* et *down*. D'après le principe d'exclusion de Pauli, et hors bandes ou orbitales d'énergie supérieure, il n'existe aucun autre état possible. L'absence de particules correspond à l'état générant la représentation triviale de  $SU(2)$ , notée **1** (en gras) car de dimension 1. Les deux états de spins opposés engendrent la représentation fondamentale (et définissante) de  $SU(2)$ , notée **2**, tandis que l'antisymétrisation de ces deux états forme le dernier état possible mais à deux particules qui génère lui aussi une représentation triviale de  $SU(2)$ , la même que la précédente à un isomorphisme près et donc également notée **1**. Ainsi, la représentation de l'espace de Hilbert total (d'un site) est réductible car somme directe des trois représentations précédentes, et notée :  $2 \times \mathbf{1} \oplus \mathbf{2}$ . De toutes les représentations possibles de  $SU(2)$ , seules les représentations complètement antisymétriques sont permises à cause du principe d'exclusion de Pauli. Grâce à un degré de liberté supplémentaire, comme l'existence d'un second puits, une symétrisation vis-à-vis de ce degré de liberté devient alors possible. Dans le cas  $SU(2)$  avec deux puits, des états à deux particules antisymétriques vis-à-vis de leur spin *up* et *down* mais symétriques vis-à-vis de l'indice de puits (restant ainsi globalement antisymétriques) sont dès lors possibles. C'est également le cas de l'état à deux particules de même spin mais antisymétrisé vis-à-vis de l'indice de puits. Les états appartiennent alors non seulement à des représentations de  $SU(2)$  vis-à-vis du spin mais aussi à des représentations de  $SU(2)$  par rapport aux puits (même si la symétrie n'est pas vérifiée dans le système, ses représentations indiquent correctement une certaine base de l'espace de Hilbert). L'utilisation de la notation précédente pour les représentations devient vite laborieuse pour  $N > 2$  et reste peu explicite (vis-à-vis des symétrisations), mais une autre notation peut la compléter : celle des tableaux

d'Young.

Ces tableaux d'Young servaient originellement à indexer les permutations du groupe symétrique  $S_n$  [266]. Cependant, il s'avère que ceux-ci ont une correspondance avec toutes les représentations irréductibles des  $SU(N)$  [267], autrement dit, pour  $N$  fixé, il est possible d'associer à chaque représentation de  $SU(N)$  un tableau d'Young. Plus précisément, dans le cas de la représentation triviale de  $SU(N)$  (pour tous  $N$ ) de dimension 1, on lui associe le tableau d'Young trivial d'un point : " $\bullet$ ". À la représentation fondamentale de dimension  $N$  est associée une boîte : " $\square$ ". L'ensemble des états à deux particules avec "spins"  $SU(N)$  est d'une part composé des états antisymétrisés de la représentation de dimension  $N(N - 1)/2$  notée " $\begin{smallmatrix} \square \\ \square \end{smallmatrix}$ " (une boîte au dessus de l'autre), et d'autre part des états symétrisés qui appartiennent à la représentation de dimension  $N(N + 1)/2$  notée " $\begin{smallmatrix} \square & \square \end{smallmatrix}$ " (une boîte à côté de l'autre). En fonction des symétrisations ou antisymétrisations successives en rajoutant des particules, et donc des boîtes, il est possible de construire la totalité des représentations irréductibles de  $SU(N)$ . Les tableaux d'Young obtenus auront tous une structure de la forme :

$$\begin{array}{cccccccc}
 \square & & & & & & & \\
 \square & \square & & & & & & \\
 \square & \square & \square & & & & & \\
 \square & \square & & & & & & \\
 \square & & & & & & & 
 \end{array}, \tag{4.1}$$

c'est-à-dire avec un nombre de boîtes décroissant au sens large d'une ligne supérieur vers une ligne inférieure mais aussi décroissant au sens large d'une colonne de gauche vers une colonne de droite. Par ailleurs, antisymétriser  $N$  "spins"  $SU(N)$  forme systématiquement un singulet et donc la représentation engendrée par lui est triviale. Graphiquement, une colonne à  $N$  boîtes d'un tableau d'Young peut donc être retranchée au tableau total car les représentations avec et sans cette colonne sont alors équivalentes. Il est ainsi d'usage de ne représenter les tableaux qu'avec des colonnes de  $N - 1$  boîtes au maximum.

Il est alors possible de dresser une liste plus concise des représentations irréductibles du groupe  $SU(N)$  :

$$SU(2) : \bullet, \square, \begin{smallmatrix} \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square \end{smallmatrix}, \dots \tag{4.2a}$$

$$SU(3) : \bullet, \square, \begin{smallmatrix} \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square & \square \end{smallmatrix}, \dots \tag{4.2b}$$

$$\text{mais aussi } \begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square \end{smallmatrix}, \dots \tag{4.2c}$$

$$SU(4) : \bullet, \square, \begin{smallmatrix} \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square & \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square \end{smallmatrix}, \dots \tag{4.2d}$$

Les représentations qui n'ont qu'une ligne (dont la totalité des représentations de  $SU(2)$ ) sont dites totalement symétriques, tandis que celles à une seule colonne sont dites totalement antisymétriques. Deux représentations de  $SU(N_1)$  et  $SU(N_2)$  respectivement (avec  $N_1 \neq N_2$ ) ayant le même tableau sont différentes et n'auront jamais la même dimension (représentation



## Chapitre 4. L'approche de couplage fort

triviale exclue). Si  $A$  est une représentation, alors il existe une unique (au sens précédent) représentation appelée représentation conjuguée notée  $\bar{A}$  telle que l'antisymétrisation entre  $A$  et  $\bar{A}$  donne la représentation triviale. Graphiquement, la représentation conjugué de  $A$  est donnée par le tableau d'Young "complémentaire" qui manque au tableau d'Young de  $A$  pour faire un tableau avec des colonnes de  $N$  boîtes seulement. Par exemple pour  $SU(3)$  :

$$\overline{\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}} = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} . \quad (4.3)$$

Lorsque  $A = \bar{A}$ , la représentation est dite autoconjuguée. Deux représentations conjuguées ont la même dimension. La représentation adjointe est la représentation définissante de l'algèbre de Lie  $\mathfrak{su}(N)$  et est toujours représentée par un tableau d'une colonne à  $N - 1$  boîtes suivie d'une colonne à une seule boîte seulement. Elle est toujours autoconjuguée et sa dimension est la même que le nombre de générateurs du groupe de Lie  $SU(N)$ . Enfin, les spins ne sont rigoureusement que les états des diverses représentations irréductibles de  $SU(2)$ , ou plus généralement les états du groupe  $spin(N)$ , qui coïncide avec  $SU(2)$  lorsque  $N = 2$ . Pour  $SU(N)$ ,  $N > 2$ , il n'existe pas de dénomination générique <sup>1</sup>. Ainsi, faute de meilleur nom, on les appellera "spins" ou plus simplement spins. Le calcul de la décomposition en somme directe de représentations irréductibles d'un produit tensoriel de deux ou plus représentations de  $SU(N)$  peut être réalisé de manière systématique grâce à ces tableaux [268] et l'obtention de la nouvelle base à partir de l'ancienne est obtenue grâce aux coefficients de Clebsch-Gordan souvent calculés numériquement [269].

Ainsi, dans le cas d'un seul puits, et donc pour des fermions avec un seul "spin"  $SU(N)$ , les représentations disponibles seront :

$$SU(2) : \bullet \left( = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \right), \square, \quad (4.4a)$$

$$SU(3) : \bullet \left( = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \right), \square, \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}, \quad (4.4b)$$

$$SU(4) : \bullet \left( = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \right), \square, \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}, \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \quad (4.4c)$$

$$\text{etc.} \quad (4.4d)$$

Y figurent ainsi seules les représentations totalement antisymétriques. Avec un deuxième puits, les choses se compliquent, mais puisque la fonction d'onde totale de chaque état doit être antisymétrique par permutation des fermions, il est possible de considérer une telle fonction d'onde comme état d'une représentation de  $SU(2N)$  qui, comme précédemment, doit être totalement antisymétrique. Cette dernière représentation peut ensuite être décomposée en

<sup>1</sup>Quelques cas particuliers existent comme les couleurs, états de la représentation fondamentale de  $SU(3)$ , les anti-couleurs, états de sa représentation conjuguée, ou les saveurs, états de la représentation fondamentale de  $SU(6)$ .



une somme de hamiltoniens sur site indépendants les uns des autres :

$$H_{\text{dw},t=0} = \sum_i H_{\text{site}}(i), \quad \text{où} \quad (4.7a)$$

$$H_{\text{site}}(i) = - \left( \mu + \frac{U+V}{2} \right) n_i + \frac{U+V}{4} n_i^2 + 2t_{\perp} T_i^z + (U-V)(T_i^x)^2 + 2V(T_i^z)^2, \quad (4.7b)$$

où, pour rappel,  $\vec{T}$  est le pseudo-spin total SU(2) orbital tel que  $T_i^a = \frac{1}{2} \sum_{m,n,\alpha} d_{m\alpha,i}^{\dagger} \sigma_{mn}^a d_{n\alpha,i}$  où les  $\{\sigma^a\}$  sont les matrices de Pauli définies Ann. A.2 et  $n_i = \sum_{\ell\alpha} d_{\ell\alpha,i}^{\dagger} d_{\ell\alpha,i}$  est le nombre total de particules sur le site  $i$ . Puisque les hamiltoniens de site sont indépendants les uns des autres, étudier l'un d'entre eux seulement est suffisant, et l'indice de site  $i$  est donc temporairement omis jusqu'à la fin de la section. Par ailleurs, à demi remplissage :

$$\mu = \frac{N-1}{2} (U+V), \quad (4.8)$$

et chaque site contient  $N$  particules en moyenne.

Le hamiltonien sur site a la symétrie  $U(1)_c$  et donc le nombre de particules sur site  $n_i$  est un bon nombre quantique pour indexer les états de l'espace de Hilbert. De même, le carré du pseudo-spin  $\vec{T}_i^2 = T(T+1)$ , ou Casimir de SU(2) orbital, commute avec le hamiltonien et est lui aussi un bon index pour les états. Lorsque  $U=V$  (un *fine-tuning*), la symétrie  $U(1)_o$  est régénérée, et la projection sur  $z$  du pseudo-spin  $T^z$  (ou Cartan de SU(2) orbital) est à son tour un bon nombre quantique. Pour certains états, il reste un index utilisable même en l'absence de cette symétrie  $U(1)_o$ . Le hamiltonien sur site est également symétrique SU( $N$ ) (de spin nucléaire) et donc le Casimir quadratique  $\vec{S}^2 = S(S+1)$  (et cubique lorsqu'il existe) en plus de tous les générateurs du groupe de Lie SU( $N$ ) peuvent constituer des bons nombres quantiques (on choisit conventionnellement les opérateurs de Cartan parmi les générateurs). Les générateurs s'expriment dans la représentation des fermions :

$$S^a = \sum_{\ell\alpha\beta} d_{\ell\alpha}^{\dagger} \tilde{G}_{\alpha\beta}^a d_{\ell\beta} \quad (4.9)$$

où les  $\tilde{G}^a$ ,  $a = 1 \dots N^2 - 1$  sont les générateurs de SU( $N$ ) dans sa représentation matricielle, comme les matrices de Pauli pour SU(2) ou de Gell-Mann pour SU(3), choisis avec la normalisation  $\text{Tr}(\tilde{G}^a \tilde{G}^b) = \delta_{ab}/2$ , convention <sup>2</sup> utilisée dans tout ce chapitre. Ainsi, le spin total  $S$ , ainsi que la valeur des Cartans de SU( $N$ ), soit par exemple  $S^z$  pour SU(2) ou  $S^3$  et  $S^8$  pour SU(3), sont des bons nombres quantiques pour indexer les états du hamiltonien. Pour terminer de construire l'ECOC (espace complet des observables qui commutent) du hamiltonien, il faudrait quelques autres observables associées à des symétries discrètes peu explicites à identifier au cas par cas.

L'espace de Hilbert du hamiltonien Eq. 4.7b est (nonobstant quelques points de rigueur

---

<sup>2</sup>La convention était différente pour le calcul des poids Sec. 3.3.3 et de celle utilisée Ann. C. Chacune de ces convention est résumée Ann. A.2.

mathématiques) une représentation réductible de  $SU(2N)$  qui peut s'écrire :

$$\bullet \oplus \square \oplus \square \oplus \dots \oplus 2N \left\{ \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \right\}, \quad (4.10)$$

pour une dimension totale de :

$$\binom{2N}{0} + \binom{2N}{1} + \binom{2N}{2} + \dots + \binom{2N}{2N-1} + \binom{2N}{2N} = 2^{2N}, \quad (4.11)$$

avec :

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}. \quad (4.12)$$

Ainsi, étant donnée la structure de l'espace de Hilbert Eq. 4.10 et les symétries du hamiltonien à un site Eq. 4.7b, la construction Eqs. 4.5 est adaptée pour diagonaliser par bloc le hamiltonien. Lorsque  $N = 2$  ou  $3$ , l'espace de Hilbert est suffisamment petit pour être formellement exactement diagonalisé, avec ou sans assistance par ordinateur (par exemple sur *Mathematica*). Le spectre obtenu pour  $N = 2$  est :

$$E_{n=0}(\bullet, T=0) = E_{n=4}(\bullet, T=0) = 0, \quad (4.13a)$$

$$E_{n=1}(\mathbf{2}, T=1/2) = E_{n=3}(\mathbf{2}, T=1/2) = \begin{cases} t_{\perp} - \frac{1}{2}(U+V) & (T^z = +1/2; \times 2) \\ -t_{\perp} - \frac{1}{2}(U+V) & (T^z = -1/2; \times 2) \end{cases}, \quad (4.13b)$$

$$E_{n=2}(\mathbf{3}, T=0) = -(U+V) (\times 3), \quad (4.13c)$$

$$E_{n=2}(\bullet, T=1) = \begin{cases} -\frac{1}{2}(U-V) - \sqrt{4t_{\perp}^2 + \left(\frac{U-V}{2}\right)^2} & (T^x = 0, \text{ lorsque } t_{\perp} = 0) \\ -\frac{1}{2}(U-V) + \sqrt{4t_{\perp}^2 + \left(\frac{U-V}{2}\right)^2} & (T^y = 0, \text{ lorsque } t_{\perp} = 0) \\ -2V & (T^z = 0, \text{ lorsque } t_{\perp} = 0), \end{cases} \quad (4.13d)$$

soit  $2^4 = 16$  états, et pour  $N = 3$  :

$$E_{n=0}(\bullet, T = 0) = E_{n=6}(\bullet, T = 0) = 0, \quad (4.14a)$$

$$E_{n=1}(\mathbf{3}, T = 1/2) = E_{n=5}(\bar{\mathbf{3}}, T = 1/2) = \begin{cases} t_{\perp} - (U + V) & (T^z = +1/2; \times 3) \\ -t_{\perp} - (U + V) & (T^z = -1/2; \times 3) \end{cases}, \quad (4.14b)$$

$$E_{n=2}(\mathbf{6}, T = 0) = E_{n=4}(\bar{\mathbf{6}}, T = 0) = -2(U + V) (\times 6), \quad (4.14c)$$

$$E_{n=2}(\bar{\mathbf{3}}, T = 1) = E_{n=4}(\mathbf{3}, T = 1) = \begin{cases} -\frac{3}{2}U - \frac{1}{2}V - \sqrt{4t_{\perp}^2 + \left(\frac{U-V}{2}\right)^2} & (\times 3) \\ -\frac{3}{2}U - \frac{1}{2}V + \sqrt{4t_{\perp}^2 + \left(\frac{U-V}{2}\right)^2} & (\times 3) \\ -U - 3V & (T^z = 0; \times 3) \end{cases}, \quad (4.14d)$$

$$E_{n=3}(\mathbf{8}, T = 1/2) = \begin{cases} t_{\perp} - 2(U + V) & T^z = +1/2 (\times 8) \\ -t_{\perp} - 2(U + V) & T^z = -1/2 (\times 8) \end{cases}, \quad (4.14e)$$

$$E_{n=3}(\bullet, T = 3/2) = \begin{cases} t_{\perp} - U - V - \sqrt{4t_{\perp}^2 - 2t_{\perp}U + U^2 + 10t_{\perp}V - 4UV + 7V^2} \\ -t_{\perp} - U - V - \sqrt{4t_{\perp}^2 + 2t_{\perp}U + U^2 - 10t_{\perp}V - 4UV + 7V^2} \\ t_{\perp} - U - V + \sqrt{4t_{\perp}^2 - 2t_{\perp}U + U^2 + 10t_{\perp}V - 4UV + 7V^2} \\ -t_{\perp} - U - V + \sqrt{4t_{\perp}^2 + 2t_{\perp}U + U^2 - 10t_{\perp}V - 4UV + 7V^2} \end{cases}, \quad (4.14f)$$

soit  $2^6 = 64$  états. Pour les valeurs de  $N$  supérieures, la diagonalisation exacte devient de plus en plus compliquée mais peut numériquement être optimisée en prenant en compte les nombres quantiques évoqués dans cette section.

### 4.1.3 Diagrammes de la limite atomique

Grâce au spectre du hamiltonien à un site, il est possible de tracer le diagramme de phase dans la limite atomique, c'est-à-dire les régimes de paramètres qui partagent les mêmes états fondamentaux. On obtient ainsi la Fig. 4.1 pour  $N = 2$ , la Fig. 4.2 pour  $N = 3$  et la Fig. 4.3 pour  $N = 4$ .

Les phases singulets avec les mêmes nombres quantiques ( $n$ ,  $S$  et  $T$ ) se distinguent par une symétrie discrète. Pour  $N = 2$ , l'un des deux singulets (I) est une combinaison des états de pseudo-spin  $\pm 1$  selon l'axe  $z$  et l'autre (II) est de pseudo-spin nul. Leur comportement n'est donc pas équivalent face à la symétrie d'échange  $\ell = 1 \leftrightarrow 2$  par exemple. Les deux phases singulets de SU(3) (II) et (III) se distinguent plus directement par la valeur propre qu'ils ont vis-à-vis de l'opérateur  $(-1)^{T^z+1/2}$ , c'est-à-dire la parité de  $T^z + 1/2$  : (+1) pour le singulet (II) et (-1) pour le singulet (III). Les phases singulets verts qui apparaissent Fig. 4.2 et Fig. 4.3 indiquent que les états fondamentaux (!) sont soit un double-puits complètement vide ( $n = 0$ ), soit complètement plein ( $n = 6$  pour  $N = 3$ ,  $n = 8$  pour  $N = 4$ ) sans superposition possible d'où le nom de "singulet". Ce résultat suggère l'existence de la phase dimérisée CDW représentée Fig. 3.3 et cohérent avec les prédictions de couplage faibles Fig. 3.4. Pour les autres singulets,

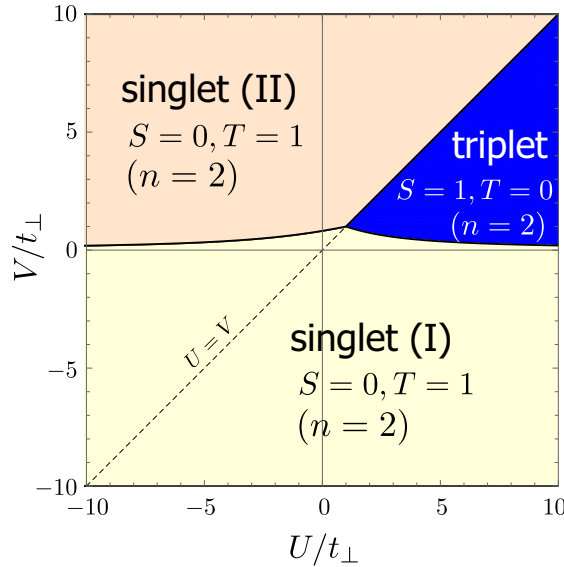


Figure 4.1 – Diagramme de phase de la limite atomique de  $H_{\text{site}}$  pour  $N = 2$ . Il s’y trouve trois phases : (i) la phase triplet de  $SU(2)$  avec  $n = 2$ ,  $S = 1$  ou alternativement notée par la représentation du spin  $\mathbf{3}$ , et  $T = 0$  (représentation triviale du pseudo-spin orbital), en bleu, d’énergie du fondamental donnée Eq. 4.13c, (ii) la phase singulet (ou *singlet*) de  $SU(2)$  (I) avec  $n = 2$ ,  $S = 0$  et  $T = 1$ , en jaune pâle, dont l’énergie du fondamental est donnée par la première équation de Eq. 4.13d, et (iii) la phase singulet de  $SU(2)$  (II) avec  $n = 2$ ,  $S = 0$  et  $T = 1$ , en orange pâle, l’énergie du fondamental est donnée par la troisième équation de Eq. 4.13d. Les deux dernières phases diffèrent par un nombre quantique issu d’une symétrie discrète cachée.

la prédiction n’est pas aussi complète : les phases prévues par la limite atomique sont des phases une fois dégénérée seulement, sans autres caractéristiques particulières. Elle sont souvent dites triviales. C’est le cas de la phase BDW ou *Rung Singlet*, mais pas le cas de la phase ODW qui est dimérisée. Le résultat reste cependant cohérent avec les calculs de DMRG Fig. 3.5. C’est un exemple de cas où le couplage faible et le couplage fort donnent un résultat différent à cause d’une transition de phase qui se produit entre les deux régimes.

Considérer un *hopping* longitudinal de manière perturbative ne changera pas les prédictions sur les phases singulets de manière qualitative (ou moins dans les premiers ordres) qui restent des singulets. Un tel *hopping* peut cependant changer considérablement les prédictions des phases dégénérées en bleu et cyan de la limite atomique, et c’est exactement la seconde étape de l’approche par couplage fort. L’étude de ces dernières phases est particulièrement importantes puisque c’est au sein de celles-ci que les phases topologiques suggérées par le DMRG apparaissent.

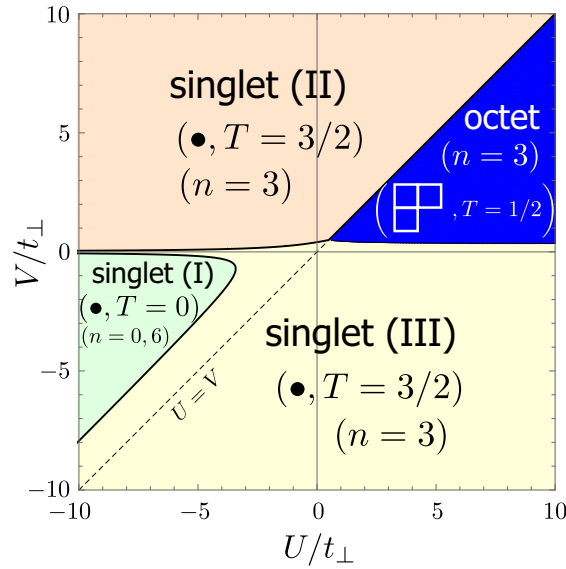


Figure 4.2 – Diagramme de phase de la limite atomique de  $H_{\text{site}}$  pour  $N = 3$ . Il s’y trouve quatre phases : (i) la phase octet de  $SU(3)$  avec  $n = 3$ ,  $\mathbf{8}$  (représentation adjointe), et  $T = 1/2$ ,  $T^z = -1/2$ , en bleu, dont l’énergie du fondamental est donnée par la seconde équation de Eq. 4.14e, (ii) la phase singulet de  $SU(3)$  (I) avec  $n = 0$  ou  $6$ ,  $\bullet$ , et  $T = 0$ , en vert d’énergie Eq. 4.14a, (iii) la phase singulet de  $SU(3)$  (II) avec  $n = 3$ ,  $\bullet$ , et  $T = 3/2$ , en orange pâle, première équation de Eq. 4.14f, et (iv) la phase singulet de  $SU(3)$  (III) avec  $n = 3$ ,  $\bullet$ , et  $T = 3/2$ , en orange pâle, troisième équation Eq. 4.14f.

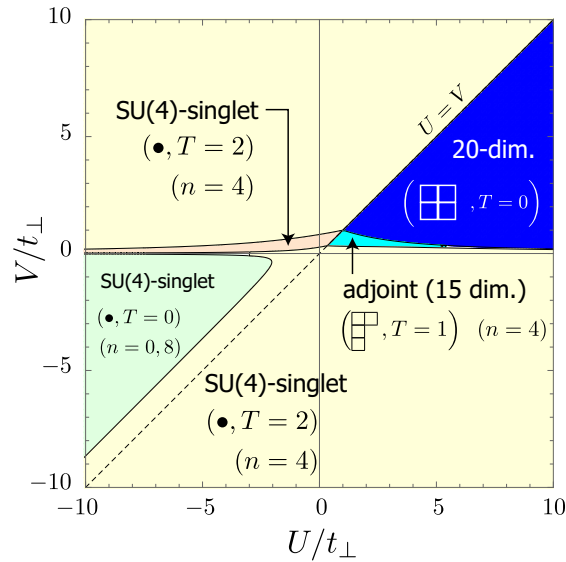


Figure 4.3 – Diagramme de phase de la limite atomique de  $H_{\text{site}}$  pour  $N = 4$ . Il s’y trouve cinq phases : (i) la phase 20-uplet de  $SU(4)$  avec  $n = 4$ ,  $\mathbf{20}$ , et  $T = 0$ , en bleu, (ii,iii,iv) les phases singulet de  $SU(4)$  avec  $n = 0$  ou  $8$ ,  $\bullet$ , et  $T = 0$ , en vert ou avec  $n = 4$ ,  $\bullet$  et  $T = 2$  en jaune pâle et orange pâle, qui diffèrent par un nombre quantique d’une symétrie discrète, et (v) la phase 15-uplet de  $SU(4)$  avec  $n = 4$ ,  $\mathbf{15}$  (représentation adjointe), et  $T = 1$ , en cyan.

## 4.2 La perturbation par le terme de *hopping*

La limite atomique permet déjà d'avoir une partie du diagramme de phase, mais ne suffit pas toujours lorsque le l'état fondamental obtenu est dégénéré plusieurs fois. Dans ce cas, il est utile d'aller plus loin dans la perturbation en connectant les sites les uns aux autres grâce au *hopping*  $t$ . Les phases obtenues seront décrites plus en détails dans la section suivante.

### 4.2.1 Approche générale

Plus précisément, l'approche consiste à se restreindre en chaque site au sous-espace propre fondamental indiqué par le diagramme de phase de la limite atomique. Puis, en considérant deux sites seulement, le *hopping* longitudinal est réintroduit perturbativement et peut lever les dégénérescences des fondamentaux des deux sites. Il est alors possible de définir un hamiltonien effectif, dit de couplage fort, qui décrit cette levée de dégénérescence sur les états fondamentaux qui restent de plus basse énergie que les états jetés pour un *hopping* suffisamment petit.

Le cas typique, à demi-remplissage, est d'avoir  $N$  fermions sur chaque site à l'état fondamental. L'application perturbative du *hopping* au premier ordre transvase une particule : l'un des sites aura alors  $N + 1$  particules, et l'autre  $N - 1$  particules. Un tel état n'étant (en général) pas un état fondamental, le hamiltonien effectif qui est restreint au sous-espace des fondamentaux de l'ordre zéro n'est donc pas modifié par le premier ordre en perturbation. Il faut aller au second ordre pour qu'une seconde application du *hopping* sur l'état transvasé permette à nouveau d'obtenir des états avec  $N$  particules dans chaque site qui pourront éventuellement s'exprimer en fonction des états fondamentaux initiaux.

Plus formellement, si  $\mathfrak{F}$  est l'espace de Hilbert sur un site (de dimension  $2^N$ ) et  $\mathfrak{F}_0 \subset \mathfrak{F}$  le sous-espace des états fondamentaux à un site à l'ordre zéro et d'énergie  $E_0$ , il va s'agir de restreindre le hamiltonien à deux sites avec *hopping*  $t$  Eq. 2.27 (mais à deux sites seulement) au sous-espace  $\mathfrak{F}_0 \otimes \mathfrak{F}_0$  avec seulement les paires d'états dont le remplissage moyen est  $N$ . En notant  $\mathfrak{G}_0 \subset \mathfrak{F}_0 \otimes \mathfrak{F}_0$  cet espace, son projecteur s'écrit  $\mathcal{P}_0 = \sum_{\psi \in \mathfrak{G}_0} |\psi\rangle\langle\psi|$  et son complémentaire  $\mathcal{Q}_0 = \text{Id}_{\mathfrak{F}_0 \otimes \mathfrak{F}_0} - \mathcal{P}_0$ . Le hamiltonien perturbatif au second ordre en  $t$  (ou  $t/U$  où  $U$  désigne les interactions de manière générale) s'écrit [270] :

$$H_2 = \mathcal{P}_0 H_{\text{cin}} \mathcal{Q}_0 (2E_0 - H_{\text{site}})^{-1} \mathcal{Q}_0 H_{\text{cin}} \mathcal{P}_0, \quad (4.15)$$

où  $H_{\text{cin}}$  est le terme cinétique, c'est-à-dire le terme de *hopping* :

$$H_{\text{cin}} = -t \sum_{\ell\alpha,i} \left( d_{\ell\alpha,i+1}^\dagger d_{\ell\alpha i} + h.c. \right). \quad (4.16)$$

Le dénominateur qui apparaît Eq. 4.15 n'est jamais nul grâce au projecteur complémentaire  $\mathcal{Q}_0$  qui le restreint hors des états d'énergies  $2E_0$  (somme des énergies des fondamentaux des deux sites). Le hamiltonien effectif étant restreint à  $\mathfrak{G}_0$ , le terme d'ordre zéro n'engendre qu'un



*off-set* d'énergie  $2E_0$  qui peut être absorbé dans la phase dépendante du temps, tandis que le terme d'ordre un est très souvent nul. Ainsi, le hamiltonien Eq. 4.15 se trouve souvent être également le hamiltonien effectif total de couplage fort au second ordre de perturbation.

Pour  $N = 2$ , la détermination du hamiltonien Eq. 4.15 peut être réalisée à la main dans la zone du triplet de la Fig. 4.1. Après calcul (voir Ref. [212] pour un calcul similaire), celui-ci s'exprime :

$$H_{\text{eff}, 2 \text{ sites}}^{N=2} = \frac{2t^2}{U+V} \sum_{a=1}^3 S_{i=1}^a S_{i=2}^a, \quad (4.17)$$

où les  $S_i^a$  sont les opérateurs de spins SU(2) locaux dans l'espace restreint. Au second ordre en  $t$ , il est impossible pour la perturbation de s'étaler sur plus de deux sites. Le hamiltonien effectif de fort couplage sur tous les sites (à un *off-set* près) est donc :

$$H_{\text{eff}}^{N=2} = \sum_i \frac{2t^2}{U+V} \sum_{a=1}^3 S_i^a S_{i+1}^a. \quad (4.18)$$

Ce hamiltonien est le hamiltonien de la chaîne antiferromagnétique de Heisenberg où en chaque site se trouve un triplet de spin 1 de SU(2), qui engendre la phase SPT de Haldane de spin-1 d'après la Sec. 1.2. Ainsi, tant que le régime de fort couplage reste valable, l'aire en bleu du diagramme de phase Fig. 4.1 correspond à la phase de Haldane de spin 1.

Pour  $N = 4$ , et de manière plus générale pour tout  $N$  pair, le hamiltonien effectif Eq. 4.18 reste valable [212] dans la zone bleu de la Fig. 4.3 qui reste essentiellement inchangée pour tout  $N$ . Les états fondamentaux sont alors l'ensemble des états dans la représentation de SU( $N$ ) de tableau d'Young rectangulaire :

$$N/2 \left\{ \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \right\}. \quad (4.19)$$

Dans ces nouvelles représentations, l'état fondamental du hamiltonien Eq. 4.18 a été également identifié comme étant une généralisation de la phase topologique de Haldane [237, 212, 271, 261, 272].

### 4.2.2 Cas de l'adjointe de SU(3)

Il est possible d'appliquer exactement la même méthode pour étudier la zone bleu de la Fig. 4.2 où les états fondamentaux sont dans la représentation adjointe de SU(3). Le raisonnement pour les  $N$  pairs ne s'appliquent plus, et le calcul direct est nettement plus laborieux. Le modèle Eq. 4.18 ne s'applique pas. Il reste possible de faire le calcul analytique par ordinateur (code *Mathematica* sur *cluster* disponible sur demande). Pour identifier les opérateurs pertinents du hamiltonien effectif, il est utile de décomposer l'espace de Hilbert effectif en somme

de représentations irréductibles (de SU(3) ; décomposition de Clebsh-Gordan) :

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \simeq \underbrace{\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array}}_{27} \oplus \underbrace{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}}_{10} \oplus \underbrace{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}}_{\overline{10}} \oplus \underbrace{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}}_{8_S} \oplus \underbrace{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}}_{8_A} \oplus \dots \quad (4.20)$$

$$(\mathbf{8} \otimes \mathbf{8} = \mathbf{27} \oplus \mathbf{10} \oplus \overline{\mathbf{10}} \oplus \mathbf{8}_S \oplus \mathbf{8}_A \oplus \mathbf{1}),$$

(où les indices "S" et "A" labélistent les deux représentations  $\mathbf{8}$ ). Le lemme de Schur indique alors que toute interaction d'un hamiltonien (à deux sites) peut être complètement paramétrisée par six coefficients indépendants correspondants aux six représentations irréductibles qui apparaissent dans le membre droit de l'Eq. 4.20. Le hamiltonien effectif à 2 sites est donc de la forme [273] :

$$a_{27}P_{27} + a_{10}P_{10} + a_{\overline{10}}P_{\overline{10}} + a_{8_S}P_{8_S} + a_{8_A}P_{8_A} + a_1P_1 \quad (4.21)$$

avec  $P_R$  l'opérateur de projection sur la représentation irréductible  $R$  et  $a_R$  le coefficient réel correspondant. Dans le cas de SU(2), l'opérateur de projection s'exprime uniquement en fonction du Casimir quadratique  $\mathcal{C}_2$  (ou alternativement  $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ ) et de l'identité comme dans l'Eq. 1.33b. Pour SU(3) (ou SU( $N$ ),  $N > 3$ ), les Casimirs d'ordre supérieurs en plus d'autres opérateurs sont a priori nécessaires pour écrire le hamiltonien effectif Eq. 4.21 sous la forme d'un hamiltonien de spin. Plus explicitement, pour une paire de spins SU(3) ( $S_1^a, S_2^b$ ) dans la représentation  $\mathbf{8}$ , le hamiltonien d'interaction invariant SU(3) le plus général peut être écrit sous la forme :

$$H_{\text{eff}}^{(\text{octet})} = \alpha \mathbf{1} + J_1 \sum_a S_1^a S_2^a + J_2 \left( \sum_a S_1^a S_2^a \right)^2 + J_3 \left( \sum_a S_1^a S_2^a \right)^3 + J_4 \mathcal{C}_3(S_1, S_2) + p \mathcal{P}_{\mathbf{8}, \mathbf{8}}, \quad (4.22)$$

où  $\mathcal{P}_{\mathbf{8}, \mathbf{8}}$  est l'opérateur de permutation des sites voisins 1 et 2, et  $\mathcal{C}_3$  est le Casimir cubique construit à partir de  $S_{1,2}^a$ . L'interaction d'échange  $\sum_{a=1}^8 S_1^a S_2^a$  est directement reliée au Casimir quadratique par :

$$\begin{aligned} \sum_{a=1}^8 S_1^a S_2^a &= \sum_a \frac{1}{2} \left\{ (S_1^a + S_2^a)^2 - (S_1^a)^2 - (S_2^a)^2 \right\} \\ &= \frac{1}{2} (\mathcal{C}_2(R) - 2\mathcal{C}_2(\mathbf{8})), \end{aligned} \quad (4.23)$$

qui autorise l'utilisation de l'opérateur  $\sum_{a=1}^8 S_1^a S_2^a$  un peu plus explicite que le Casimir quadratique. Le Casimir cubique s'écrit :

$$\mathcal{C}_3(S_1, S_2) = \sum_{a,b,c=1}^8 d_{abc} (S_1^a + S_2^a) (S_1^b + S_2^b) (S_1^c + S_2^c), \quad (4.24)$$

où  $d_{abc}$  est la constante de structure complètement symétrique de SU(3), voir Ann. A.1. Enfin, l'opérateur  $\mathcal{P}_{\mathbf{8}, \mathbf{8}}$  est indispensable pour distinguer les deux représentations adjointes  $\mathbf{8}_S$  et  $\mathbf{8}_A$  qui ont par ailleurs les mêmes valeurs pour les Casimirs ( $\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_3$ ) (voir Tab. 4.1). L'opérateur

$\mathcal{C}_3$  est impair vis-à-vis de la conjugaison  $R \rightarrow \bar{R}$  (qui devient la transformation particule-trou dans le langage des fermions), et donc  $J_4 = 0$  au demi-remplissage.

Pour les autres couplages  $\{\alpha, J_1, J_2, J_3, p\}$  le calcul donne :

$$\alpha = \frac{1}{6} \left( \frac{A}{6} - \frac{B}{2} \right) \quad (4.25a)$$

$$J_1 = \frac{A}{9} + \frac{2B}{9}, \quad J_2 = -\frac{10}{27}(A-B), \quad J_3 = -\frac{2}{27}(A-B) \quad (4.25b)$$

$$p = \frac{1}{6}(A-B), \quad (4.25c)$$

où

$$A \equiv \frac{t^2(8t_{\perp} + 3U + V)}{U(U+V) + t_{\perp}(3U+V)} \quad (4.25d)$$

$$B \equiv \frac{3t^2(8t_{\perp} + U + 3V)}{V(U+V) + t_{\perp}(U+3V)}.$$

Le spectre du hamiltonien effectif à deux sites Eq. 4.22 est alors (avec l'*off-set*):

$$2E_0 \quad (\times 27; \mathbf{27}) \quad (4.26a)$$

$$2E_0 - \frac{B}{3} \quad (\times 20; \mathbf{10}, \overline{\mathbf{10}}) \quad (4.26b)$$

$$2E_0 - \frac{4A}{3} \quad (\times 1; \mathbf{1}) \quad (4.26c)$$

$$2E_0 - \frac{5(A+B)}{12} \quad (\times 8; \mathbf{8}_S), \quad 2E_0 - \frac{3A}{4} - \frac{B}{12} \quad (\times 8; \mathbf{8}_A), \quad (4.26d)$$

$$\text{où } 2E_0 = 2E_{n=3}(\mathbf{8}, T = 1/2) = -2t_{\perp} - 4(U+V).$$

Pour des valeurs de paramètres  $U, V$  de la zone bleu de la Fig. 4.2, on trouve  $J_1 \sim J_2$ , et le terme biquadratique  $(\sum_a S_1^a S_2^a)^2$  doit être conservé. Seule une étude numérique du hamiltonien Eq. 4.22 est envisageable dans ce régime. Une diagonalisation numérique du hamiltonien complet à 2 sites (où  $t$  n'est pas traité perturbativement) valide la description du hamiltonien effectif Eq. 4.22 dans le régime où  $U, V \gg t$  mais aussi et surtout lorsque  $t_{\perp} \gg t$  d'après la Fig. 4.4. Ce dernier régime de "fort *hopping* transversal" est implicitement considéré étant donnée la manière formelle dont a été réalisée la limite atomique Sec. 4.1.2. Les résultats de DMRG (de la chaîne complète) dans ce régime particulier sont données Fig. 4.5 et présentent une phase *featureless*, qui est la phase vraisemblablement décrite par le hamiltonien effectif Eq. 4.22 et ne correspond pas du tout à une phase SPT. Celle-ci peut par contre se produire pour un *hopping* transversal plus faible où le degré de liberté orbital, décrit par  $T$  et  $T^z$ , n'est plus figé et asymétrique entre les deux chaînes (effectives) comme dans la phase bleu de la Fig. 4.2 où  $T^z = -1/2$ . Le phénomène ne se produit pas dans les cas où  $N$  est pair pour lesquels  $T = 0$ .

## 4.2. La perturbation par le terme de *hopping*

reps. irr.						
dimensions	27	10	10	8 <sub>S</sub>	8 <sub>A</sub>	1
Casimir quadratique $\mathcal{C}_2$	8	6	6	3	3	0
Casimir cubique $\mathcal{C}_3$	0	9	-9	0	0	0
op. de symétrie ( $\mathcal{P}_{8,8}$ )	1	-1	-1	1	-1	1

Table 4.1 – Valeurs des opérateurs de Casimir quadratique et cubique pour les six représentations irréductibles qui apparaissent dans la décomposition de  $\mathbf{8} \otimes \mathbf{8}$  de l’Eq. 4.20. L’opérateur  $\mathcal{P}_{8,8}$  est le seul à différencier les deux représentations adjointes de la décomposition Eq. 4.20.

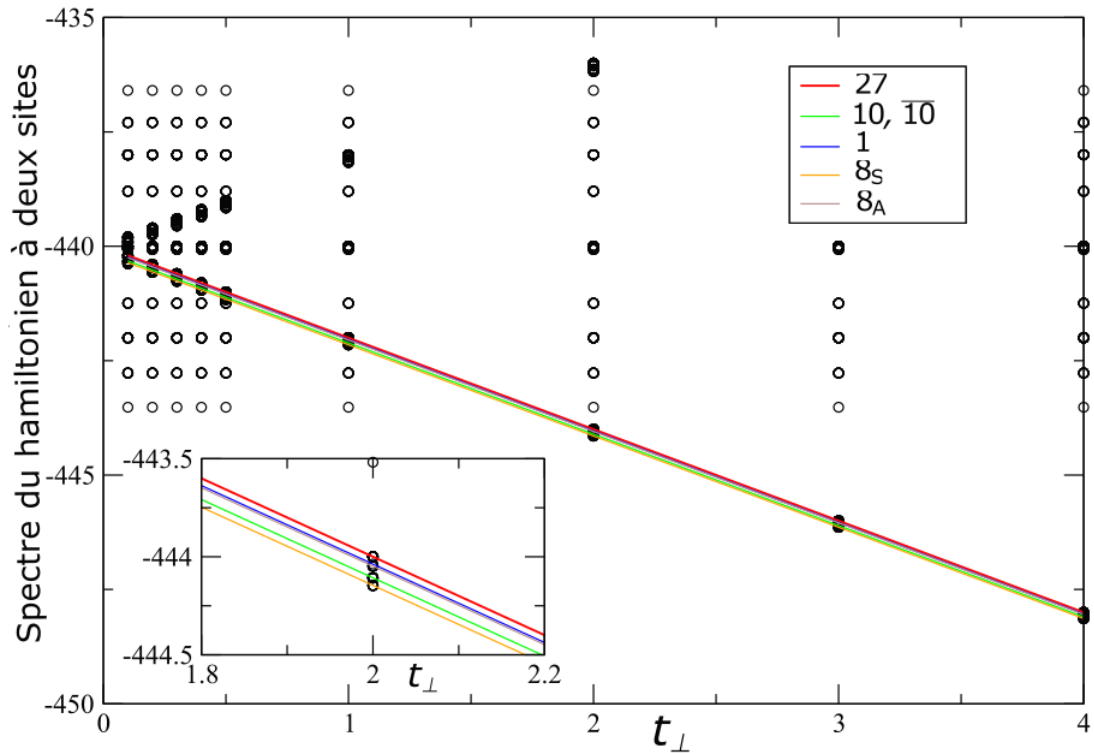


Figure 4.4 – Spectre exact du hamiltonien double-puits Eq. 2.27 pour  $N = 3$  à deux sites seulement pour  $U = 100$ ,  $V = 10$  en unité de  $t$  versus  $t_{\perp}$  (points). Le spectre Eq. 4.26 du hamiltonien effectif Eq. (4.22) figure en trait de couleur. Le coin en bas à gauche est un zoom sur ces derniers autour de  $t_{\perp} = 2$ . Le hamiltonien effectif n’est donc plus une bonne description pour  $t_{\perp} < 1.7t$ .

### 4.2.3 Approche heuristique

Il est possible de faire une approche de fort couplage plus raffinée qui considère à la fois  $t$  et  $t_{\perp}$  comme de petits paramètres indépendants par rapport aux paramètres d’interactions  $U$  et  $V$ . Le diagramme de la limite atomique lorsque  $t_{\perp} = 0$  fait aussi apparaître une région  $0 < V < U$  qui contient l’octet précédent, mais également d’autres états, complexifiant largement le

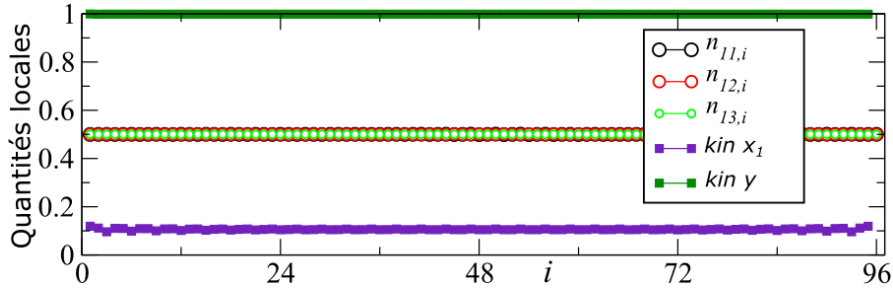


Figure 4.5 – Quantités locales obtenues par DMRG du modèle double-puits pour  $N = 3$  avec  $L = 96$ ,  $(U/t, V/t) = (100, 10)$  et  $t_{\perp}/t = 10$  : régime de couplage fort et de "fort hopping transversal". La phase est topologiquement triviale et les quantités locales présentent la signature typique d'une phase *Rung Singlet*.

calcul du hamiltonien effectif. Il est ici possible d'utiliser un raisonnement plus qualitatif qui paraphrase ce calcul pour le rendre un peu plus explicite.

Plus précisément, il est utile de partir de la limite atomique "symétrique" (avec la symétrie  $U(1)_o$ ) où  $t = t_{\perp} = 0$  et  $\delta U (= U - V) = 0$ . Dans ce régime, les états fondamentaux d'un seul double puits isolé sont 36 fois dégénérés et d'énergie  $4V$  (d'après les Eqs. 4.14). Ces 36 états sont les 18 états à  $T^z = 0$  dans les Eqs. 4.14c et 4.14d, les 16 états des Eqs. 4.14e, et les deux premiers états des Eqs. 4.14f. Puisque  $\dim\{(\mathbf{3} \oplus \bar{\mathbf{3}}) \otimes (\mathbf{3} \oplus \bar{\mathbf{3}})\} = 36$ , cela suggère qu'à basse énergie, chaque puits du double puits peut être décrit soit par un spin  $SU(3)$  dans la représentation fondamentale  $\mathbf{3}$  (lorsque le puits n'est occupé que par un seul fermion), soit par un spin dans la représentation conjuguée  $\bar{\mathbf{3}}$  (pour deux fermions), comme représenté Fig. 4.6 (en haut). Ainsi, le double puits peut contenir 2, 3 ou 4 fermions dans cette première restriction de l'espace total. À cause de la contrainte de demi-remplissage qui impose une occupation de 3 fermions par site en moyenne, considérer un double puits avec 2 fermions exactement nécessite d'en considérer un autre à 4 fermions.

D'après l'Eq. 4.7, dans l'espace de Hilbert restreint, prendre  $\delta U > 0$  génère trois types de contributions à l'énergie. Le premier type est un terme qui s'additionne au potentiel chimique (un terme en  $-\delta U/4$ ), tandis que le terme de Hubbard  $(1/4)(2V + 5\delta U/6)n_i^2$  favorise le remplissage d'un couple de double-puits par 3 fermions par puits plutôt que 2 et 4. Enfin, la troisième contribution s'écrit :

$$\delta U (T_i^x)^2 = \frac{\delta U}{4} \sum_{\alpha\beta} \left( d_{1\alpha,i}^{\dagger} d_{2\alpha,i} d_{1\beta,i}^{\dagger} d_{2\beta,i} + \text{h.c.} \right) - \frac{\delta U}{2} \sum_a S_{1,i}^a S_{2,i}^a - \frac{\delta U}{6} n_{1,i} n_{2,i} + \frac{\delta U}{4} n_i \quad (4.27)$$

où, pour rappel,  $\{S_{\ell,i}^a\}$  est l'opérateur de spin défini dans le puits  $\ell$  du site  $i$ , tel que  $S_{\ell,i}^a = \sum_{\alpha\beta} \frac{1}{\sqrt{2}} d_{\ell\alpha,i}^{\dagger} \lambda_{\alpha\beta}^a d_{\ell\beta,i}$  avec  $\lambda^a$  les matrices de Gell-Mann standards (cf Ann. A.2). Tous ces termes ne s'opposent pas à la levée de dégénérescence induite par le terme de Hubbard, à l'exception du terme d'interaction spin-spin qui la régénère. Formellement, on note l'amplitude de cette interaction  $J_{\perp}$  (égale à  $J_{\perp} = -\frac{\delta U}{2}$  ici) pour pouvoir réécrire le niveau

d'énergie des 36 états initiaux en fonction de  $\delta U$  et  $J_{\perp}$  :

$$E_{n=2}(\mathbf{6}, T=0) = E_{n=4}(\bar{\mathbf{6}}, T=0) = -4V - \frac{5\delta U}{3} + \frac{2J_{\perp}}{3} \quad (\times 6) \quad (4.28a)$$

$$E_{n=2}(\bar{\mathbf{3}}, T=1) = E_{n=4}(\mathbf{3}, T=1) = -4V - \frac{5\delta U}{3} - \frac{4J_{\perp}}{3} \quad (T^z = 0; \times 3) \quad (4.28b)$$

$$E_{n=3}(\mathbf{8}, T=1/2) = -4V - \frac{11\delta U}{6} + \frac{J_{\perp}}{3} \quad (\times 16) \quad (4.28c)$$

$$E_{n=3}(\bullet, T=3/2) = -4V - \frac{11\delta U}{6} - \frac{8J_{\perp}}{3} \quad (\times 2). \quad (4.28d)$$

Supposons que l'amplitude  $J_{\perp}$  puisse être changée indépendamment de  $\delta U$  et choisie inférieure (en valeur absolue) à  $\delta U/2$ . Alors, les états Eqs. 4.28c et 4.28d sont les états de plus basse énergie<sup>3</sup>. Les configurations alors fondamentales sont du type  $\mathbf{3}\text{-}\bar{\mathbf{3}}$  et/ou  $\bar{\mathbf{3}}\text{-}\mathbf{3}$  sur les double puits (représentées "étape 1" de la Fig. 4.6). On peut alors procéder au traitement perturbatif en  $t$  et  $t_{\perp}$  dans la limite où  $U, V \gg \delta U, |J_{\perp}| \gg t, t_{\perp} > 0$ . Seul  $t_{\perp}$  a une contribution au premier ordre, et lorsque  $t_{\perp} (> 0)$  son effet d'après Eq. 4.7 est d'introduire un champ Zeeman couplé à  $T^z \propto (n_{1,i}^{(d)} - n_{2,i}^{(d)})$  et qui favorise les  $T^z$  négatifs. Il tend donc à sélectionner les configurations  $\mathbf{3}\text{-}\bar{\mathbf{3}}$  sur chaque site (premier état de "l'étape 1" de la Fig. 4.6).

La correction au second ordre vient du *hopping*  $t$  et de l'anisotropie orbitale introduite par  $t_{\perp}$ . La contribution en  $\mathcal{O}(t^2)$  donne une interaction spin-spin le long de la chaîne (notée  $J_a$  et  $J_b$  selon la configuration dans "l'étape 2" de Fig. 4.6). En fonction du puits, l'opérateur de spin est soit dans la représentation fondamentale de SU(3) (alors noté  $S_i^a$  sur le site  $i$ ), soit dans sa représentation conjuguée (alors notée  $\bar{S}_i^a$  sur le site  $i$ ). Pour garder une trace du remplissage de chaque puits, il est utile d'introduire un pseudo-spin d'Ising  $\tau_i^z (= \pm 1)$  de telle sorte que  $\tau_i^z = 1$  ( $-1$ ) lorsque le puits 1 est occupé par 1 (2) fermion(s). Dans l'espace de Hilbert restreint,  $\tau_i^z = 2T_i^z$ . On définit alors un nouveau label pour l'indice de puits : le puits est indicé  $1'$  lorsqu'il n'est occupé que par un fermion (dans la représentation  $\mathbf{3}$ ), et  $2'$  s'il est occupé par deux fermions (dans la représentation  $\bar{\mathbf{3}}$ ), c'est "l'étape 3" de la Fig. 4.6. L'échelle de double-puits obtenue est alors constituée d'une chaîne ( $1'$ ) dans la représentation  $\mathbf{3}$  dans chaque site. Celle-ci est connectée à une seconde chaîne ( $2'$ ), dans la représentation  $\bar{\mathbf{3}}$  en chaque site, au niveau des barreaux par une interaction spin-spin d'amplitude  $J_{\perp}$ . Chaque barreau est connecté au suivant soit par une interaction spin-spin longitudinale d'amplitude  $J_a$ , ou bien diagonale d'amplitude  $J_b$  comme représenté "étape 3" de la Fig. 4.6. En terme de la variable d'Ising, toutes les corrections s'expriment alors :

$$H_{\text{eff}} = \sum_i \left\{ \frac{1}{2} (1 + \tau_i^z \tau_{i+1}^z) J_a \sum_{A=1}^8 \left( S_i^A S_{i+1}^A + \bar{S}_i^A \bar{S}_{i+1}^A \right) + \frac{1}{2} (1 - \tau_i^z \tau_{i+1}^z) J_b \sum_{A=1}^8 \left( S_i^A \bar{S}_{i+1}^A + \bar{S}_i^A S_{i+1}^A \right) \right\} \\ + J_{\perp} \sum_i \sum_{A=1}^8 S_i^A \bar{S}_i^A - t_{\perp} \sum_i \tau_i^z + \text{const.},$$

<sup>3</sup>En réalité, lorsque  $J_{\perp}$  est suffisamment proche de  $-\delta U/2$ , le couple de singulets avec une occupation de 3 fermions par site Eq. 4.28d peut être plus haut en énergie que les deux états Eq. 4.28a. Cependant, une limite considérée par la suite supprimera ces deux derniers états qu'on ne garde pour l'instant que pour simplifier la représentation graphique des étapes du raisonnement Fig. 4.6.

(4.29)

où  $J_a, J_b \sim O(t^2)$  et où la somme est étendue à tous les sites, car, comme Sec. 4.2.1, au deuxième ordre en  $t$ , les interactions obtenues se limitent aux plus proches voisins. Pour éviter la confusion avec l'indice  $a$  de  $J_a$  et pour insister sur le fait qu'il s'agit désormais d'opérateur de spin (et non de fermions), le nouvel exposant des opérateurs de spin est  $A$ . Dans la représentation  $\mathbf{3}$ ,  $S_i^A = S_{\ell',i}^A = \frac{\lambda^A}{\sqrt{2}}$  où  $\lambda^A$  sont les matrices de Gell-Mann, et dans la représentation  $\bar{\mathbf{3}}$ ,  $\bar{S}_i^A = S_{2',i}^A = -\frac{(\lambda^A)^T}{\sqrt{2}}$  (avec  $(\dots)^T$  la transposition de matrice).

On effectue alors une moyenne sur les configurations. Puisque le *hopping* transversal  $t_\perp$  est non nul, mais pas très fort,  $\langle \tau_i^z \tau_{i+1}^z \rangle \in ]0; 1[$  (le degré orbital est influencé mais pas figé), le hamiltonien effectif devient :

$$H_{\text{eff}}^{\mathbf{3}-\bar{\mathbf{3}}} = \sum_i \left\{ J_\parallel \sum_A \left( S_{1',i}^A S_{1',i+1}^A + \bar{S}_{2',i}^A \bar{S}_{2',i+1}^A \right) + J_\times \sum_A \left( S_{1',i}^A \bar{S}_{2',i+1}^A + \bar{S}_{2',i}^A S_{1',i+1}^A \right) + J_\perp \sum_A S_{1',i}^A \bar{S}_{2',i}^A \right\}. \quad (4.30)$$

Aux ordres dominants,  $J_\perp \sim -\frac{\delta U}{2}$ ,  $J_\parallel \sim J_\times (\propto t^2)$  et  $|J_\perp| \gg J_\parallel, J_\times > 0$

Lorsque  $J_\times = 0$  (i.e., dans le régime de "fort *hopping* transversal"  $t_\perp \gg 1$  qui "polarise"  $\tau^z$ ), le modèle doit devenir équivalent à l'Eq. 4.22 et ne décrit pas une phase SPT. En revanche, le régime  $-J_\perp \gg 1$  (réalisé à fort couplage) réduit l'échelle à une seule chaîne dans la représentation adjointe  $\mathbf{8}$  dans chaque site. Si en plus  $J_\parallel = J_\times$ , alors cette chaîne devient un modèle d'Heisenberg antiferromagnétique dans la représentation  $\mathbf{8}$  qui est connue pour faire apparaître une phase SPT [258]. Cette dernière est caractérisée Sec. 4.3.1 tandis que le modèle d'échelle de spin  $\mathbf{3}-\bar{\mathbf{3}}$  de l'Eq. 4.30 est étudié Chap. 5.

## 4.2. La perturbation par le terme de *hopping*

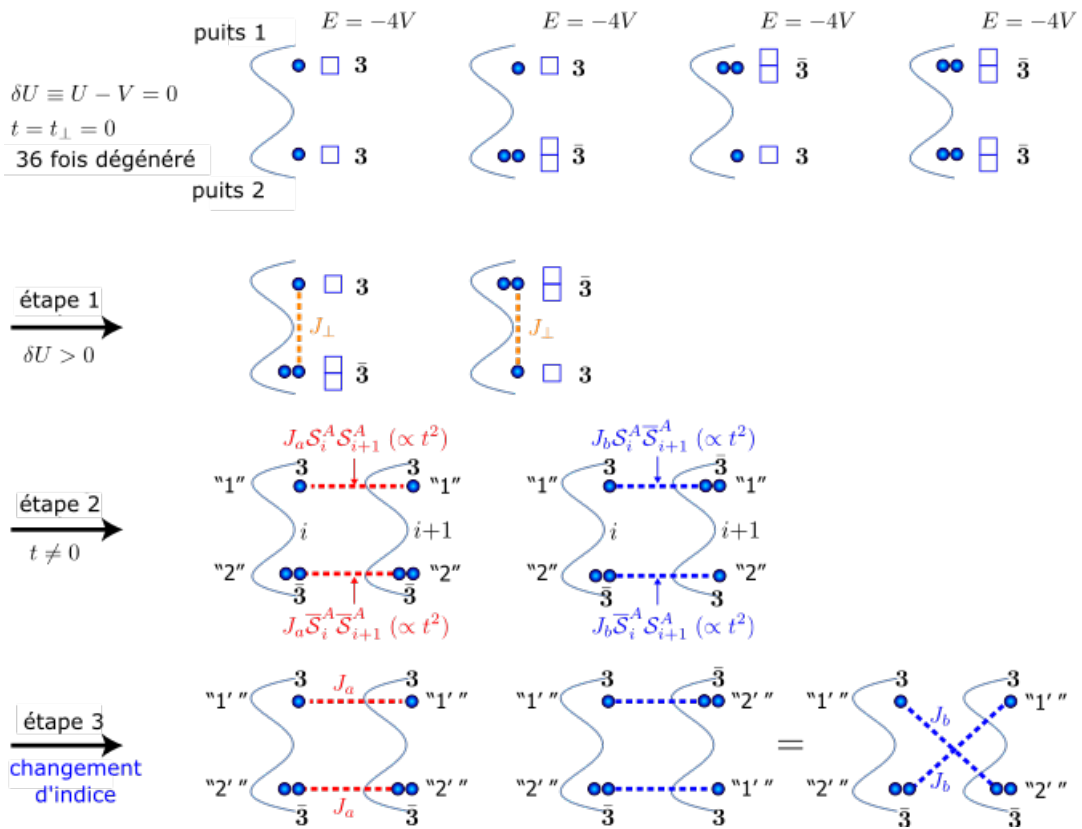


Figure 4.6 – Schéma des étapes de la dérivation du modèle d'échelle de spin  $\mathbf{3}\text{-}\bar{\mathbf{3}}$  de l'Eq. 4.30 à partir du modèle double-puits. L'occupation par les fermions (disque) et la représentation de  $SU(3)$  correspondante ( $\mathbf{3}$  et  $\bar{\mathbf{3}}$ ) sont illustrés pour chaque puits. Lorsque  $\delta U \equiv U - V = 0$  et  $t = t_{\perp} = 0$ , l'état fondamental d'un seul double-puits est 36 fois dégénéré (ligne du haut). Lorsque  $\delta U > 0$  mais petit par rapport à  $U, V$ , les états à exactement 3 fermions par site sont favorisés avec un puits dans  $\mathbf{3}$  et l'autre dans  $\bar{\mathbf{3}}$ , c'est "l'étape 1". Ajouter au second ordre en perturbation le *hopping* longitudinal  $t$  induit des interactions spin-spin le long des chaînes. C'est "l'étape 2". Enfin, changer l'indexation des puits pour que chaque chaîne soit individuellement dans une même représentation en chaque site est "l'étape 3". Une moyenne sur les configurations permet d'obtenir le modèle  $\mathbf{3}\text{-}\bar{\mathbf{3}}$  de l'Eq. 4.30 avec à la fois des interactions spin-spin longitudinales et diagonales.



### 4.3 Caractérisation des phases SPTs

Ainsi, pour  $N = 3$ , une phase SPT "peut" apparaître en couplage fort, et seule l'étude Chap. 5 s'assurera plus quantitativement du recouvrement entre le régime de couplage fort du modèle double-puits qui mène au modèle d'échelle de spin  $3-\bar{3}$  et le régime de paramètre de ce dernier modèle d'échelle qui engendre une SPT. Il est cependant déjà possible de caractériser la phase SPT identifiée [258] dans le régime où l'échelle de spin  $3-\bar{3}$  se réduit à une chaîne de Heisenberg antiferromagnétique dans la représentation adjointe dans chaque site ( $J_{\perp} \rightarrow -\infty$  et  $J_{\parallel} = J_{\times}$ ). Il est également utile de revenir sur la phase SPT du cas  $N = 4$ .

#### 4.3.1 Construction "à la AKLT"

Pour comprendre les deux phases SPT (à  $N = 3$  et 4), il est utile de considérer une construction AKLT à l'instar du cas  $N = 2$  de la Sec. 1.2.2. Puisque ces deux phases apparaissent toutes les deux pour une chaîne de Heisenberg antiferromagnétique, la construction d'état VBS est similaire. La différence majeure vient de la représentation en chaque site de la chaîne, soit respectivement la représentation adjointe de  $SU(3)$  ( $\begin{smallmatrix} \square & \\ & \square \end{smallmatrix}$ ) pour  $N = 3$  et la représentation de dimension 20 autoconjuguée de  $SU(4)$  ( $\begin{smallmatrix} \square & \square \\ & \square \end{smallmatrix}$ ) pour  $N = 4$ . Les deux représentations sont de "vraies" représentations (au sens de la Sec. 1.3.3) et sont donc bien susceptibles de donner des phases SPTs de type Haldane (d'après le théorème LSMA Sec. 1.3.3).

Pour le cas  $N = 4$ , seule la décomposition en produit tensoriel de deux représentations de dimension 6 peut donner lieu à un singulet, et donc à un état VBS<sup>4</sup> :

$$\begin{smallmatrix} \square & \\ & \square \end{smallmatrix} \otimes \begin{smallmatrix} \square & \\ & \square \end{smallmatrix} = \bullet \oplus \begin{smallmatrix} \square & \square \\ & \square \end{smallmatrix}, \quad (4.31)$$

tandis que :

$$\begin{smallmatrix} \square & \square \\ & \square \end{smallmatrix} \otimes \begin{smallmatrix} \square & \\ & \square \end{smallmatrix} = \begin{smallmatrix} \square & \square \\ & \square \end{smallmatrix} \oplus \begin{smallmatrix} \square & \square \\ & \square \end{smallmatrix} \oplus \begin{smallmatrix} \square & \square & \square \\ & \square & \square \end{smallmatrix}, \quad (4.32)$$

est une décomposition qui existe mais ne permet pas de former des singulets et donc des états VBS. Le reste de la construction AKLT s'effectue exactement comme pour le cas  $N = 2$  de la Sec. 1.2.2 mais avec la décomposition Eq. 4.31. La construction est illustrée Fig. 4.7 (d) et engendre un état fondamental qui ressemble à une chaîne de singulets avec à chaque bord un "spin"  $SU(4)$  effectif dans la représentation de dimension 6 ( $\begin{smallmatrix} \square & \\ & \square \end{smallmatrix}$ ) qui est bien une représentation projective. Le *bulk* de l'état fondamental est donc non-dégénéré, mais à cause des états de bord (et en négligeant les effets de taille finie de la chaîne), celui-ci est en fait  $6 \times 6 = 36$  fois dégénéré.

<sup>4</sup>Ce n'est plus vrai si on autorise des représentations de décomposition avec plus de boîtes au total que la représentation initiale [274].

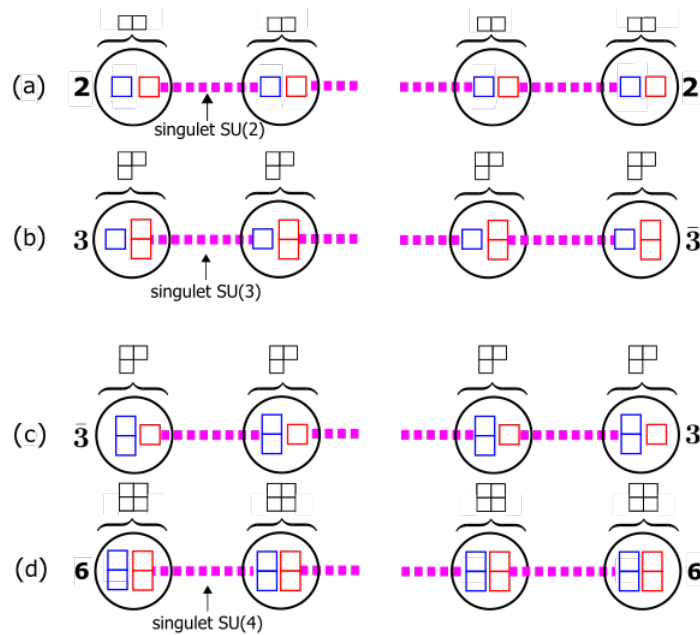


Figure 4.7 – Schéma de construction des états VBS "à la AKLT" pour les phases de Haldane à l'aide des tableaux d'Young. (a) Rappel du cas  $N = 2$  : les spins 1 de  $SU(2)$  sur chaque site sont décomposés en spins "1/2" appariés aux plus proches voisins pour faire une chaîne de singulets  $SU(2)$  sauf au bord où restent des spins (effectifs) 1/2 (dans la représentation  $\mathbf{2}$ ). (b), (c) Construction pour le cas  $N = 3$  dans l'adjointe ; deux décompositions sont possibles aboutissant à deux classes topologiques différentes, l'une des deux phases ressemble à une chaîne de singulets  $SU(3)$  avec un état de bord gauche dans la représentation fondamentale de  $SU(3)$   $\mathbf{3}$  et un état de bord droit dans sa représentation conjuguée  $\bar{\mathbf{3}}$  : (b). L'autre phase est la même à la symétrie d'inversion près : (c). Les deux sont nommées phases SPTs "chirales Haldane". (d) Construction pour le cas  $N = 4$  ; la phase SPT ressemble à une chaîne de singulets  $SU(4)$  avec des états de bord dans la représentation (autoconjuguée)  $\mathbf{6}$  de  $SU(4)$ .

Pour  $N = 3$ , deux décompositions de la représentation adjointe de  $SU(3)$  en chaque site qui se ressemblent sont possibles pour la construction d'états VBS :

$$\square \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \bullet \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}, \text{ et} \tag{4.33a}$$

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \square = \bullet \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}, \tag{4.33b}$$

(comprendre : décomposer l'adjointe en la représentation fondamentale "à gauche" et sa conjuguée "à droite", même si c'est rigoureusement la formation ultérieure du singulet magnétique entre ces deux représentations sur des sites voisins qui engendre la brisure de l'inversion à proprement parler). Ces deux décompositions ne sont pas équivalentes car la représentation fondamentale de  $SU(3)$  n'est pas équivalente à sa représentation conjuguée. Le schéma de la construction pour ces deux décompositions est donné Fig. 4.7 (b) et (c). Les états VBS ressemblent tout les deux à des chaînes de singulets, mais la première décomposition Eq. 4.33a

aboutit à un état de bord de gauche dans la représentation fondamentale  $\mathbf{3}$  et un état de bord à droite dans la conjuguée de la fondamentale  $\bar{\mathbf{3}}$ , tandis que la seconde décomposition Eq. 4.33b aboutit à l'inverse :  $\bar{\mathbf{3}}$  à gauche et  $\mathbf{3}$  à droite. Chaque situation conduit à une phase SPT différente ( $n_{top} = 1$  pour la première et 2 pour la seconde, tandis que  $n_{top} = 0$  pour des phases topologiquement triviales) et chacune brise spontanément l'invariance par la symétrie d'inversion. Une autre manière de montrer que les deux phases sont bien différentes consiste à prendre un état de l'une d'entre elles : les deux phases sont les mêmes si et seulement si il est possible de connecter adiabatiquement et localement cet état à un état de l'autre phase SPT sans fermeture du gap. Il faut donc que chaque état de bord "saute" d'une représentation à la représentation conjuguée avec concertation avec l'autre bord, ce qui est impossible pour des états à intrications de courte portée, systématiques à 1D. Ces phases SPTs de Haldane qui brisent l'inversion sont nommées phases de Haldane "chirales" [198] pour les distinguer des autres phases de Haldane à  $N = 2$  ou 4 détaillées précédemment qui elles ne brisent pas l'inversion.

### 4.3.2 Interprétations supplémentaires des résultats du DMRG

Il est utile de rappeler les résultats de DMRG à la lueur de la caractérisation faite Sec. 4.3.1. Pour toutes les phases SPTs de Haldane sur un chaîne ouverte, des états de bord doivent apparaître avec une extension exponentiellement décroissante. Il est possible de savoir dans quel état et donc dans quelle représentation se trouve chaque bord en calculant les poids (au sens Sec. 3.3.3) aux bords. Il est possible de raccorder ces caractérisations à la construction AKLT correspondante. C'est ce qui est réalisé par DMRG par calcul des quantités locales Fig. 4.8 (y figure aussi le cas  $N = 2$ ). La phase de Haldane chirale se distingue des deux autres ( $N = 2$  et 4) car elle brise spontanément la symétrie d'inversion. La manière dont elle est brisée et donc la sélection de la classe topologique ( $n_{top} = 1$  ou 2) de la phase chirale est a priori aléatoire, mais les deux sont possibles dans les mêmes régimes de paramètres du modèle double-puits. Une caractérisation est obtenue en considérant le spectre d'intrication Fig. 3.9 qui lui ne distingue pas les phases de Haldane chirales pour  $N = 3$ .

La "zone" d'apparition éventuelle des diverses phases SPT (à savoir, grossièrement, lorsque  $0 < V < U$ ) varie en fonction du rapport  $U/t$  et  $t_{\perp}/t$  : lorsque  $U/t$  est trop petit (régime de couplage faible), la phase attendue est topologiquement triviale, tandis que lorsque  $U$  est grand, la localisation des fermions dans les puits en plus de l'existence de termes transversaux dans le hamiltonien provoque l'apparition des diverses phases topologiques. Il y a donc une transition d'une phase triviale vers une phase topologique qui se produit. Cet aspect du diagramme de phase n'est abordable que par DMRG et est résumé Fig. 4.9. De même, lorsque  $t_{\perp}/t$  est trop petit (i.e.  $t_{\perp} \sim 0$ ), des résultats de DMRG indiquent l'apparition d'une phase triviale ( $SP_0$  pour  $N = 3$  ; Fig. 3.5 en haut à gauche) de même que ce rapport, lorsqu'il est trop grand, polarise le degré orbital est provoque l'apparition d'une autre phase triviale (*Rung Singlet* pour  $N = 3$  ; Fig. 4.8). Ce n'est que lorsque  $t_{\perp} \sim t$  que la phase topologique apparaît. Les phases SPT à  $N = 2$  et 4 sont moins sensibles à cet effet car la représentation attendue

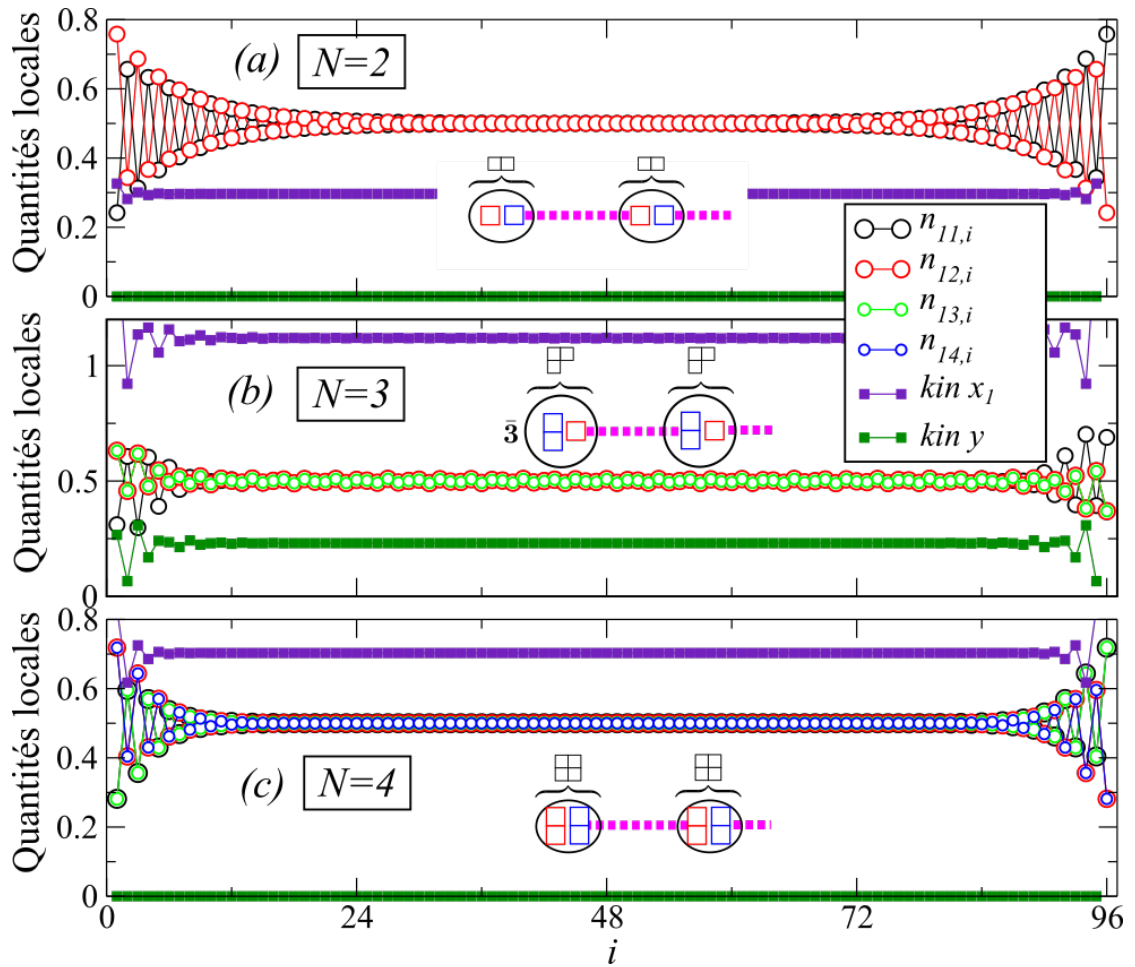


Figure 4.8 – Quantités locales obtenues par DMRG pour les phases de Haldane  $N = 2, 3$  et  $4$  (de haut en bas). La simulation correspond à une longueur de chaîne  $L = 96$  et  $t_{\perp} = 1$ ,  $U = 12$  et  $V = 4$ . Les densités et énergies de liens ("kin x") sont les mêmes sur les deux chaînes, donc seules les quantités de l'une d'entre elles sont représentées. En plus des caractérisations déjà faites Sec. 3.3.3, il est désormais possible d'associer la construction AKLT correspondante à chaque phase en terme de tableau d'Young.

dans la "zone" propice aux SPT est autoconjuguée et favorise un nombre de fermions réparti équitablement sur les deux puits qui ne polarise pas le degré orbital (réduisant l'influence de  $t_{\perp}$ ). Cet effet reste néanmoins un moyen de provoquer des transitions d'une phase triviale vers une phase topologique.

### 4.3.3 Les cas $N > 4$ et les autres classes de SPT

Un dernier cas jusqu'à présent négligé reste à discuter : le cas du régime de fort couplage dont l'état fondamental est dans la représentation adjointe de  $SU(4)$  pour  $N = 4$  (en cyan dans la

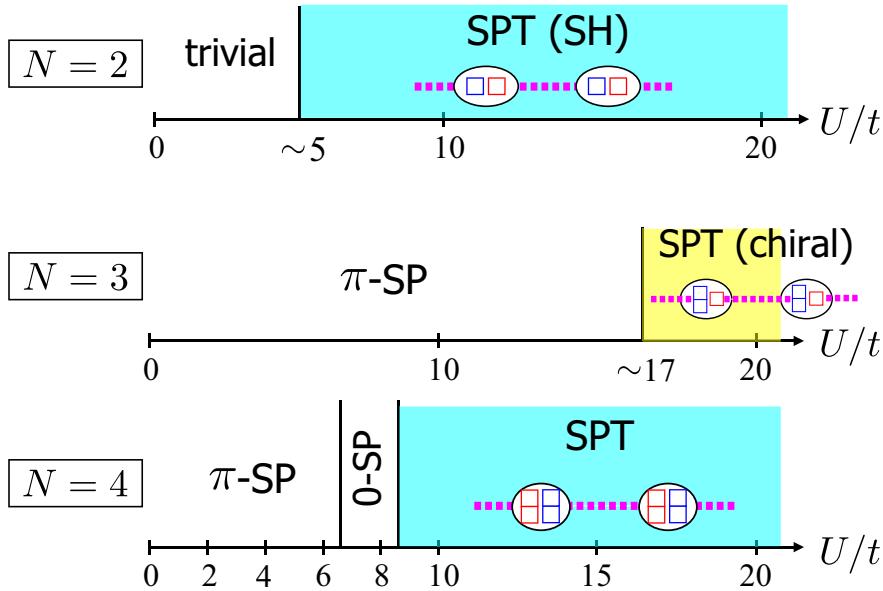


Figure 4.9 – Diagramme de phase du modèle double-puits en fonction du rapport  $U/t$  pour  $N = 2, 3$  et  $4$  et pour  $U = 10V$  et  $t_{\perp} = t = 1$ . La totalité des phases à couplage faible sont topologiquement triviales, conformément à l’approche dans le même régime Chap. 3, tandis qu’à couplage fort, les phases SPTs de la Sec. 4.2 sont attendues. Il-y-a une transition de phases entre les deux régimes qui ne peut être capturée par aucune des deux approches analytiques. (SH = spin Haldane.)

Fig. 4.3). Il est possible, pour lui également, d’imaginer une construction AKLT semblable au cas  $N = 3$  grâce à la décomposition :

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} = \bullet \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}, \text{ et} \quad (4.34a)$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} = \bullet \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}. \quad (4.34b)$$

et ainsi obtenir deux classes de phases SPTs, chirales, qui viennent s’ajouter à la phase de Haldane décrite Sec. 4.3.1 pour donner les trois classes de phases topologiquement non triviales attendues par la classification de cohomologie Sec. 1.4.2. En fait, le diagramme de la limite atomique pour le cas  $N = 5$ , et probablement les cas ultérieurs  $N > 5$  présentent la

même structure en feuillet dans la zone  $0 \lesssim V < U$  où la représentation la plus antisymétrique (l'adjointe) et toutes les représentations possibles avec le même nombre de boîtes jusqu'à la représentation la plus symétrique (qui ne l'est complètement que pour les  $N$  pairs) qui reste majoritaire. En terme de tableau d'Young, les états fondamentaux dans les feuillets seront dans les représentations suivantes :

Pour  $N = 5$  :



(4.35a)

Pour  $N = 6$  :



(4.35b)

etc ,

où la représentation la plus symétrique est, pour chaque  $N$ , la dernière citée dans Eq. 4.35. Cette dernière est systématiquement la plus représentée dans la zone  $0 < V < U$  du diagramme de phase de la limite atomique. Il est aussi possible d'imaginer une construction AKLT pour chacune de ces représentations et ainsi obtenir un représentant pour chacune des  $N - 1$  classes topologiquement non triviales prévues par la classification. Toutes ces phases, sauf une lorsque  $N$  est pair, sont chirales au sens de la Sec. 4.3.1. Ces phases seraient toutes accolées les unes aux autres dans un diagramme comme la Fig. 4.3 et permettraient ainsi l'étude de transition de phase topologique vers une autre phase topologique.

Les résultats DMRG ne trouvent pas de traces de cette phase pour  $N = 4$  (cf Fig. 3.5). Par ailleurs, l'extension des zones d'état fondamental dégénéré dans une représentation autre que la plus symétrique dans le diagramme de la limite atomique est de plus en plus réduite au fur et à mesure que  $N$  augmente, et ces zones n'assurent même pas l'apparition des phases SPTs associées. Ces dernières phases, et les transitions entre elles, sont donc vraisemblablement peu susceptibles d'être observées expérimentalement par le modèle double-puits suggéré dans cette thèse.

## 4.4 Résumé du chapitre

En conclusion, l'approche analytique la plus pertinente pour observer l'apparition des phases SPTs de type Haldane pour le modèle de double-puits est l'approche de fort couplage. Celle-ci consiste à considérer dans un premier temps chaque site de manière individuelle en posant  $t = 0$  puis de diagonaliser le hamiltonien à un site obtenu. Son spectre permet de tracer un premier diagramme de phase dit de la limite atomique (Figs. 4.1, 4.2 et 4.3 pour divers  $N$ ). Lorsque l'état fondamental est un singulet, l'ajout d'une correction au premier ou au second ordre en perturbation par rapport au *hopping*  $t$  le laisse essentiellement inchangé, et la prédiction de la limite atomique s'étend plus largement au reste du couplage fort. La phase prédite est alors systématiquement topologiquement triviale (en tout cas, lorsque des états de bords qui induisent une dégénérescence du fondamental pour une chaîne finie à bord ouvert sont attendus). Lorsque l'état fondamental de la limite atomique est dégénéré, il faut aller jusqu'au second ordre en  $t$  et considérer l'association de deux sites pour capturer (au plus) les interactions effectives de plus proches voisins et obtenir un hamiltonien effectif descriptif des phénomènes de basses énergies à couplage fort.

Dans le modèle du double-puits Eq. 2.36, un tel régime de paramètre apparaît systématiquement dans l'essentiel de la zone  $0 < U < V$ . Pour les  $N$  pairs, le hamiltonien effectif décrit une chaîne de Heisenberg antiferromagnétique dans la représentation (effective) de  $SU(N)$  de la forme Eq. 4.19, en chaque site. Lorsque  $N = 2$ , la phase topologique de Haldane de spin 1 est retrouvée, tandis que certaines de ses généralisations sont systématiquement obtenues pour  $N > 2$  pair pour lesquelles il est possible de construire un état VBS. La construction de type AKLT pour le cas  $N = 4$  est représentée Fig. 4.7 (d).

Lorsque  $N = 3$  ou plus généralement pour les  $N$  impairs, le traitement en couplage fort est nettement plus laborieux. Il est néanmoins possible de trouver un hamiltonien effectif qui, dans un régime de paramètres cohérents avec le double-puits, est susceptible de décrire une phase topologiquement non triviale : c'est, pour  $N = 3$  le modèle d'échelle de spin  $\mathbf{3}-\bar{\mathbf{3}}$  :

$$H_{\text{eff}}^{\mathbf{3}-\bar{\mathbf{3}}} = \sum_i \left\{ J_{\parallel} \sum_a \left( S_{1',i}^a S_{1',i+1}^a + \bar{S}_{2',i}^a \bar{S}_{2',i+1}^a \right) + J_{\times} \sum_a \left( S_{1',i}^a \bar{S}_{2',i+1}^a + \bar{S}_{2',i}^a S_{1',i+1}^a \right) + J_{\perp} \sum_a S_{1',i}^a \bar{S}_{2',i}^a \right\}. \quad (4.36)$$

où  $S_{1',i}^a$  et  $\bar{S}_{2',i}^a$  sont les opérateurs de spins dans la représentation  $\mathbf{3}$  et  $\bar{\mathbf{3}}$  respectivement ( $1'$  et  $2'$  sont les indices de chaînes effectives). Ce modèle n'est pertinent que lorsque  $t \sim t_{\perp}$ , i.e. en présence d'une contrainte faible mais existante sur le degré de liberté orbital. Il décrit deux chaînes de Heisenberg antiferromagnétiques, l'une dans la représentation fondamentale de  $SU(3)$ , l'autre dans sa conjuguée, connectées entre elles par des termes d'interactions spin-spin transversaux et diagonaux. Les phases SPTs chirales Haldane anticipées sont également comprises à l'aide d'une construction AKLT représentée Fig. 4.7 (b) et (c).

Les prédictions obtenues par couplage fort sont complètement compatibles avec les simulations de DMRG obtenues Figs. 3.5.

## 5 Le modèle de la chaîne de spin $\mathbf{3} - \bar{\mathbf{3}}$

Afin de s'assurer que l'échelle de spin effective dans la représentation  $\mathbf{3} - \bar{\mathbf{3}}$  de l'Eq. 4.30 obtenue Sec. 4.2.3 dans le régime de couplage fort du modèle double-puits Eq. 2.27 donne bien lieu à une phase SPT, il est utile de l'étudier dans son ensemble. Plus précisément, il faut vérifier que la phase chirale Haldane de la Sec. 4.3.1 qui apparaît forcément lorsque  $J_{\perp} \rightarrow -\infty$  et  $J_{\parallel} = J_{\times}$  d'après la Ref. [258] s'étend suffisamment pour recouvrir le régime par ailleurs atteint par le couplage fort du double-puits (puisque  $J_{\perp}$ ,  $J_{\parallel}$  et  $J_{\times}$  dépendent de  $U$ ,  $V$ ,  $t$  et  $t_{\perp}$ ). C'est donc l'étude de ce modèle d'échelle dans le cas plus général  $\mathbf{N} - \bar{\mathbf{N}}$  qui est proposée Ref. [275] et dont je n'attache ci-après que la version en cours de finalisation. Celle-ci porte une attention toute particulière à deux régimes aussi appelés "couplage fort" et "couplage faible" qui correspondent aux régimes  $J_{\perp} \gg J_{\parallel}, J_{\times}$  et  $J_{\perp} \ll J_{\parallel}, J_{\times}$  respectivement et qui utilisent des techniques similaires à celles esquissées Chap. 4 et Chap. 3. La connexion entre les deux est à nouveau réalisée à l'aide du DMRG.

Ce sont ces résultats de DMRG (pour le cas  $N = 3$ ) qui assurent le recouvrement entre la phase chirale Haldane et le couplage fort du double-puits. En effet, d'après la Sec. 4.2.3, les couplages  $J_a \sim J_b$  ont par construction une dépendance similaire au couplage  $J$  de la Sec. 4.2.1 du cas  $N$  pair vis-à-vis des paramètres expérimentaux (donc de la forme  $t^2/(U + V)$ ). Par ailleurs, le pseudo-spin d'Ising  $\tau^z$  doit être légèrement polarisé de telle sorte que  $\langle \tau_i^z \tau_{i+1}^z \rangle \sim 0.1$ . Puisque  $J_{\parallel} = J_a(1 + \langle \tau_i^z \tau_{i+1}^z \rangle)/2$ ,  $J_{\times} = J_b(1 - \langle \tau_i^z \tau_{i+1}^z \rangle)/2$  et  $J_{\perp} \sim -\delta U/2 (< 0)$ , le régime de couplage fort (et de *hopping* transversal moyen) correspond à  $|J_{\perp}| \gg J_{\parallel}, J_{\times} > 0$  avec  $J_{\parallel} \sim J_{\times}$ . Cette ligne de la Fig. 3 de la Ref. [275] ci-dessous (une ligne sur le diagramme car  $J_{\parallel}$  est l'unité utilisée sur la figure, i.e.  $J_{\parallel} = 1$ ) est systématiquement, lorsque  $J_{\perp} < 0$ , dans la phase chirale Haldane, et donc le couplage fort de la "zone bleue" du diagramme Fig. 4.2 correspond lui aussi à cette phase de Haldane.



# Chiral Haldane phases and two-leg $SU(N)$ alternating spin ladder

S. Capponi,<sup>1</sup> P. Fromholz,<sup>2</sup> P. Lecheminant,<sup>2</sup> and K. Totsuka<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Laboratoire de Physique Théorique, IRSAMC, Université de Toulouse, CNRS, UPS, France.*

<sup>2</sup>*Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation, CNRS UMR 8089,*

*Université de Cergy-Pontoise, Site de Saint-Martin, F-95300 Cergy-Pontoise Cedex, France.*

<sup>3</sup>*Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kitashirakawa Oiwake-Cho, Kyoto 606-8502, Japan.*

(Dated: August 31, 2018)

Chiral Haldane phases are examples of one-dimensional topological phases which are protected by a  $\mathbb{Z}_N \times \mathbb{Z}_N$  symmetry with  $N > 2$ . The hallmark of these phases stems from the fact that the inversion symmetry is broken when open-boundary conditions are used with the emergence of different left and right edge states which transform for instance respectively in the fundamental  $\mathbf{N}$  and anti-fundamental  $\bar{\mathbf{N}}$  representations of the  $SU(N)$  group. We show, by means of complementary analytical and numerical approaches, that this exotic phase is stabilized in the zero-temperature phase diagram of a generalized two-leg  $SU(N)$  alternating spin ladder where the spins in each chain transform either in the  $\mathbf{N}$  or  $\bar{\mathbf{N}}$  representations. The resulting symmetry protected topological phase breaks spontaneously the inversion symmetry with the emergence of a two-fold degenerate ground state which corresponds to two chiral Haldane phases with edge states related by conjugation.

PACS numbers: 75.10.Pq,

## I. INTRODUCTION

Spin ladders have been a constant source of interest since the original motivation that these systems are intermediates between one and two dimensions which could shed light on spin liquid physics in higher dimensions.<sup>1</sup> The simplest spin ladder model is a two-leg ladder where two spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg chains with spin-exchange  $J_{\parallel} > 0$  are coupled by an interchain coupling  $J_{\perp}$ . In absence of this interchain coupling, the Heisenberg spin chains have a gapless spectrum with spin-spin correlations functions displaying universal power-law behavior.<sup>2,3</sup> The massless elementary excitations are the spinons with fractional spin-1/2 quantum numbers and appear only in pairs in all physical states with integer total spin.<sup>4</sup> In this respect, the standard magnon-excitations carrying spin-1 quantum number are deconfined into two spinons and this leads to an incoherent background in the dynamical spin susceptibility measured in neutron-scattering experiments.<sup>5</sup>

However, these spinons excitations become confined into massive spin-1 triplons as soon as an infinitesimal coupling is introduced between the chains and a two-leg spin ladder becomes a fundamental system to investigate the confinement of fractional quantum number particles.<sup>6,7</sup> Various gapful quantum phases have been predicted theoretically and numerically for two-leg spin ladders depending on the actual form of the coupling between the two chains as it can also take the form of a spin-exchange  $J_{\times}$  between the diagonals of the ladder,<sup>8-14</sup> or a four-spin exchange interaction,<sup>15-19</sup> as well as a zigzag coupling.<sup>20-22</sup> One interesting phase, obtained in these spin ladders, is a non-degenerate fully gapped phase adiabatically connected to the Haldane phase of the spin-1 antiferromagnetic Heisenberg chain.<sup>23</sup> The latter is the paradigmatic example of one-dimensional (1D) symmetry protected topological (SPT) phases with an  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$  protecting symmetry and spin-1/2 edge states.<sup>24,25</sup> The emergence of this SPT in two-leg spin ladder systems can be simply understood by considering two special cases. On the one hand, the large ferromagnetic in-

terchain limit  $J_{\perp} \rightarrow -\infty$  selects the triplet states over the singlet one on each rung so that the model is equivalent to that of the spin-1 Heisenberg chain. On the other hand, when  $J_{\times} = J_{\parallel} > 0$  and  $J_{\perp} = 0$ , the model becomes the composite spin representation of the spin-1 Heisenberg chain.<sup>8,9</sup> The resulting Haldane physics has been shown to be adiabatically connected to the weak-interchain limit where the low-energy physics is described in terms of four massive Majorana fermions with spin-1/2 edge states.<sup>7,26</sup>

In this paper, we generalize to higher continuous symmetry group this idea of stacking Heisenberg spin chains to produce 1D SPT phases. The 1D bosonic SPT phases are known to be classified by the second cohomology group  $\mathcal{H}^2(G, U(1))$  of the protecting symmetry group  $G$ .<sup>27-30</sup> While in the case of spin-rotational invariance, i.e.,  $G = SO(3) \simeq SU(2)/\mathbb{Z}_2$ , there is a single non-trivial SPT phase,  $N - 1$  SPT phases are expected when  $G$  is the projective unitary group  $PSU(N) \simeq SU(N)/\mathbb{Z}_N$  since  $\mathcal{H}^2(PSU(N), U(1)) = \mathbb{Z}_N$ .<sup>31,32</sup> One interesting class of these SPT phases is the so-called chiral Haldane phase, denoted by  $(\mathbf{N}, \bar{\mathbf{N}})$ , which is a non-degenerate fully gapped phase where the left (respectively right) edge state belongs to the fundamental (respectively conjugate) representation of the  $SU(N)$  group.<sup>33-37</sup> The phase, which is protected by a  $\mathbb{Z}_N \times \mathbb{Z}_N$  symmetry, is featureless but breaks explicitly the inversion or site-parity symmetry since the left and right boundary spins are different and related by conjugation.<sup>34</sup>

We investigate here the emergence of these chiral Haldane phases for all  $N$  in a two-leg  $SU(N)$  spin ladder with standard interchain coupling ( $J_{\perp}$ ) as well as an interaction along the diagonals ( $J_{\times}$ ):

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_{\parallel} \sum_i (S_{1,i}^A S_{1,i+1}^A + S_{2,i}^A S_{2,i+1}^A) + J_{\perp} \sum_i S_{1,i}^A S_{2,i}^A \\ & + J_{\times} \sum_i (S_{1,i}^A S_{2,i+1}^A + S_{1,i+1}^A S_{2,i}^A), \end{aligned} \quad (1)$$

where  $S_{i,i}^A$  ( $A = 1, \dots, N^2 - 1$ ) denote the  $SU(N)$  spin oper-

ators on the  $i$ th site which transform in the fundamental representation  $\mathbf{N}$  of  $SU(N)$  when  $l = 1$  and its conjugate  $\bar{\mathbf{N}}$  one when  $l = 2$ . In stark contrast to the  $N = 2$  case, the fundamental representation of  $SU(N)$  is not self-conjugate and we are thus free to consider individual spin chains either in the fundamental representation or in its conjugate. Two-leg  $SU(N)$  spin ladders in the fundamental representation have been studied recently and no SPT phases were reported.<sup>40–42</sup> As we shall see in this paper, a very different physics occurs for the two-leg spin ladder (1) with unequal  $SU(N)$  representations.

Another motivation to study this model is to understand the mechanism of the chiral SPT phases recently found in the study of  $SU(N)$  (with  $N$ -odd) fermions trapped in a 1D array of double wells<sup>38</sup> In fact, the model (1) appears, in the strong-coupling limit, as a skeltonized effective Hamiltonian of the original fermion model. Therefore, the study of the model (1) would help us to understand how chiral SPT phases with spontaneously broken parity symmetry arise in the Mott phase of the fermion model.

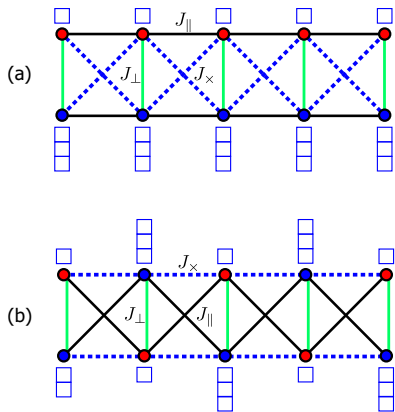


FIG. 1:  $\mathbf{N}$ - $\bar{\mathbf{N}}$  two-leg ladder (a) and its equivalent representation (b).

Another motivation is Affleck’s recent paper with the emphasis that the two degenerate chiral Haldane phases might be considered as a qubit<sup>39</sup>

Several special limits of model (1) can be discussed. In absence of interchain couplings ( $J_{\perp}, J_{\times} = 0$ ), model (1) becomes two decoupled  $SU(N)$  Sutherland models one in the fundamental and the second in its conjugate representation. Both models are integrable by means of the Bethe ansatz approach and display a quantum critical behavior in the  $SU(N)_1$  universality class with central charge  $c = N - 1$ .<sup>43–46</sup> In the strong-coupling regime, when  $J_{\perp}/J_{\parallel} \rightarrow +\infty$  and  $J_{\times} = 0$ , each rung is in a singlet state and the underlying phase is a non-degenerate gapped singlet phase which is the generalization of the rung-singlet (RS) phase of the two-leg  $SU(2)$  spin ladder.<sup>2,3</sup> When  $J_{\perp}/J_{\parallel} \rightarrow -\infty$  and  $J_{\times} = 0$ , one could naively conclude that the model (1) is an  $SU(N)$  Heisenberg spin chain where the spin operators belong to the adjoint representation of the  $SU(N)$  group since we have the decomposition:  $\mathbf{N} \otimes \bar{\mathbf{N}} \sim \mathbf{1} \oplus (\mathbf{N}^2 - \mathbf{1})$ . However the strong-coupling approach turns out to be subtle here as we shall see in Sec. II.

Finally, when  $J_{\times} = J_{\parallel}$  and  $J_{\perp} = 0$ , the spin ladder (1) becomes the composite-spin representation of a single Heisenberg chain with  $SU(N)$  spin operators  $G_i^A = S_{1,i}^A + S_{2,i}^A$ . Since the total spin of each rung commutes with the Hamiltonian in this special limit, the eigenstates can all be classified by the total spin on the rungs which can be a singlet or adjoint states (i.e.  $N^2 - 1$  states). The set of eigenstates with only adjoint states on all rungs give then a Heisenberg spin chain in the adjoint representation of  $SU(N)$ . The latter model is known to display a fully gapped translational invariant phase which breaks spontaneously the inversion symmetry when open-boundary conditions are used with the emergence of two chiral Haldane phases with  $(\mathbf{N}, \bar{\mathbf{N}})$  and  $(\bar{\mathbf{N}}, \mathbf{N})$  edge states related by the inversion symmetry.<sup>33,34</sup>

In this paper, we map out the zero-temperature phase diagram of the two-leg spin ladder (1) by means of a low-energy approach for general  $N$ , which is valid when the chains are weakly coupled, and by density-matrix renormalization group (DMRG) calculations<sup>47</sup> in the  $N = 3$  case for moderate and strong couplings. In particular, we find  $\mathbb{Z}_N \times \mathbb{Z}_N$  chiral Haldane phases when  $J_{\perp} \leq 0$  and for a sufficiently strong anti-ferromagnetic diagonal interaction  $J_{\times} > 0$ . In the simplest  $N = 3$  case, the  $(\mathbf{3}, \bar{\mathbf{3}})$  chiral Haldane phase and its parity-partner  $(\bar{\mathbf{3}}, \mathbf{3})$  are the two non-trivial  $PSU(3)$  SPT phases and they have been recently found numerically in the context of  $SU(3)$  ultracold fermionic quantum gases loaded into double-well optical lattice.<sup>48</sup> In the  $N = 4$  case, the  $(\mathbf{4}, \bar{\mathbf{4}})$ ,  $(\bar{\mathbf{4}}, \mathbf{4})$  chiral Haldane phases together with the SPT phase with self-conjugate edge states  $(\mathbf{6}, \mathbf{6})$ , identified in Refs.<sup>49,50,54</sup>, exhaust the three possible  $PSU(4)$  SPT phases predicted by the cohomology classification. In this respect, we find microscopic ladder models which realize these phases. On top of these chiral Haldane phase and the standard RS phase, a fully gapped  $N$ -merized phase with a  $N$ -fold ground-state degeneracy, which breaks spontaneously the one-step translation symmetry, is also predicted to occur in model (1).

The paper is organized as follows. In Sec. II, we derive a strong-coupling approach to the two-leg spin ladder (1) in the strong-ferromagnetic  $J_{\perp}/J_{\parallel} \rightarrow -\infty$  and study the composite-spin approach to the  $SU(N)$  Heisenberg spin chain in the adjoint representation to reveal the emergence of the chiral-Haldane physics. The low-energy approach, in the weak-coupling limit, is presented in Sec. III and is described by an  $SU(N)_2$  and  $\mathbb{Z}_N$  parafermionic conformal field theories (CFT). The chiral-Haldane phases are then obtained due to the spontaneous-breaking of the inversion symmetry though the edge-end excitations cannot be explored within our approach in stark contrast to the  $N = 2$  case since here the underlying CFTs are not free.<sup>26</sup> Sec. IV contains our DMRG calculations in the simplest  $N = 3$  case where we map out the phase diagram of the generalized  $SU(3)$  two-leg spin ladder (1) with the correct identification of the edge states for the two chiral Haldane phases. Finally, our conclusion is given in Sec. V and some technical details are provided in two Appendices.

## II. STRONG-COUPLING LIMIT

The strong-coupling expansion starts from the case of isolated rungs, i.e.,  $J_{\parallel} = J_{\times} = 0$ . Then, the Clebsch-Gordan decomposition

$$\mathbf{N} \times \overline{\mathbf{N}} \simeq \mathbf{1} \oplus (\mathbf{N}^2 - 1) \quad (2)$$

tells that the  $N^2$  states on each rung are decomposed into the singlet and the  $(N^2 - 1)$ -dimensional adjoint. Accordingly, the energy of each rung is given by

$$J_{\perp} S_{1,i}^A S_{2,i}^A = \begin{cases} -J_{\perp}(N^2 - 1)/(2N) & \text{singlet} \\ J_{\perp}/(2N) & \text{adjoint} . \end{cases} \quad (3)$$

Therefore, the strong-coupling region with  $J_{\perp} > 0$  is in the ‘‘rung-singlet’’ phase analogous to that found in the  $N = 2$  case<sup>1</sup>; basically the ground state is a product of local  $SU(N)$ -singlets and the  $SU(N)$  generators create  $(N^2 - 1)$ -plet of gapful excitations [an  $SU(N)$  generalization of triplon] over this ‘‘non-magnetic’’ ground state.

In the case of large negative  $J_{\perp}$ , where  $\mathbf{N}$  and  $\overline{\mathbf{N}}$  form the  $(N^2 - 1)$ -dimensional adjoint, the strong-coupling limit is even less trivial. One may naively expect that the  $SU(N)$  Heisenberg chain in the adjoint representation is obtained as in the usual  $S = 1/2$  two-leg ladder. Below, we show that the resulting effective Hamiltonian contains an extra interaction that does not exist in the case of  $SU(2)$  (nevertheless, the above expectation is correct in the case of the  $\mathbf{N}$ - $\mathbf{N}$  ladder; see Appendix A).

We start from the  $(N^2 - 1)$ -fold degenerate ground states on each rung:

$$|A\rangle = \sqrt{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^N (S^A)_{\alpha\beta} |\alpha\rangle \otimes |\bar{\beta}\rangle \quad (A = 1, \dots, N^2 - 1), \quad (4)$$

where  $\{S^A\}$  are the  $SU(N)$  generators in the  $N$ -dimensional defining representation ( $\mathbf{N}$ ) satisfying  $\text{Tr}(S_A S_B) = \delta_{AB}/2$ , and  $|\alpha\rangle$  ( $|\bar{\alpha}\rangle$ ) are the states in  $\mathbf{N}$  ( $\overline{\mathbf{N}}$ ). It is easy to check that these are orthonormal:

$$\begin{aligned} \langle A|B\rangle &= 2 \sum_{\alpha,\beta=1}^N \sum_{\mu,\nu=1}^N (S^B)_{\mu\nu}^* (S^A)_{\alpha\beta} \langle \mu| \otimes \langle \bar{\nu}|\alpha\rangle \otimes |\bar{\beta}\rangle \\ &= 2 \sum_{\alpha,\beta=1}^N (S^B)_{\alpha\beta}^* (S^A)_{\alpha\beta} = 2 \text{Tr}(S^A S^B) = \delta_{AB} . \end{aligned} \quad (5)$$

The products of  $\otimes_j |A_j\rangle_j$  on the individual rungs form a degenerate manifold of the strong-coupling ground states on which the Hamiltonian (1) acts non-trivially.

To carry out degenerate perturbation theory, let us calculate the matrix elements of the  $SU(N)$  generators with respect to  $\{|A\rangle\}$ . We begin by the generators in  $\mathbf{N}$  which act on the states on the first chain [i.e., on the  $\mathbf{N}$ -part of (4)]:

$$\hat{S}^A = \sum_{\alpha,\beta=1}^3 (S^A)_{\alpha\beta} |\alpha\rangle \langle \beta|. \quad (6)$$

Using eq. (4), we can readily evaluate

$$\begin{aligned} \langle C|\hat{S}^A|B\rangle &= 2 \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\mu,\nu} \sum_{\rho,\sigma} (S^{C*})_{\mu\nu} (S^B)_{\alpha\beta} (S^A)_{\rho\sigma} \delta_{\mu\rho} \delta_{\alpha\sigma} \delta_{\beta\nu} \\ &= 2 \sum_{\alpha,\beta,\mu} (S^{C*})_{\mu\beta} (S^B)_{\alpha\beta} (S^A)_{\mu\alpha} \\ &= 2 \text{Tr}(S^B S^C S^A) = 2 \text{Tr}(S^C S^A S^B), \end{aligned} \quad (7)$$

where we have used the hermiticity of  $\{S^A\}$ . Similarly, for the generators in the conjugate representation  $\overline{\mathbf{N}}$

$$\hat{\bar{S}}^A = \sum_{\alpha,\beta=1}^3 (-S^{A\dagger})_{\alpha\beta} |\bar{\alpha}\rangle \langle \bar{\beta}|, \quad (8)$$

we obtain the following:

$$\langle C|\hat{\bar{S}}^A|B\rangle = -2 \text{Tr}(S^C S^B S^A) = -2 \text{Tr}(S^B S^A S^C). \quad (9)$$

Now we want simplify the expressions (7) and (9). First, we note that, for  $\mathbf{N}$ , we have the following commutation and anti-commutation relations:

$$\begin{aligned} [S^A, S^B] &= i f_{ABC} S^C, \\ \{S^A, S^B\} &= d_{ABC} S^C + \frac{1}{N} \delta_{AB} \mathbf{1}, \end{aligned} \quad (10)$$

where  $\{d_{ABC}\}$  are the *symmetric* structure constants which do not exist in  $SU(2)$ . Combining them, we see that the product  $S^A S^B$  can be written as:

$$S^A S^B = \frac{1}{2} i f_{ABC} S^C + \frac{1}{2} d_{ABC} S^C + \frac{1}{2N} \delta_{AB} \mathbf{1}, \quad (11)$$

which enables us to rewrite (7) and (9) as:

$$\begin{aligned} \langle C|\hat{S}^A|B\rangle &= 2 \text{Tr}(S^C S^A S^B) = \frac{1}{2} i f_{ABC} + \frac{1}{2} d_{ABC} \\ \langle C|\hat{\bar{S}}^A|B\rangle &= -2 \text{Tr}(S^B S^A S^C) = \frac{1}{2} i f_{ABC} - \frac{1}{2} d_{ABC} . \end{aligned} \quad (12)$$

Now it is convenient to introduce another set of  $(N^2 - 1) \times (N^2 - 1)$ -dimensional matrices  $\{\mathcal{D}^A\}$  acting on the adjoint representation:

$$[\mathcal{D}^A]_{CB} \equiv d_{ABC} . \quad (13)$$

Then, we have:

$$\begin{aligned} \langle C|(\hat{S}^A + \hat{\bar{S}}^A)|B\rangle &= i f_{ABC} \equiv [\mathcal{S}^A]_{CB} \\ \langle C|(\hat{S}^A - \hat{\bar{S}}^A)|B\rangle &= d_{ABC} = [\mathcal{D}^A]_{CB} , \end{aligned} \quad (14)$$

where  $\{\mathcal{S}^A\}$  are the  $SU(N)$  generators in the adjoint representation. The point is that, when we have different representations  $\mathbf{N}$  and  $\overline{\mathbf{N}}$ , the action of the  $SU(N)$  generators  $\hat{S}^A$  and  $\hat{\bar{S}}^A$  on the adjoint module contains not only  $\mathcal{S}^A$  but also the new matrices  $\mathcal{D}^A$  [note that, in the case of  $SU(2)$ ,

$\langle C | (\hat{S}_A - \hat{S}_A) | B \rangle = 0$  identically and terms like  $\mathcal{D}^A$  never appear.]

Now we are ready to calculate the first-order perturbation. First, we note:

$$\begin{aligned} & J_{\parallel} \left\{ \hat{S}_{1,i}^A \hat{S}_{1,i+1}^A + \hat{S}_{2,i}^A \hat{S}_{2,i+1}^A \right\} + J_{\times} \left\{ \hat{S}_{1,i}^A \hat{S}_{2,i+1}^A + \hat{S}_{2,i}^A \hat{S}_{1,i+1}^A \right\} \\ &= \frac{J_{\parallel} + J_{\times}}{2} \sum_i \left( \hat{S}_{1,i}^A + \hat{S}_{2,i}^A \right) \left( \hat{S}_{1,i+1}^A + \hat{S}_{2,i+1}^A \right) \\ &+ \frac{J_{\parallel} - J_{\times}}{2} \sum_i \left( \hat{S}_{1,i}^A - \hat{S}_{2,i}^A \right) \left( \hat{S}_{1,i+1}^A - \hat{S}_{2,i+1}^A \right). \end{aligned} \quad (15)$$

Combining (14) and the above, we see that, in the strong-coupling limit ( $J_{\perp} \rightarrow -\infty$ ), the low-energy effective Hamiltonian is given by:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{N}-\bar{\mathbf{N}}}^{\text{eff}} = \frac{J_{\parallel} + J_{\times}}{2} \sum_i \mathcal{S}_i^A \mathcal{S}_{i+1}^A + \frac{J_{\parallel} - J_{\times}}{2} \sum_i \mathcal{D}_i^A \mathcal{D}_{i+1}^A. \quad (16)$$

Here we would like to stress that the usual  $\mathbf{N}-\bar{\mathbf{N}}$  two-leg  $\text{SU}(N)$  ( $N \geq 3$ ) spin ladder (1) with  $J_{\times} = 0$  is *not* the standard Heisenberg model for the adjoint spins; only when  $J_{\parallel} = J_{\times}$ , we recover the pure Heisenberg model. This is in stark contrast to the case of  $N = 2$  where both the usual two-leg ladder without the diagonal interaction<sup>1</sup> ( $J_{\times}$ ) and the composite-spin model ( $J_{\times} = J_{\parallel}$ )<sup>51–53</sup> lead to the same strong-coupling limit except for the overall numerical factor.

### III. LARGE- $N$ LIMIT

In order to carry out large- $N$  expansion, it is convenient to express the original Hamiltonian (1) in terms of the operator  $P_{\text{singlet}}^{(\mathbf{N},\bar{\mathbf{N}})}$  that projects a pair of  $\mathbf{N}$  and  $\bar{\mathbf{N}}$  spins onto the  $\text{SU}(N)$  singlet, and the operator  $\mathcal{P}(a, i; b, j)$  [ $\bar{\mathcal{P}}(a, i; b, j)$ ] that permutes the spin states in  $\mathbf{N}$  ( $\bar{\mathbf{N}}$ ) on the sites  $(a, i)$  and  $(b, j)$ .

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \mathcal{H}_{\mathbf{N}-\bar{\mathbf{N}}} = \\ & - J_{\times} \sum_j \left\{ P_{\text{singlet}}^{(\mathbf{N},\bar{\mathbf{N}})}(1, j; 2, j+1) + P_{\text{singlet}}^{(\mathbf{N},\bar{\mathbf{N}})}(2, j; 1, j+1) \right\} \\ & - J_{\perp} \sum_j P_{\text{singlet}}^{(\mathbf{N},\bar{\mathbf{N}})}(1, j; 2, j) \\ & + \frac{1}{N} J_{\parallel} \sum_j \left\{ \mathcal{P}(1, j; 1, j+1) + \bar{\mathcal{P}}(2, j; 2, j+1) \right\} + \text{const.} \end{aligned} \quad (17)$$

where  $P_{\text{singlet}}^{(\mathbf{N},\bar{\mathbf{N}})}$  denotes the projection operator onto  $\text{SU}(N)$ -singlet and  $\mathcal{P}(a, i; b, j)$  [ $\bar{\mathcal{P}}(a, i; b, j)$ ] permutes the spin states in  $\mathbf{N}$  ( $\bar{\mathbf{N}}$ ) on the sites  $(a, i)$  and  $(b, j)$ .

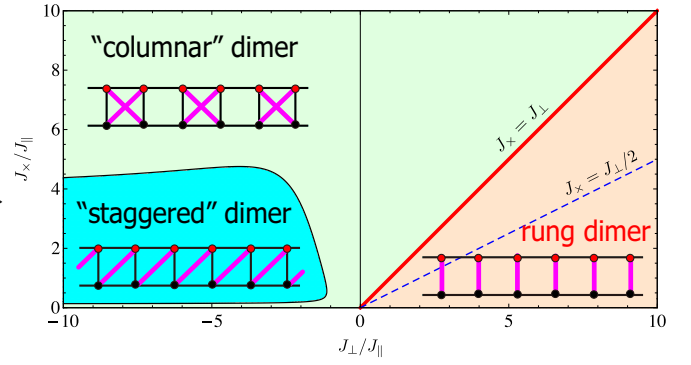


FIG. 2: Phase diagram of  $\mathbf{N}-\bar{\mathbf{N}}$  ladder (1) (with  $J_{\parallel} > 0$ ) in the large- $N$  limit. On the line  $J_{\times} = J_{\perp}$ , effective quantum dimer model emerges at  $O(1/N)$ . The two degenerate “staggered dimer” states may be interpreted as two chiral SPT states with non-trivial edge states.

## IV. LOW-ENERGY DESCRIPTION

In this section, we investigate the phase diagram of the generalized  $\text{SU}(N)$  two-spin ladder (1) by means of a field-theory approach when the chains are weakly coupled.

### A. Continuum limit

In absence of interchain coupling ( $J_{\perp}, J_{\times} = 0$ ), model (1) becomes two decoupled  $\text{SU}(N)$  Sutherland models. As already mentioned in the introduction, the latter is integrable and displays a quantum critical behavior in the  $\text{SU}(N)_1$  universality class with central charge  $c = N - 1$ .<sup>43,45</sup> The low-energy properties of the Sutherland model when the spins belong to the  $\mathbf{N}$  (respectively  $\bar{\mathbf{N}}$ ) representation can be obtained by starting from the  $\text{U}(N)$  Hubbard chain at  $1/N$  (respectively  $(N - 1)/N$ ) filling with large repulsive  $U$  interaction.<sup>44–46,55–57</sup> At low-energy below the charge gap, the  $\text{SU}(N)$  operators in the continuum limit are described by:<sup>44–46,55,56</sup>

$$S_{l,i}^A/a_0 \simeq J_{lL}^A(x) + J_{lR}^A(x) + e^{i2k_{lF}x} N_l^A(x) + e^{-i2k_{lF}x} N_l^{A\dagger}(x), \quad (18)$$

where  $x = ia_0$  and  $k_{1F} = \pi/N a_0$  ( $a_0$  being the lattice spacing) and  $k_{2F} = \pi(N - 1)/N a_0$ . In Eq. (18),  $J_{lL,R}^A$  are the left and right  $\text{SU}(N)_1$  currents, the  $2k_{lF}$  part involves the  $\text{SU}(N)_1$  Wess-Zumino-Novikov-Witten (WZNW)  $g_l$  field with scaling dimension  $(N - 1)/N$  (see Appendix C):

$$N_l^A = i\lambda \text{Tr}(g_l T^A), \quad (19)$$

where  $\lambda$  is a non-universal real constant which corresponds to the average over the charge degrees of freedom in the large  $U$  limit (see Appendix C for more details). In Eq. (19),  $T^A$  are the generators of  $\text{SU}(N)$  in the fundamental representation normalized such that:  $\text{Tr}(T^A T^B) = \delta^{AB}/2$ . The one-step translation symmetry  $T_{a_0}$  ( $S_{l,i}^A \rightarrow S_{l,i+1}^A$ ) acts as follows on



the  $g_{1,2}$  fields due to the difference of filling factors of the two chains:

$$T_{a_0} : g_1 \rightarrow e^{i2\pi/N} g_1, \quad g_2 \rightarrow e^{-i2\pi/N} g_2. \quad (20)$$

The effect of the site-parity symmetry  $P_s$  or inversion symmetry ( $S_{l,i}^A \rightarrow S_{l,-i}^A$ ) on the  $g_{1,2}$  fields can be deduced from the continuum descriptions (18, 19):

$$\begin{aligned} N_l^A(x) &\rightarrow N_l^{A\dagger}(-x) \\ g_l(x) &\rightarrow -g_l^\dagger(-x). \end{aligned} \quad (21)$$

With these basic facts, one can derive the continuum limit of the two-leg spin ladder (1) when the chains are weakly coupled  $|J_\perp, J_\times| \ll J_\parallel$ . The leading part of the continuum Hamiltonian reads as follows:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_1^{SU(N)_1} + \mathcal{H}_2^{SU(N)_1} \\ &+ \lambda_1 \int dx \left[ \text{Tr}(g_1 g_2) + H.c. \right] \\ &+ \lambda_2 \int dx \left[ \text{Tr} g_1 \text{Tr} g_2 + H.c. \right], \end{aligned} \quad (22)$$

where  $\mathcal{H}_{l=1,2}^{SU(N)_1}$  corresponds to the WZNW Hamiltonian for the  $SU(N)_1$  CFT on the chain  $l = 1, 2$  and we have the following identification for the coupling constants:

$$\lambda_1 = -a_0(J_\perp + 2J_\times \cos(2\pi/N))\lambda^2/2, \quad \lambda_2 = -\lambda_1/N. \quad (23)$$

Model (22) describes two  $SU(N)_1$  WZNW models perturbed by two strongly relevant perturbations with the same scaling dimension  $2(N-1)/N < 2$ . In Eq. (22), we have not included In Eq. (22) the marginal current-current interaction:

$$V_{cc} = \frac{1}{2} (J_\perp + J_\times - \gamma) I_R^A I_L^A - \frac{1}{2} (J_\perp + J_\times + \gamma) K_R^A K_L^A, \quad (24)$$

where  $I_{R,L}^A = J_{1R,L}^A + J_{2R,L}^A$  is a  $SU(N)_2$  current, being the sum of two  $SU(N)_1$  currents, and  $K_{R,L}^A = J_{1R,L}^A - J_{2R,L}^A$  is the so-called wrong current.<sup>2</sup> In Eq. (24),  $-\gamma < 0$  correspond to the coupling constant of the in-chain marginal irrelevant current-current perturbation which stems from the logarithmic corrections of the  $SU(N)_1$  criticality of the Sutherland model.<sup>55</sup>

Equations (22, 24) describe thus the low-energy physics of the two-leg spin ladder (1) in the weak-coupling regime  $|J_\perp, J_\times| \ll J_\parallel$ . Several remarks are in order before determining the nature of the phases. First, it takes a rather different form from the one obtained in Ref.41 where the spin operators in each chain belong to the fundamental representation of the  $SU(N)$  group though the scaling dimensions of the fields are the same in the two problems. From the identification (23), we observe that the leading part of the low-energy physics (22) disappears if we perform the fine-tuning  $J_\perp = -2J_\times \cos(2\pi/N)$  and for  $N = 4$  with  $J_\perp = 0$ . The current-current term (24) should be considered together with non-zero conformal spin (twist) perturbation of the generic form  $N_1^A \partial_x N_2^A$  which is strongly irrelevant for  $N \geq 3$  with scaling dimension  $1 + 2(N-1)/N = 2 + (N-2)/N > 2$ .

Unfortunately nothing can be concluded for a non-zero conformal spin perturbation as it is well known.<sup>2</sup> The relevant perturbations of Eq. (32) will be generated in higher-orders of perturbation theory as in the  $N = 2$  case<sup>13,14,58</sup> since the field theory (22) with independent  $\lambda_{1,2}$  couplings is the most general one with  $SU(N)$  invariance, site-parity, and translational invariance. In the following, we will thus investigate the nature of the possible phases stabilized when the couplings  $\lambda_{1,2}$  are general and focus on the precise identification (23) only when  $J_\perp \neq -2J_\times \cos(2\pi/N)$  and  $J_\perp \neq 0$  for  $N = 4$  case.

## B. Conformal-embedding approach

We now consider a approach to try to elucidate the physical nature of the phases in the weak-coupling approach by exploiting the existence of the following CFT embedding as in Ref.41:

$$SU(N)_1 \times SU(N)_1 \sim SU(N)_2 \times \mathbb{Z}_N, \quad (25)$$

where  $\mathbb{Z}_N$  is the parafermionic CFT with central charge  $c = 2(N-1)/(N+2)$  which describes the universal properties of the phase transition of the two-dimensional  $\mathbb{Z}_N$  Potts model.<sup>59</sup> The  $SU(N)_2$  CFT has central charge  $c = 2(N^2-1)/(N+2)$  and is generated by the currents  $I_{R,L}^A$ . The two  $SU(N)_1$  WZNW fields  $g_{1,2}$  can be expressed in the  $SU(N)_2 \times \mathbb{Z}_N$  basis:<sup>41,60</sup>

$$\begin{aligned} (g_1)_{\alpha\beta} &\sim G_{\alpha\beta} \sigma_1 \\ (g_2)_{\alpha\beta} &\sim G_{\alpha\beta} \sigma_1^\dagger, \end{aligned} \quad (26)$$

where  $\alpha, \beta = 1, \dots, N$  and  $G$  is the  $SU(N)_2$  WZNW field with scaling dimension  $\Delta_G = (N^2-1)/N(N+2)$ . In Eq. (26),  $\sigma_1$  is the  $\mathbb{Z}_N$  spin field with scaling dimension  $\Delta_\sigma = (N-1)/N(N+2)$ . From Eqs. (20, 21), we can find the continuous description of the the one-step translation symmetry  $T_{a_0}$  and site-parity transformation in the new  $SU(N)_2 \times \mathbb{Z}_N$  basis. Using the identification (20), we observe that the one-step translation symmetry  $T_{a_0}$  does not act on the  $G$  field but corresponds to the  $\mathbb{Z}_N$  transformation of the spin field:  $\sigma_1 \rightarrow e^{2i\pi/N} \sigma_1$ . The site-parity transformation (21) coincides with the conjugation for  $G$  and  $\sigma_1$  fields:

$$\begin{aligned} G(x) &\rightarrow G^\dagger(-x) \\ \sigma_1(x) &\rightarrow -\sigma_1^\dagger(-x). \end{aligned} \quad (27)$$

Using the identification (26), model (22), which governs the low-energy physics of weakly-coupled  $SU(N)$  two-leg spin ladder, can be expressed in the new basis. To this end, we need the following fusion rules of the  $SU(N)_2$  and  $\mathbb{Z}_N$  CFT,<sup>61</sup> written in a compact way:

$$G \times G \sim \Phi_A + \Phi_S, \quad \sigma_1 \times \sigma_1^\dagger \sim I + \epsilon_1, \quad (28)$$

where  $\Phi_A$  (respectively  $\Phi_S$ ) is the  $SU(N)_2$  primary in the  $\square$  (respectively  $\square\square$ ) representation of  $SU(N)$  with scaling dimension  $(N+1)(N-2)/N(N+2)$  (respectively

$2(N-1)/N$ ). These two fields can be expressed in terms of the  $SU(N)_2$  WZW field which transforms in the fundamental representation of  $SU(N)$ :

$$\text{Tr}\Phi_A \sim (\text{Tr}G)^2 - \text{Tr}G^2, \quad \text{Tr}\Phi_S \sim \text{Tr}G^2 + (\text{Tr}G)^2. \quad (29)$$

In the fusion rule (28) for the  $\mathbb{Z}_N$  CFT, we have neglected irrelevant contributions and  $\epsilon_1$  is the first thermal operator, singlet under the  $\mathbb{Z}_N$  symmetry, with scaling dimension  $\Delta_\epsilon = 4/(N+2)$ . In our convention,  $\langle \epsilon_1 \rangle < 0$  denotes the paramagnetic phase of the underlying  $\mathbb{Z}_N$  model where the  $\mathbb{Z}_N$  symmetry is not spontaneously broken. As shown in Appendix D, we have the following identification:

$$\begin{aligned} \text{Tr}g_1 \text{Tr}g_2 &\sim \text{Tr}\Phi_S + \epsilon_1 \text{Tr}\Phi_A \\ \text{Tr}(g_1 g_2) &\sim \text{Tr}\Phi_S - \epsilon_1 \text{Tr}\Phi_A, \end{aligned} \quad (30)$$

which is consistent for  $N=3$  with the character decomposition corresponding to the conformal embedding (25):<sup>62</sup>

$$\chi_3^{(1)}(q)\chi_3^{(1)}(q) = \chi_6^{(2)}(q)\chi_0^{\mathbb{Z}_3}(q) + \chi_3^{(2)}(q)\chi_{4/5}^{\mathbb{Z}_3}(q), \quad (31)$$

where  $\chi_3^{(1)}(q)$  is the  $SU(3)_1$  character in the fundamental representation and  $\chi_{6,3}^{(2)}(q)$  are the  $SU(3)_2$  characters in  $\begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix}$ ,  $\begin{smallmatrix} \square \\ \square \end{smallmatrix}$   $SU(3)$  representations respectively. Finally,  $\chi_h^{\mathbb{Z}_3}(q)$  denotes the  $\mathbb{Z}_3$  character with a primary field with holomorphic weight  $h$ .

With all these results, we can express the interacting part of model (22) in the  $SU(N)_2 \times \mathbb{Z}_N$  basis:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} &= \tilde{\lambda}_1 \int dx \left( \text{Tr}G^2 + (\text{Tr}G)^2 + H.c. \right) \\ &+ \tilde{\lambda}_2 \int dx \left( (\text{Tr}G)^2 - \text{Tr}G^2 + H.c. \right) \epsilon_1, \end{aligned} \quad (32)$$

with:

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_1 &= -a_0 \frac{(J_\perp + 2J_\times \cos(2\pi/N))\lambda^2(N-1)}{2N} \\ \tilde{\lambda}_2 &= a_0 \frac{(J_\perp + 2J_\times \cos(2\pi/N))\lambda^2(N+1)}{2N}. \end{aligned} \quad (33)$$

The resulting effective field theory is very different from the one analysed in Ref.41 for the standard two-leg  $SU(N)$  spin ladder in the fundamental representation. The current-current contribution (24) can also be expressed in the new basis and we have for the wrong current  $K_{R,L}^A = J_{1R,L}^A - J_{2R,L}^A$  (see Appendix D):

$$K_R^A K_L^A \sim -\text{Tr}\Phi_{\text{adj}}\epsilon_1, \quad (34)$$

where  $\Phi_{\text{adj}}$  is the  $SU(N)_2$  primary field with scaling dimension  $2N/(N+2)$  which transforms in the adjoint representation of  $SU(N)$ . The latter operator can also be expressed in terms of the fundamental  $G$  field:<sup>41,63</sup>

$$\begin{aligned} \text{Tr}\Phi_{\text{adj}} &= \text{Tr}(G^\dagger T^A G T^A) \\ &= \frac{1}{2} \left( \text{Tr} G \text{Tr} G^\dagger - \frac{1}{N} \text{Tr}(GG^\dagger) \right). \end{aligned} \quad (35)$$

We thus obtain for the marginal perturbation

$$V_{cc} = \frac{1}{2} (J_\perp + J_\times - \gamma) I_R^A I_L^A + \frac{1}{2} (J_\perp + J_\times + \gamma) \text{Tr}\Phi_{\text{adj}}\epsilon_1. \quad (36)$$

The two relevant perturbations of Eq. (32) are not integrable but one expects a fully gapped phase on general grounds. The nature of the phase can be inferred from a semiclassical approach. To shed light on the possible fully gapped phases of the problem, we first single out the  $SU(N)$  perturbation which does not depend on the  $\mathbb{Z}_N$  degrees of freedom in the  $\tilde{\lambda}_1 > 0$  and  $\tilde{\lambda}_1 < 0$  cases. It means that we perform a strong-coupling approach when  $|\tilde{\lambda}_1| \gg |\tilde{\lambda}_2|$ , a regime which can be reached by introducing, for instance, an additional four-spin exchange interaction as in Ref.41. We then deduce the physics for the non-magnetic  $\mathbb{Z}_N$  degrees of freedom by exploiting the integrability of the resulting  $\mathbb{Z}_N$  field theory.

$$I. \quad \tilde{\lambda}_1 < 0$$

If  $\tilde{\lambda}_1 < 0$ , i.e.  $J_\perp > -2J_\times \cos(2\pi/N)$ , then the maximization of  $\text{Tr}\Phi_S$  gives:  $G = \pm I$  (respectively  $G = I$ ) when  $N$  is even (respectively odd). The solutions do not break the conjugation and therefore the site-parity symmetry (27).

Averaging over the  $G$  field in Eqs. (32,36), we obtain an effective action on the  $\mathbb{Z}_N$  parafermion which reads as follows:

$$\mathcal{S}_{\text{eff}} = \mathcal{S}_{\mathbb{Z}_N} + \tilde{\lambda} \int d^2x \epsilon_1, \quad (37)$$

where  $\mathcal{S}_{\mathbb{Z}_N}$  is the Euclidean action of the  $\mathbb{Z}_N$  CFT and the coupling constant  $\tilde{\lambda}$  is:

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda} &= a_0 \frac{(J_\perp + 2J_\times \cos(2\pi/N))\lambda^2(N+1)}{2N} \\ &\times \left\langle \left( (\text{Tr}G)^2 - \text{Tr}G^2 + H.c. \right) \right\rangle + \frac{a_0}{2} (J_\perp + J_\times + \gamma) \langle \text{Tr}\Phi_{\text{adj}} \rangle \\ &= (J_\perp + 2J_\times \cos(2\pi/N))A + B (J_\perp + J_\times + \gamma), \end{aligned} \quad (38)$$

$A$  and  $B$  being two positive constants. The  $\mathbb{Z}_N$  perturbation (37) is integrable and describes a massive field theory for all sign of  $\tilde{\lambda}$ .<sup>64</sup> When  $\tilde{\lambda} > 0$ , we have  $\langle \epsilon_1 \rangle < 0$  and the underlying two-dimensional  $\mathbb{Z}_N$  lattice model belongs to its high-temperature (paramagnetic) phase where the  $\mathbb{Z}_N$  symmetry is restored. In our two-leg spin ladder, it means that the one-step translation symmetry is not spontaneously broken and a non-degenerate gapful phase is stabilized. In the even  $N$  case, we expect also a non-degenerate ground state though  $G = \pm I$  since from the identification (26) the change of sign of  $G$  can be absorbed into a redefinition of the  $\sigma_1$  field:  $\sigma_1 \rightarrow -\sigma_1$ , which is still a  $\mathbb{Z}_N$  spin field when  $N = 2p$ :  $(-\sigma_1)^N \sim I$ . The phase is thus featureless for all  $N$  and corresponds to the RS phase obtained when  $J_\perp/J_\parallel \rightarrow +\infty$ .

If  $\tilde{\lambda} < 0$  and  $\langle \epsilon_1 \rangle > 0$  which means that the  $\mathbb{Z}_N$  symmetry is spontaneously broken:  $\langle \sigma_1 \rangle \neq 0$ . The one-step translation symmetry is broken and we expect the formation of

a  $N$ -merized phase with an  $N$ th fold ground-state degeneracy. Indeed, using the decomposition (18), we get the following identification in the general  $N$  case (see Appendix B of Ref.41):

$$\begin{aligned} S_{1,n}^A S_{1,n+1}^A &\sim e^{2in\pi/N} \text{Tr}g_1 + H.c. \\ S_{2,n}^A S_{2,n+1}^A &\sim e^{-2in\pi/N} \text{Tr}g_2 + H.c., \end{aligned} \quad (39)$$

so that from Eq. (26) we have when  $G = I$ :

$$\begin{aligned} \langle S_{1,n}^A S_{1,n+1}^A \rangle &\simeq e^{2in\pi/N} \langle \sigma_1 \rangle + c.c. \\ \langle S_{2,n}^A S_{2,n+1}^A \rangle &\simeq e^{-2in\pi/N} \langle \sigma_1^\dagger \rangle + c.c. \end{aligned} \quad (40)$$

We have  $N$  different bond-energies which are the same in each leg. The  $N$ -merization, i.e. trimerization when  $N = 3$ , is thus in-phase between the chains of the two-leg spin ladder.

## 2. $\tilde{\lambda}_1 > 0$

When  $\tilde{\lambda}_1 > 0$ , i.e.  $J_\perp < -2J_\times \cos(2\pi/N)$ , the minimization of  $\text{Tr}\Phi_S + H.c.$  gives a complicated set of solutions depending on  $N$ :

$$\begin{aligned} G &= \pm iI \quad (N = 4p) \\ G &= \pm i e^{\pm i\pi/N} I \quad (N = 4p + 2 \geq 10) \\ G &= \pm i \text{diag}(1, 1, 1, 1, -1) \quad (N = 6) \\ G &= e^{\pm i2p\pi/N} I \quad (N = 4p + 1) \\ G &= e^{\pm i(N+1)\pi/2N} I \quad (N = 4p + 3). \end{aligned} \quad (41)$$

All these solutions break the conjugation symmetry for all  $N$  and thus the site-parity symmetry (27). We then deduce the effective action on the  $\mathbb{Z}_N$  parafermion as in the  $\tilde{\lambda}_1 > 0$  case:

$$\mathcal{S}_{\text{eff}} = \mathcal{S}_{\mathbb{Z}_N} + \tilde{\lambda} \int d^2x \epsilon_1, \quad (42)$$

with

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda} &= a_0 \frac{(J_\perp + 2J_\times \cos(2\pi/N))\lambda^2(N+1)}{2N} \\ &\times \langle \left( (\text{Tr}G)^2 - \text{Tr}G^2 + H.c. \right) \rangle + \frac{a_0}{2} (J_\perp + J_\times + \gamma) \langle \text{Tr}\Phi_{\text{adj}} \rangle \\ &= -(J_\perp + 2J_\times \cos(2\pi/N))A + B (J_\perp + J_\times + \gamma), \end{aligned} \quad (43)$$

$A$  and  $B$  being two positive constants. The  $\mathbb{Z}_N$  degrees of freedom are disordered when  $\tilde{\lambda} > 0$  and the phase is fully gapped without breaking the one-step translation symmetry for all  $N$ . However, the site-parity symmetry is spontaneously broken and a two-fold degenerate ground state emerges. In this respect, the physics is very similar to the SPT phase in the adjoint representation of the  $SU(N)$  group obtained in the strong-coupling regime.<sup>33,34</sup> The connection with the chiral Haldane phase can be made more precise by considering the two-leg spin ladder (1) with  $J_\perp = 0$  and  $J_\times > 0$  when  $N = 3$ , which gives  $\tilde{\lambda}_1 > 0$  and  $\tilde{\lambda} > 0$ , and by introducing a small anisotropy between the spin-exchange along the diagonals:

$$\mathcal{V} = K \sum_i (S_{1,i}^A S_{2,i+1}^A - S_{1,i+1}^A S_{2,i}^A). \quad (44)$$

The latter perturbation breaks explicitly the site-parity symmetry and reads as follows by means of the low-energy approach:

$$\begin{aligned} \mathcal{V} &\simeq \kappa_1 \int dx i \left( \text{Tr}G^2 + (\text{Tr}G)^2 - H.c. \right) \\ &+ \kappa_2 \int dx i \left( (\text{Tr}G)^2 - \text{Tr}G^2 - H.c. \right) \epsilon_1, \end{aligned} \quad (45)$$

with

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= a_0 \frac{K\sqrt{3}\lambda^2}{6} \\ \kappa_2 &= -a_0 \frac{K\sqrt{3}\lambda^2}{3}. \end{aligned} \quad (46)$$

When  $K > 0$  one has  $\kappa_1 > 0$  and the minimization of Eq. (45) gives a unique solution  $G = j^2 I$  while the  $\mathbb{Z}_3$  symmetry remains unbroken. When  $K < 0$  we get the site-parity partner  $G = jI$ . In each case, it signals the emergence of a non-degenerate chiral Haldane phase which can be understood as the formation of singlets along one of the diagonals of the ladder in the strong antiferromagnetic or ferromagnetic  $K$  limit (see Fig. ?). When open-boundary conditions are used, a chiral Haldane phase ( $\bar{\mathbf{3}}, \mathbf{3}$ ) (respectively  $(\mathbf{3}, \bar{\mathbf{3}})$ ) emerges for  $K > 0$  (respectively  $K < 0$ ).

When  $\tilde{\lambda} < 0$ , we have now  $\langle \epsilon_1 \rangle > 0$  and the  $\mathbb{Z}_N$  degrees of freedom order. The phase is fully gapped with the spontaneous breaking of the one-step translation and site-parity symmetries for all  $N$ . For instance, in the  $N = 3$  case, we have  $G = e^{\pm i2\pi/3} I$  and  $\langle \sigma_1 \rangle \neq 0$  so that from Eq. (39) and the identification (26), one obtains:

$$\begin{aligned} \langle S_{1,n}^A S_{1,n+1}^A \rangle &\simeq e^{\pm i2\pi/3} e^{2in\pi/3} \langle \sigma_1 \rangle + c.c. \\ \langle S_{2,n}^A S_{2,n+1}^A \rangle &\simeq e^{\pm i2\pi/3} e^{-2in\pi/3} \langle \sigma_1^\dagger \rangle + c.c.. \end{aligned} \quad (47)$$

## C. Phases of the two-leg spin ladder

With all these results, we can now map out the zero-temperature phase diagram of the generalized two-leg spin ladder model (1) for weak interchain couplings. Our low-energy approach predicts different competing phases but the determination of the phase diagram depends on the relative value between the two unknown non-universal positive parameters  $A$  and  $B$  of Eqs. (38, 43).

However, in some special cases, one can conclude without ambiguity as for instance in the case of the diagonal two-leg spin ladder without the interchain coupling  $J_\perp = 0$  with an antiferromagnetic diagonal interaction  $J_\times > 0$  and  $N \neq 4$ . Indeed, we have then  $\tilde{\lambda}_1 > 0$  and  $\tilde{\lambda} > 0$  from Eqs. (33, 43) when  $N = 3$  so that the SPT phase with broken parity symmetry is stabilized. In contrast, when  $N \geq 5$ , we get  $\tilde{\lambda}_1 < 0$  and  $\tilde{\lambda} > 0$  and the formation of the RS phase is expected. A second example is the standard two-leg spin ladder with  $J_\times = 0$  and an antiferromagnetic interchain coupling  $J_\perp > 0$ . One observes from Eqs. (33, 38) that  $\tilde{\lambda}_1 < 0$  and  $\tilde{\lambda} > 0$ , a result which signals the emergence of the RS phase

for all  $N$  in full agreement from the strong-coupling analysis when  $J_{\perp} \rightarrow +\infty$ . Finally along the special line  $J_{\perp} = -J_{\times}$ , the low-energy approach predicts the formation of the SPT (respectively RS) phase when  $J_{\perp} < 0$  (respectively  $J_{\perp} > 0$ ) when  $N = 3, 5$ .

In other cases, the result depends on the relative value between the parameters  $A$  and  $B$  of Eqs. (38, 43) and we need a complementary numerical approach to conclude. For instance, for the standard two-leg spin ladder with  $J_{\times} = 0$  and a ferromagnetic interchain interaction  $J_{\perp} < 0$ , the SPT phase occurs if  $A > B$  while a quantum phase transition is expected when  $A < B$  from the SPT phase when  $0 > J_{\perp} > J_{\perp c}$  to a  $N$ -merized phase when  $J_{\perp} < J_{\perp c}$  with  $J_{\perp c} = -B\gamma/(B - A) < 0$ . We note that in the latter case the critical value of  $J_{\perp}$  which marks the onset of the  $N$ -merized phase depends on the marginal irrelevant coupling  $\gamma$  which accounts for the logarithmic corrections of the  $SU(N)_1$  quantum criticality of the Sutherland model.<sup>55</sup> In this respect, we need numerical calculations to shed light on the nature of the phase of the two-leg spin ladder with a ferromagnetic interchain coupling.

## V. DMRG CALCULATIONS

In this section, we map out the phase diagram of the generalized two-leg spin ladder (1) in the simplest case  $N = 3$  by means of DMRG calculations. In this respect, it is more convenient for the numerical simulations where the  $SU(3)$  is not fully taken into account to express model (1) in terms of spin-1 variables. The  $SU(3)$  Sutherland model is known to be equivalent to a bilinear spin-1 Heisenberg chain with a fine-tuned biquadratic exchange interaction.<sup>55</sup> The exchange interaction between a site in  $\mathbf{3}$  representation and another in the  $\bar{\mathbf{3}}$  one corresponds to a pure negative biquadratic interaction.<sup>34,65,66</sup> With these results, we deduce that the  $SU(3)$  two-leg spin ladder Hamiltonian (1) is expressed in terms of a two-leg spin-1 ladder with biquadratic terms :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_{\parallel} \sum_i \sum_{l=1}^2 \left( \mathbf{S}_{l,i} \cdot \mathbf{S}_{l,i+1} + (\mathbf{S}_{l,i} \cdot \mathbf{S}_{l,i+1})^2 \right) \\ & - J_{\perp} \sum_i (\mathbf{S}_{1,i} \cdot \mathbf{S}_{2,i})^2 - J_{\times} \sum_i \left[ (\mathbf{S}_{1,i} \cdot \mathbf{S}_{2,i+1})^2 \right. \\ & \left. + (\mathbf{S}_{2,i} \cdot \mathbf{S}_{1,i+1})^2 \right], \end{aligned} \quad (48)$$

where  $\mathbf{S}_{l,i}$  are spin-1 operators on site  $i$  and leg  $l = 1, 2$ .

## VI. CONCLUSION

### Acknowledgments

The authors are grateful to CNRS (France) for financial support (PICS grant). One of the authors (KT) is supported in part by JSPS KAKENHI Grant No. 15K05211 and No. JP15H05855. This work was performed using HPC resources from GENCI (Grant No. x2016050225 and No.

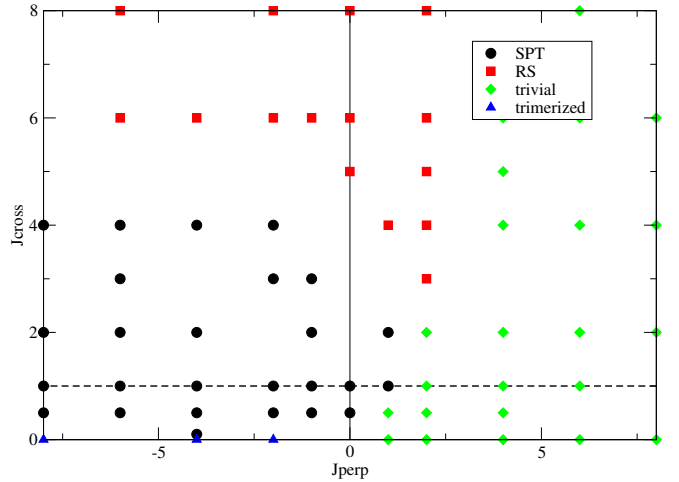


FIG. 3: Phase diagram of the  $\mathbf{3} - \bar{\mathbf{3}}$  ladder model (1) obtained by DMRG calculations.  $J_{\times}$  and  $J_{\perp}$  are expressed in unit of  $J_{\parallel}$ , and only the regime  $J_{\times}, J_{\parallel} > 0$  is drawn.

x2017050225) and CALMIP. Last, the authors thank the program “Exotic states of matter with  $SU(N)$ -symmetry” held at Yukawa Institute for Theoretical Physics where early stage of this work has been carried out.

## APPENDIX A: STRONG-COUPLING LIMIT OF TWO-LEG LADDER WITH IDENTICAL LEGS

To highlight the peculiarity of the  $N - \bar{N}$  ladder, let us consider the following two-leg ladder with identical spins (i.e.,  $N$ ) on both legs:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{N-N} = & J_{\parallel} \sum_j \{ S_{1,j}^A S_{1,j+1}^A + S_{2,j}^A S_{2,j+1}^A \} + J_{\perp} \sum_j (S_{1,j}^A S_{2,j}^A) \\ & + J_{\times} \sum_j \{ S_{1,j}^A S_{2,j+1}^A + S_{2,j}^A S_{1,j+1}^A \}. \end{aligned} \quad (A1)$$

As a pair of spins on the rung- $j$  satisfy

$$\sum_{A=1}^8 S_{1,j}^A S_{2,j}^A = \begin{cases} \frac{1}{2N}(N-1) & \text{symmetric 2-tensor } \square \\ -\frac{1}{2N}(N+1) & \text{anti-symmetric 2-tensor } \square \end{cases}, \quad (A2)$$

in the strong-coupling limit  $|J_{\perp}| \gg J$ , the state with symmetric  $\square$  is chosen for  $J_{\perp} < 0$  and anti-symmetric  $\square$  for  $J_{\perp} > 0$ .

### a. Case of $J_{\perp} > 0$ :

The  $N(N-1)/2$  basis states in the anti-symmetric 2-tensor representation may be written as

$$|\alpha, \beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha\rangle_1 \otimes |\beta\rangle_2 - |\beta\rangle_1 \otimes |\alpha\rangle_2) \quad (1 \leq \beta < \alpha \leq N). \quad (A3)$$



It is straightforward to calculate the following matrix elements:

$$\begin{aligned} & \langle \mu, \nu | \hat{S}_1^A | \alpha, \beta \rangle \\ &= \frac{1}{2} \{ (S^A)_{\mu\alpha} \delta_{\beta\nu} - (S^A)_{\mu\beta} \delta_{\alpha\nu} - (S^A)_{\nu\alpha} \delta_{\beta\mu} + (S^A)_{\nu\beta} \delta_{\alpha\mu} \} \\ & \langle \mu, \nu | \hat{S}_1^A | \alpha, \beta \rangle = \langle \mu, \nu | \hat{S}_2^A | \alpha, \beta \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A4})$$

These immediately imply

$$\begin{aligned} \langle \mu, \nu | \hat{S}^A(\boxplus) | \alpha, \beta \rangle &= \langle \mu, \nu | \{ \hat{S}_1^A + \hat{S}_1^A \} | \alpha, \beta \rangle \\ &= 2 \langle \mu, \nu | \hat{S}_1^A | \alpha, \beta \rangle = 2 \langle \mu, \nu | \hat{S}_2^A | \alpha, \beta \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

Therefore, within the first-order perturbation, we obtain the following strong-coupling effective (Heisenberg) Hamiltonian<sup>40</sup>:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{\text{N-N}}(J_{\perp} > 0) = \frac{1}{2} (J + J_{\times}) \sum_j S_j^A(\boxplus) S_{j+1}^A(\boxplus) . \quad (\text{A6})$$

*b. Case of  $J_{\perp} < 0$ :*

Now the single-rung ground state is in the symmetric 2-tensor representation  $\square\square$ , whose basis states are given by:

$$|\widetilde{\alpha}, \widetilde{\beta}\rangle = \begin{cases} |\alpha\rangle_1 |\beta\rangle_2 & \text{when } \alpha = \beta \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha\rangle_1 \otimes |\beta\rangle_2 + |\beta\rangle_1 \otimes |\alpha\rangle_2) & \text{when } \alpha \neq \beta . \end{cases} \quad (\text{A7})$$

As in the previous case, we obtain the matrix elements of  $\hat{S}_1^A$  and  $\hat{S}_2^A$  for the above basis states:

$$\begin{aligned} & \langle \widetilde{\mu}, \widetilde{\nu} | \hat{S}_1^A | \widetilde{\alpha}, \widetilde{\beta} \rangle \\ &= \frac{1}{2} \{ (S^A)_{\mu\alpha} \delta_{\beta\nu} + (S^A)_{\mu\beta} \delta_{\alpha\nu} + (S^A)_{\nu\alpha} \delta_{\beta\mu} + (S^A)_{\nu\beta} \delta_{\alpha\mu} \} \\ & \langle \widetilde{\mu}, \widetilde{\nu} | \hat{S}_1^A | \widetilde{\alpha}, \widetilde{\beta} \rangle = \langle \widetilde{\mu}, \widetilde{\nu} | \hat{S}_2^A | \widetilde{\alpha}, \widetilde{\beta} \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A8})$$

Again we have similar relations

$$\begin{aligned} \langle \widetilde{\mu}, \widetilde{\nu} | \hat{S}^A(\boxminus) | \widetilde{\alpha}, \widetilde{\beta} \rangle &= \langle \widetilde{\mu}, \widetilde{\nu} | \{ \hat{S}_1^A + \hat{S}_1^A \} | \widetilde{\alpha}, \widetilde{\beta} \rangle \\ &= 2 \langle \widetilde{\mu}, \widetilde{\nu} | \hat{S}_1^A | \widetilde{\alpha}, \widetilde{\beta} \rangle = 2 \langle \widetilde{\mu}, \widetilde{\nu} | \hat{S}_2^A | \widetilde{\alpha}, \widetilde{\beta} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

and we can readily see that the first-order (in  $J$ ) effective Hamiltonian for  $J_{\perp} < 0$  is given again by the Heisenberg Hamiltonian:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}(J_{\perp} < 0) = \frac{1}{2} (J + J_{\times}) \sum_j S_j^A(\boxminus) S_{j+1}^A(\boxminus) \quad (\text{A10})$$

with the spins belonging to the symmetric 2-tensor representation  $\square\square$ . Therefore, in the case of the  $\text{SU}(N)$  two-leg ladder with identical representations for the two legs, the strong-coupling limit ( $|J_{\perp}| \gg 1$ ) is described by the usual Heisenberg Hamiltonian in  $\boxplus$  or  $\boxminus$  regardless of the sign of  $J_{\perp}$ , while an additional interaction appears in the case of  $\text{N-N}$  ladder [see eq. (16)].

## APPENDIX B: PROJECTION AND PERMUTATION OPERATORS

$$\mathcal{P}(i; j) = \sum_{a,b=1}^N |a\rangle_i |b\rangle_j \langle b|_i \langle a|_j = \sum_{A=1}^{N^2-1} S_i^A S_j^A + \frac{1}{N} , \quad (\text{B1})$$

$$\overline{\mathcal{P}}(i; j) = \sum_{a,b=1}^N |\bar{a}\rangle_i |\bar{b}\rangle_j \langle \bar{b}|_i \langle \bar{a}|_j = \sum_{A=1}^{N^2-1} \bar{S}_i^A \bar{S}_j^A + \frac{1}{N} .$$

$$\begin{aligned} P_{\text{singlet}}^{(\text{N},\text{N})}(i; j) &= \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \right)^2 \sum_{a,b=1}^N |a\rangle_i |\bar{a}\rangle_j \langle b|_i \langle \bar{b}|_j \\ &= -\frac{1}{N} \sum_{A=1}^{N^2-1} S_i^A \bar{S}_j^A + \frac{1}{N^2} . \end{aligned} \quad (\text{B2})$$

## APPENDIX C: NON-ABELIAN BOSONIZATION AND $\text{SU}(N)$ SPIN CHAIN

In this Appendix, we review in a nutshell the continuum description of the  $\text{SU}(N)$  spin operator of Eq. (18) in terms of the currents  $J_{R,L}^A$  and the WZNW primary field  $g$  of the  $\text{SU}(N)_1$  CFT. As is well-known, the low-energy properties of the  $\text{SU}(N)$  Sutherland model can be extracted from the one-dimensional  $U(N)$  Hubbard chain in the large repulsive  $U$  limit for a  $1/N$ -filling with Fermi-wavevector  $k_F = \pi/(Na_0)$  with Hamiltonian:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{Hubbard}} &= -t \sum_i \sum_{\alpha=1}^N \left( c_{\alpha,i+1}^{\dagger} c_{\alpha,i} + H.c. \right) \\ &+ \frac{U}{2} \sum_{i,\alpha,\beta} n_{\alpha,i} n_{\beta,i} (1 - \delta_{\alpha\beta}) , \end{aligned} \quad (\text{C1})$$

where  $c_{\alpha,i}^{\dagger}$  creates a spinless fermion in the band  $\alpha = 1, \dots, N$  of the site  $i$  and  $n_{\alpha,i} = c_{\alpha,i}^{\dagger} c_{\alpha,i}$  is the occupation number. When the Hubbard interaction  $U$  is sufficiently large, the system becomes a Mott insulator and the charge degrees of freedom gets decoupled from the low-energy physics. The physical properties of this Mott-insulating phase are described by the  $\text{SU}(N)$  Sutherland model:<sup>44-46,55-57</sup>

$$\mathcal{H}_{\text{Sutherland}} = J \sum_i \sum_{A=1}^{N^2-1} S_{i+1}^A S_i^A , \quad (\text{C2})$$

where  $J = 4t^2/U$  is the spin-exchange and  $S_i^A = c_{\alpha,i}^{\dagger} T_{\alpha\beta}^A c_{\beta,i}$  ( $\text{Tr}(T^A T^B) = \delta^{AB}/2$ ) is the  $\text{SU}(N)$  spin operator on site  $i$ . Model (C2) is integrable and has  $N-1$  gapless modes that are described by the  $\text{SU}(N)_1$  CFT with central charge  $c = N-1$ . A continuum description of the  $\text{SU}(N)$  spin operator can be derived from the continuum limit of the fermion in terms of  $N$

Dirac fermions:  $c_{\alpha,i}/\sqrt{a_0} \rightarrow e^{-ik_F x} L_\alpha(x) + e^{ik_F x} R_\alpha(x)$ . One thus obtains the identification:

$$S_i^A/a_0 \rightarrow J_R^A + J_L^A + e^{i2k_F x} L_\alpha^\dagger T_{\alpha\beta}^A R_\beta + H.c., \quad (C3)$$

where  $J_L^A = L_\alpha^\dagger T_{\alpha\beta}^A L_\beta$  is the left  $SU(N)_1$  current with a similar definition for the right one. The  $2k_F$   $SU(N)$  spin density  $N^A$  of Eq. (19) is thus:  $N^A = \langle L_\alpha^\dagger T_{\alpha\beta}^A R_\beta \rangle_c$ , the average being over the fully gapped charge mode. We then introduce  $N$  left-right moving bosons  $\varphi_{\alpha L,R}$  to bosonize the Dirac fermions<sup>2,46</sup>:

$$L_\alpha = \frac{\kappa_\alpha}{\sqrt{2\pi a_0}} e^{-i\sqrt{4\pi}\varphi_{\alpha L}}, \quad R_\alpha = \frac{\kappa_\alpha}{\sqrt{2\pi a_0}} e^{i\sqrt{4\pi}\varphi_{\alpha R}}, \quad (C4)$$

where  $[\varphi_{\alpha R}, \varphi_{\beta L}] = i\delta_{\alpha\beta}/4$  and  $\kappa_\alpha$  are Klein factors to insure the anticommutation of fermions with different colors:  $\{\kappa_\alpha, \kappa_\beta\} = 2\delta_{\alpha\beta}$ ,  $\kappa_\alpha^\dagger = \kappa_\alpha$ . The  $2k_F$   $SU(N)$  spin density can thus be expressed in terms of these bosonic fields:

$$N^A = \frac{\kappa_\alpha \kappa_\beta i^{\delta_{\alpha\beta}}}{2\pi a_0} T_{\alpha\beta}^A \langle e^{i\sqrt{4\pi}\varphi_{\alpha L} + i\sqrt{4\pi}\varphi_{\beta R}} \rangle_c. \quad (C5)$$

The next step of the approach is to switch to a new basis where the charge degrees of freedom are single out to perform the average in Eq. (C5). In this respect, we introduce a charge bosonic field  $\Phi_c$  and  $N-1$  spin fields  $\Phi_{sm}$ ,  $m=1, \dots, N-1$  through:<sup>56</sup>

$$\begin{aligned} \Phi_{cR,L} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha=1}^N \varphi_{\alpha R,L} \\ \Phi_{smR,L} &= \frac{1}{\sqrt{m(m+1)}} \left( \sum_{p=1}^m \varphi_{pR,L} - m\varphi_{m+1R,L} \right) \end{aligned} \quad (C6)$$

the inverse transformation can be written in a compact way as:

$$\begin{aligned} \varphi_{\alpha R,L} &= \frac{\Phi_{cR,L}}{\sqrt{N}} + \sum_{m=1}^{N-1} \omega_\alpha^m \Phi_{smR,L} \\ &= \frac{\Phi_{cR,L}}{\sqrt{N}} + \vec{\omega}_\alpha \cdot \vec{\Phi}_{sR,L}, \end{aligned} \quad (C7)$$

where  $\vec{\omega}_\alpha$  are  $N-1$ -dimensional weight vectors of the fundamental representation of the  $SU(N)$  group which satisfy simple relations:

$$\sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha^m = 0, \quad (C8a)$$

$$\sum_{\alpha=1}^N \omega_\alpha^m \omega_\alpha^{m'} = \delta_{mm'}, \quad (C8b)$$

$$\sum_{m=1}^{N-1} \omega_\alpha^m \omega_\beta^m = \delta_{\alpha\beta} - \frac{1}{N}. \quad (C8c)$$

For instance, in the  $N=3$  case we have:

$$\begin{aligned} \vec{\omega}_1 &= \left( \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) \\ \vec{\omega}_2 &= \left( -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) \\ \vec{\omega}_3 &= \left( 0, -\sqrt{\frac{2}{3}} \right). \end{aligned} \quad (C9)$$

The Hamiltonian of the Sutherland model in the far infrared regime neglecting the marginal irrelevant current-current interaction takes then a simple form in terms of these spin bosonic fields:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{Sutherland}} &= v \int dx \sum_{m=1}^{N-1} \left( (\partial_x \Phi_{smL})^2 + (\partial_x \Phi_{smR})^2 \right) \\ &= v \int dx \left( (\partial_x \vec{\Phi}_{sL})^2 + (\partial_x \vec{\Phi}_{sR})^2 \right). \end{aligned} \quad (C10)$$

A free-field representation of the  $2k_F$   $SU(N)$  spin density can also be obtained from the identity (19):  $N^A = i\lambda \text{Tr}(gT^A)$ :

$$\lambda = \frac{\sqrt{N}}{2\pi a_0^{1/N}} \langle e^{i\sqrt{4\pi/N}\Phi_c} \rangle \quad (C11a)$$

$$g_{\beta\alpha} = \frac{\kappa_\alpha \kappa_\beta i^{\delta_{\alpha\beta}-1}}{\sqrt{N}} : e^{i\sqrt{4\pi}\vec{\omega}_\alpha \cdot \vec{\Phi}_{sL} + i\sqrt{4\pi}\vec{\omega}_\beta \cdot \vec{\Phi}_{sR}} : , \quad (C11b)$$

where  $\Phi_c = \Phi_{cR} + \Phi_{cL}$  is the total charge boson field. A more rigorous free-field representation of the  $SU(N)_1$  WZNW  $g$  primary field was obtained in Ref.67 (see Appendix B) where the Klein factors were constructed out of the zero mode operators of the spin bosonic fields. We now check that  $g$  has the correct two-point function since it is a primary field with scaling dimension  $1-1/N$ :

$$\begin{aligned} \langle g_{\alpha\gamma}^\dagger(z, \bar{z}) g_{\gamma\beta}(w, \bar{w}) \rangle &= \frac{1}{N} \sum_\gamma (-i)^{\delta_{\alpha\gamma}} i^{\delta_{\beta\gamma}} \kappa_\gamma \kappa_\alpha \kappa_\beta \kappa_\gamma \\ &e^{i\pi/2(\vec{\omega}_\beta \cdot \vec{\omega}_\gamma - \vec{\omega}_\alpha \cdot \vec{\omega}_\gamma)} \langle : e^{-i\sqrt{4\pi}\vec{\omega}_\gamma \cdot \vec{\Phi}_{sR}(\bar{z})} : : e^{i\sqrt{4\pi}\vec{\omega}_\gamma \cdot \vec{\Phi}_{sR}(\bar{w})} : \rangle \\ &\langle : e^{-i\sqrt{4\pi}\vec{\omega}_\alpha \cdot \vec{\Phi}_{sL}(z)} : : e^{i\sqrt{4\pi}\vec{\omega}_\beta \cdot \vec{\Phi}_{sL}(w)} : \rangle = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{|z-w|^{2(1-1/N)}}, \end{aligned} \quad (C12)$$

as it should be.

We now turn to the value of the non-universal constant  $\lambda$  in Eq. (C11) which stems from the average of the fully gapped degrees of freedom. In this respect, we need to determine the umklapp term which gives rise the mass gap for the charge field  $\Phi_c$ . As discussed in Ref.56, when  $N \geq 2$ , this term is generated by higher orders in perturbation theory. In the weak-coupling regime, the Hubbard Hamiltonian (C1) has the following Fourier decomposition:

$$\mathcal{H}_{\text{Hubbard}} \simeq \mathcal{H}_{q=0} + \mathcal{H}_{q=\pm 2k_F} + \mathcal{H}_{q=\pm 4k_F} + \dots \quad (C13)$$

since  $k_F = \pi/(Na_0)$ , an Umklapp term with  $2Nk_F$  becomes a uniform contribution which can open a gap in the charge sector. The Umklapp operator which is an  $SU(N)$  singlet and translation invariant with the lowest scaling dimension is:

$$\prod_{\alpha=1}^N L_\alpha^\dagger R_\alpha + H.c. \quad (C14)$$

Its generation depends on the parity of  $N$ . When  $N=2p$ , the operator (C14) appears from  $p-1$  operator product expansions (OPE) between two  $\mathcal{H}_{q=\pm 4k_F}$  terms so that:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{umklapp}}^{N=2p} &\sim (-1)^{p-1} U^{N/2} \prod_{\alpha=1}^N L_\alpha^\dagger R_\alpha + H.c. \\ &\sim -U^{N/2} \cos\left(\sqrt{4\pi N}\Phi_c\right), \end{aligned} \quad (C15)$$

where we have used the identification (C4) and the definition (C6) of the charge field  $\Phi_c$ . The sine-Gordon potential (C15) leads us to conclude that the charge field is locked on configurations such that  $\langle \Phi_c \rangle = k\sqrt{\pi/N}$  ( $k$  being integer) and thus  $\lambda$  is real. When  $N = 2p + 1$  is odd, we need  $p - 1$  OPE between two  $\mathcal{H}_{q=\pm 4k_F}$  terms and then a last OPE with  $\mathcal{H}_{q=\pm 2k_F}$  to produce the Umklapp term (C14). We find thus

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{umklapp}}^{N=2p+1} &\sim (-1)^p i U^{p+1} \prod_{\alpha=1}^N L_{\alpha}^{\dagger} R_{\alpha} + H.c. \\ &\sim -U^{p+1} \cos\left(\sqrt{4\pi N}\Phi_c\right), \end{aligned} \quad (\text{C16})$$

from which we conclude as in the even  $N$  case that  $\lambda$  is real.

#### APPENDIX D: IDENTIFICATION OF FIELDS FROM THE CONFORMAL EMBEDDING

In this Appendix, we justify the identifications (30, 34) of the fields from the conformal embedding (25).

We first present our normalization for the  $SU(N)_1$  current which is defined by the following operator product expansion (OPE):

$$J_L^A(z) J_L^B(0) \sim \frac{\delta^{AB}}{8\pi^2 z^2} + \frac{if^{ABC} J_L^C(0)}{2\pi z}, \quad (\text{D1})$$

where  $f^{ABC}$  is the structure constants of the  $SU(N)$  Lie algebra:  $[T^A, T^B] = if^{ABC} T^C$ . The holomorphic stress-energy tensors of two decoupled  $SU(N)_1$  CFTs read then as follows in terms of their currents:

$$\begin{aligned} T_{SU(N)_1 \times SU(N)_1} &= T_{SU(N)_1} + T_{SU(N)_1} \\ &= \frac{4\pi^2}{N+1} \sum_{l=1}^2 : J_{lL}^A J_{lL}^A :, \end{aligned} \quad (\text{D2})$$

while the  $SU(N)_2$  one is in terms of the diagonal current  $I_L^A = J_{1L}^A + J_{2L}^A$ :

$$T_{SU(N)_2} = \frac{4\pi^2}{N+2} : I_L^A I_L^A :. \quad (\text{D3})$$

From the coset construction of the embedding (25), we deduce the stress-energy tensor of the  $\mathbb{Z}_N$  parafermionic CFT:

$$\begin{aligned} T_{\mathbb{Z}_N} &= \frac{4\pi^2}{(N+1)(N+2)} \left( \sum_{l=1}^2 : J_{lL}^A J_{lL}^A : \right. \\ &\quad \left. - 2(N+1) : J_{1L}^A J_{2L}^A : \right). \end{aligned} \quad (\text{D4})$$

We now introduce two operators written in terms of the WZNW fields of the  $SU(N)_1 \times SU(N)_1$  CFT

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_1 &= \text{Tr} g_1 \text{Tr} g_2 + \text{Tr}(g_1 g_2) \\ \mathcal{O}_2 &= \text{Tr} g_1 \text{Tr} g_2 - \text{Tr}(g_1 g_2). \end{aligned} \quad (\text{D5})$$

In this Appendix, we show that  $\mathcal{O}_1$  does not depend on the  $\mathbb{Z}_N$  degrees of freedom and is the primary field of the  $SU(N)_2$  CFT  $\Phi_S$  with holomorphic weight  $h = (N-1)/N$ :

$$\begin{aligned} T_{SU(N)_2}(z) \mathcal{O}_1(0,0) &\sim \frac{N-1}{Nz^2} \mathcal{O}_1(0,0) + \frac{1}{z} \partial \mathcal{O}_1(0,0) \\ T_{\mathbb{Z}_N}(z) \mathcal{O}_1(0,0) &\sim 0. \end{aligned} \quad (\text{D6})$$

In contrast, we show that the operator  $\mathcal{O}_2$  is a primary field of the  $\mathbb{Z}_N \times SU(N)_2$  CFT:

$$\begin{aligned} (T_{SU(N)_2} + T_{\mathbb{Z}_N})(z) \mathcal{O}_2(0,0) &\sim \frac{N-1}{Nz^2} \mathcal{O}_2(0,0) \\ &\quad + \frac{1}{z} \partial \mathcal{O}_2(0,0), \end{aligned} \quad (\text{D7})$$

with holomorphic weight  $h = h_{\epsilon_1} + h_A = 2/(N+2) + (N+1)(N-2)/N(N+2) = (N-1)/N$ .

### 1. Preliminaries

We first recall the defining OPE of the  $SU(N)_1$  WZNW  $g$  field:<sup>61</sup>

$$J_L^A(z) g_{\alpha\beta}(0,0) \sim -\frac{1}{2\pi z} T_{\alpha\gamma}^A g_{\gamma\beta}(0,0), \quad (\text{D8})$$

$T^A$  being the generator which transforms in the fundamental representation of the  $SU(N)$  group. We need the subleading contribution of the OPE (D8) to establish the relations (D6, D7). In this respect, let us show that for an  $SU(N)_1$  CFT, we have:

$$J_L^A(z) g_{\alpha\beta}(0,0) \sim -\frac{1}{2\pi z} T_{\alpha\gamma}^A g_{\gamma\beta}(0,0) + \frac{C}{2\pi} T_{\alpha\gamma}^A \partial g_{\gamma\beta}(0,0) \quad (\text{D9})$$

with  $C = -N/(N-1)$ . From Eq. (D9), we get:

$$\begin{aligned} g_{\alpha\beta}(x, \bar{w}) J_L^A(w) &\sim -\frac{1}{2\pi(w-x)} T_{\alpha\gamma}^A g_{\gamma\beta}(x, \bar{w}) \\ &\quad + \frac{C}{2\pi} T_{\alpha\gamma}^A \partial g_{\gamma\beta}(w, \bar{w}) \\ &\sim \frac{1}{2\pi(x-w)} T_{\alpha\gamma}^A g_{\gamma\beta}(w, \bar{w}) \\ &\quad + \frac{(C+1)}{2\pi} T_{\alpha\gamma}^A \partial g_{\gamma\beta}(w, \bar{w}). \end{aligned} \quad (\text{D10})$$

We then consider the following OPE:

$$\begin{aligned} \overline{g_{\alpha\beta}(z, \bar{w})} : J_L^A J_L^A : (w) &= \frac{1}{2\pi i} \oint_w \frac{dx}{x-w} \left[ \overline{g_{\alpha\beta}(z, \bar{w})} J_L^A(x) \right. \\ &\quad \left. \times J_L^A(w) + J_L^A(x) \overline{g_{\alpha\beta}(z, \bar{w})} J_L^A(w) \right] \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_w \frac{dx}{x-w} \left[ \frac{1}{2\pi(z-x)} T_{\alpha\gamma}^A g_{\gamma\beta}(x, \bar{w}) J_L^A(w) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2\pi(z-w)} J_L^A(x) T_{\alpha\gamma}^A g_{\gamma\beta}(w, \bar{w}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{D11})$$

By using the results (D9,D10), we deduce:

$$g_{\alpha\beta}(z, \bar{w}) : J_L^A J_L^A : (w) \sim \frac{N^2 - 1}{8\pi^2 N (z-w)^2} g_{\alpha\beta}(w, \bar{w}) + \frac{N^2 - 1}{4\pi^2 N} \frac{C + 1/2}{z-w} \partial g_{\alpha\beta}(w, \bar{w}), \quad (\text{D12})$$

and thus

$$g_{\alpha\beta}(z, \bar{w}) T_{SU(N)_1}(w) \sim \frac{N-1}{2N(z-w)^2} g_{\alpha\beta}(w, \bar{w}) + \frac{N-1}{N} \frac{C + 1/2}{z-w} \partial g_{\alpha\beta}(w, \bar{w}), \quad (\text{D13})$$

Finally, we find

$$T_{SU(N)_1}(z) g_{\alpha\beta}(w, \bar{w}) \sim \frac{N-1}{2N(z-w)^2} g_{\alpha\beta}(w, \bar{w}) - \frac{N-1}{N} \frac{C}{z-w} \partial g_{\alpha\beta}(w, \bar{w}), \quad (\text{D14})$$

so that since  $g_{\alpha\beta}$  is an  $SU(N)_1$  primary field with holomorphic weight  $h = (N-1)/2N$ , we obtain  $C = -N/(N-1)$ .

## 2. Identifications of $\mathcal{O}_{1,2}$ operators

We are now in position to show the identities (D6, D7). Using the fact that  $g_l$  is an  $SU(N)_1$  primary field with holomorphic weight  $h = (N-1)/2N$ , we have

$$4\pi^2 \sum_{l=1}^2 : J_{lL}^A J_{lL}^A : (z) \mathcal{O}_{1,2}(0,0) \sim \frac{N^2 - 1}{Nz^2} \mathcal{O}_{1,2}(0,0) + \frac{N+1}{z} \partial \mathcal{O}_{1,2}(0,0), \quad (\text{D15})$$

We need also the following OPEs which can be deduced from the result (D9):

$$4\pi^2 J_{1L}^A J_{2L}^A : (z) \mathcal{O}_1(0,0) \sim \frac{N-1}{2Nz^2} \mathcal{O}_1(0,0) + \frac{1}{2z} \partial \mathcal{O}_1(0,0) \\ 4\pi^2 J_{1L}^A J_{2L}^A : (z) \mathcal{O}_2(0,0) \sim -\frac{N+1}{2Nz^2} \mathcal{O}_2(0,0) - \frac{N+1}{2(N-1)z} \partial \mathcal{O}_2(0,0), \quad (\text{D16})$$

It is now straightforward to check that the  $\mathcal{O}_1$  field satisfies the OPEs (D6) which means that it is a singlet under the  $\mathbb{Z}_N$  CFT and an  $SU(N)_2$  primary field with scaling dimension  $\Delta_S = 2(N-1)/N$ . It means that  $\mathcal{O}_1$  field identifies with the  $SU(N)_2$  primary field  $\Phi_S$  which transforms in the  $\square$  representation of  $SU(N)$ :

$$\mathcal{O}_1 = \text{Tr} g_1 \text{Tr} g_2 + \text{Tr}(g_1 g_2) \sim \text{Tr} \Phi_S. \quad (\text{D17})$$

$\mathcal{O}_2$  field satisfies the following OPEs:

$$T_{SU(N)_2}(z) \mathcal{O}_2(0,0) \sim \frac{(N+1)(N-2)}{N(N+2)z^2} \mathcal{O}_2(0,0) + \frac{(N+1)(N-2)}{(N-1)(N+2)z} \partial \mathcal{O}_2(0,0) \\ T_{\mathbb{Z}_N}(z) \mathcal{O}_2(0,0) \sim \frac{2}{(N+2)z^2} \mathcal{O}_2(0,0) + \frac{2N}{(N-1)(N+2)z} \partial \mathcal{O}_2(0,0). \quad (\text{D18})$$

We thus deduce that the  $\mathcal{O}_2$  field satisfies the OPEs (D7) and is a primary field of the  $\mathbb{Z}_N \times SU(N)_2$  CFT with holomorphic weight  $h = h_{\epsilon_1} + h_A = (N-1)/N$ . One then obtains:

$$\mathcal{O}_2 = \text{Tr} g_1 \text{Tr} g_2 - \text{Tr}(g_1 g_2) \sim \epsilon_1 \text{Tr} \Phi_A. \quad (\text{D19})$$

## 3. Identification of the wrong-current term

We now investigate the identification of the wrong-current contribution  $K_R^A K_L^A = (J_{1R}^A - J_{2R}^A)(J_{1L}^A - J_{2L}^A)$  in terms of the fields of the  $\mathbb{Z}_N \times SU(N)_2$  CFT. Using the Kac-Moody algebra (D1), one finds

$$(T_{SU(N)_2} + T_{\mathbb{Z}_N})(z) K_R^A K_L^A(0,0) \sim \frac{K_R^A K_L^A(0,0)}{z^2} + \frac{\partial (K_R^A K_L^A)(0,0)}{z}, \quad (\text{D20})$$

which means that  $K_R^A K_L^A$  is a primary field of the  $\mathbb{Z}_N \times SU(N)_2$  CFT with holomorphic weight  $h = 1 = 2/(N+2) + N/(N+2) = h_{\epsilon_1} + h_{\text{adj}}$ . We thus obtain the identification of the wrong-current contribution:

$$K_R^A K_L^A \sim -\epsilon_1 \text{Tr} \Phi_{\text{adj}}. \quad (\text{D21})$$

The minus sign in the latter expression is beyond of the preceding approach. However, we can justify it in the simplest  $N = 2$  case by a direct free-field representation in terms of four Majorana fermions since  $SU(2)_2 \sim SO(3)_1^{2,61}$  so that the conformal embedding (25) becomes:  $SU(2)_1 \times SU(2)_1 \sim \mathbb{Z}_2 \times SO(3)_1$ . The identification of the fields in Eq. (D21) requires some care. In this respect, we start with a free-field representation of the two  $SU(2)_1$  currents in terms of two independent chiral bosonic fields  $\varphi_{lR,L}$  ( $l = 1, 2$ ):

$$J_{lR,L}^+ = \frac{1}{2\pi} : \exp(\mp i \sqrt{8\pi} \varphi_{lR,L}) : \\ J_{lR,L}^- = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \partial_x \varphi_{lR,L}, \quad (\text{D22})$$

where we are working with the prescription:  $[\varphi_{nR}, \varphi_{mL}] = i\delta_{nm}/4$  and the bosonic fields are normalized by the following OPE:

$$\varphi_{nL}(z) \varphi_{mL}(\omega) \sim -\frac{\delta_{nm}}{4\pi} \ln(z - \omega), \\ \varphi_{nR}(\bar{z}) \varphi_{mR}(\bar{\omega}) \sim -\frac{\delta_{nm}}{4\pi} \ln(\bar{z} - \bar{\omega}). \quad (\text{D23})$$

Eqs. (D22) give a free-boson representation of the  $SU(2)_1$  currents that satisfy the  $SU(2)_1$  Kac-Moody algebra defined by the OPE (D1) with  $N = 2$ . The  $SU(2)_1$  WNZW fields  $g_{1,2}$  can also be expressed in terms of these bosons through

$$g_l = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} : e^{-i\sqrt{2\pi}\varphi_l} : & i : e^{-i\sqrt{2\pi}\vartheta_l} : \\ i : e^{i\sqrt{2\pi}\vartheta_l} : & : e^{i\sqrt{2\pi}\varphi_l} : \end{pmatrix}, \quad (\text{D24})$$

where we have introduced the total bosonic field  $\varphi_l$  and its dual field  $\vartheta_l$ :

$$\begin{aligned} \varphi_l &= \varphi_{lL} + \varphi_{lR}, \\ \vartheta_l &= \varphi_{lL} - \varphi_{lR}. \end{aligned} \quad (\text{D25})$$

One can check that this bosonic representation reproduces the defining OPE (D8) for the  $SU(2)_1$  WNZW field. The operators  $\mathcal{O}_{1,2}$  acquire thus a simple bosonic expression by introducing symmetric and antisymmetric combination of the bosonic fields:  $\Phi_{\pm} = (\varphi_1 \pm \varphi_2)/\sqrt{2}$  and their dual fields  $\Theta_{\pm}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_1 &= 2 \cos(\sqrt{4\pi}\Phi_+) + \cos(\sqrt{4\pi}\Phi_-) - \cos(\sqrt{4\pi}\Theta_-) \\ \mathcal{O}_2 &= \cos(\sqrt{4\pi}\Phi_-) + \cos(\sqrt{4\pi}\Theta_-). \end{aligned} \quad (\text{D26})$$

The next step of the approach is to introduce four Majorana fermions  $\xi_{R,L}^a$ ,  $a = 0, \dots, 3$  as in Ref.7 to reformionize  $\mathcal{O}_{1,2}$ :

$$\begin{aligned} \xi_{R,L}^2 + i\xi_{R,L}^1 &= \frac{\kappa_1}{\sqrt{\pi}} : e^{\pm i\sqrt{4\pi}\Phi_{+R,L}} : \\ \xi_{R,L}^3 + i\xi_{R,L}^0 &= \frac{\kappa_2}{\sqrt{\pi}} : e^{\pm i\sqrt{4\pi}\Phi_{-R,L}} :, \end{aligned} \quad (\text{D27})$$

where  $\{\kappa_l, \kappa_m\} = 2\delta_{lm}$  and  $\kappa_l^\dagger = \kappa_l$  to keep track of the anti-commuting nature of the fermions. From the correspondence (D27), one finds that  $\mathcal{O}_{1,2}$  are mass-terms of the Majorana fermions:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_1 &= 2i\pi \sum_{a=1}^3 \xi_{RSL}^a \xi_{RSL}^a \\ \mathcal{O}_2 &= 2i\pi \xi_{RSL}^0 \xi_{RSL}^0. \end{aligned} \quad (\text{D28})$$

Since we have  $\Phi_S = \Phi_{\text{adj}}$  for  $SU(2)_2$ , one finally gets from the results (D17, D19):

$$\begin{aligned} \text{Tr}\Phi_{\text{adj}} &= 2i\pi \sum_{a=1}^3 \xi_{RSL}^a \xi_{RSL}^a \\ \epsilon_1 &= 2i\pi \xi_{RSL}^0 \xi_{RSL}^0. \end{aligned} \quad (\text{D29})$$

Now by using the free-field representation (D22) and the definition (D27), the left wrong current  $\vec{K}_{R,L} = \vec{J}_{1R,L} - \vec{J}_{2R,L}$  can be expressed directly in terms of the Majorana fermions:  $\vec{K}_{R,L} = -i\xi_{R,L}^0 \vec{\xi}_{R,L}$  and thus:

$$\vec{K}_R \cdot \vec{K}_L \sim -\epsilon_1 \text{Tr}\Phi_{\text{adj}}. \quad (\text{D30})$$

- 
- <sup>1</sup> E. Dagotto and T. M. Rice, *Science* **271**, 618 (1996).  
<sup>2</sup> A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, and A. M. Tsvelik, *Bosonization and Strongly Correlated Systems* (Cambridge university press, UK, 1998).  
<sup>3</sup> T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension* (Clarendon press, Oxford, UK, 2004).  
<sup>4</sup> L. D. Faddeev and L. A. Takhtajan, *Phys. Lett.* **85A**, 375 (1981).  
<sup>5</sup> M. Mourigal, M. Enderle, A. Klopfferpieper, J.-S. Caux, A. Stunault, and H. M. Ronnow, *Nat. Phys.* **9**, 435 (2013).  
<sup>6</sup> B. Lake, A. M. Tsvelik, S. Notbohm, D. A. Tennant, T. G. Perring, M. Reehuis, C. Sekar, G. Krabbes, and B. Büchner, *Nat. Phys.* **6**, 50 (2010).  
<sup>7</sup> D. Shelton, A. A. Nersesyan, and A. M. Tsvelik, *Phys. Rev. B* **53**, 8521 (1996).  
<sup>8</sup> J. Sólyom and J. Timonen, *Phys. Rev. B* **34**, 487 (1986).  
<sup>9</sup> Y. Xiang, *Phys. Rev. B* **52**, 12 485 (1995).  
<sup>10</sup> S. R. White, *Phys. Rev. B* **53**, 52 (1996).  
<sup>11</sup> E. H. Kim, G. Fáth, J. Sólyom, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **62**, 14 965 (2000).  
<sup>12</sup> D. Allen, F. H. Essler, and A. A. Nersesyan, *Phys. Rev. B* **61**, 8871 (2000).  
<sup>13</sup> L. Balents and O. A. Starykh, *Phys. Rev. Lett* **93**, 127202 (2004).  
<sup>14</sup> E. H. Kim, O. Legeza, and J. Sólyom, *Phys. Rev. B* **77**, 205121 (2008).  
<sup>15</sup> A. A. Nersesyan and A. M. Tsvelik, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3939

- (1997).  
<sup>16</sup> A. Läuchli, G. Schmid, and M. Troyer, *Phys. Rev. B* **67**, 100409(R) (2003).  
<sup>17</sup> T. Momoi, T. Hikihara, M. Nakamura, and X. Hu, *Phys. Rev. B* **67**, 174410 (2003).  
<sup>18</sup> V. Gritsev, B. Normand, and D. Baeriswyl, *Phys. Rev. B* **69**, 094431 (2004).  
<sup>19</sup> P. Lecheminant and K. Totsuka, *Phys. Rev. B* **74**, 224426 (2006).  
<sup>20</sup> S.R. White and I. Affleck, *Phys. Rev. B* **54**, 9862 (1996).  
<sup>21</sup> D. Allen and D. Sénéchal, *Phys. Rev. B* **55**, 299 (1997).  
<sup>22</sup> A. A. Nersesyan, A. O. Gogolin, and F. H. Essler, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 910 (1998).  
<sup>23</sup> F. D. M. Haldane, *Phys. Lett. A* **93**, 464 (1983); *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).  
<sup>24</sup> Z. C. Gu and X. G. Wen, *Phys. Rev. B* **80**, 155131 (2009).  
<sup>25</sup> F. Pollmann, E. Berg, A. M. Turner, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. B* **85**, 075125 (2012).  
<sup>26</sup> P. Lecheminant and E. Orignac, *Phys. Rev. B* **65**, 174406 (2002).  
<sup>27</sup> F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. B* **81**, 064439 (2010).  
<sup>28</sup> X. Chen, Z.-C. Gu, and X.-G. Wen, *Phys. Rev. B* **83**, 035107 (2011); *Phys. Rev. B* **84**, 235128 (2011).  
<sup>29</sup> N. Schuch, D. Perez-Garcia, and I. Cirac, *Phys. Rev. B* **84**, 165139 (2011).  
<sup>30</sup> L. Fidkowski and A. Kitaev, *Phys. Rev. B* **83**, 075103 (2011).

- <sup>31</sup> K. Duivendoorn and T. Quella, *Phys. Rev. B* **87**, 125145 (2013).
- <sup>32</sup> D.V. Else, S.D. Bartlett, and A.C. Doherty, *Phys. Rev. B* **88**, 085114 (2013).
- <sup>33</sup> S. Rachel, D. Schruricht, B. Scharfenberger, R. Thomale, and M. Greiter, *J. Phys.: Conf. Ser.* **200**, 022049 (2010).
- <sup>34</sup> T. Morimoto, H. Ueda, T. Momoi, and A. Furusaki, *Phys. Rev. B* **90**, 235111 (2014).
- <sup>35</sup> H. Katsura, T. Hirano, and V. E. Korepin, *J. Phys. A* **41**, 135304 (2008).
- <sup>36</sup> I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, *Commun. Math. Phys.* **115**, 477 (1988).
- <sup>37</sup> A. Roy and T. Quella, arXiv:1512.05229.
- <sup>38</sup> P. Fromholz, S. Capponi, P. Lecheminant, D. J. Papoular and K. Totsuka, arXiv:1709.10409.
- <sup>39</sup> D.-S. Wang, I. Affleck, and R. Raussendorf, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 200503 (2018).
- <sup>40</sup> M. van den Bossche, P. Azaria, P. Lecheminant, and F. Mila, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4124 (2001).
- <sup>41</sup> P. Lecheminant and A. M. Tsvelik, *Phys. Rev. B* **91**, 174407 (2015).
- <sup>42</sup> A. Weichselbaum, S. Capponi, A. Läuchli, P. Lecheminant, and A. M. Tsvelik, to appear.
- <sup>43</sup> B. Sutherland, *Phys. Rev. B* **12**, 3795 (1975).
- <sup>44</sup> I. Affleck, *Nucl. Phys. B* **265**, 409 (1986).
- <sup>45</sup> I. Affleck, *Nucl. Phys. B* **305**, 582 (1988).
- <sup>46</sup> A. J. A. James, R. M. Konik, P. Lecheminant, N. J. Robinson, and A. M. Tsvelik, arXiv: 1703.08421.
- <sup>47</sup> S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992); *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993); U. Schollwöck, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 259 (2005).
- <sup>48</sup> P. Fromholz, S. Capponi, P. Lecheminant, D. Papoular, and K. Totsuka, to appear.
- <sup>49</sup> H. Nonne, M. Moliner, S. Capponi, P. Lecheminant, and K. Totsuka, *EPL* **102**, 37008 (2013).
- <sup>50</sup> V. Bois, S. Capponi, P. Lecheminant, M. Moliner, and K. Totsuka, *Phys. Rev. B* **91**, 075121 (2015).
- <sup>51</sup> J. Timonen and A. Luther, *J. of Phys. C: Solid State Physics*, **18**, 1439–1454 (1985).
- <sup>52</sup> H.J. Schulz, *Phys. Rev. B*, **34**, 6372–6385 (1986).
- <sup>53</sup> Y. Xian, *Phys. Rev. B*, **52**, 12485–12488 (1995).
- <sup>54</sup> S. Capponi, P. Lecheminant, and K. Totsuka, *Ann. Phys.* **367**, 50 (2016).
- <sup>55</sup> C. Itoi and M.-H. Kato, *Phys. Rev. B* **55**, 8295 (1997).
- <sup>56</sup> R. Assaraf, P. Azaria, M. Caffarel, and P. Lecheminant, *Phys. Rev. B* **60**, 2299 (1999).
- <sup>57</sup> S. R. Manmana, K. R. A. Hazzard, G. Chen, A. E. Feiguin, and A. M. Rey, *Phys. Rev. A* **84**, 043601 (2011).
- <sup>58</sup> T. Hikihara and O. A. Starykh, *Phys. Rev. B* **81**, 064432 (2010).
- <sup>59</sup> A. B. Zamolodchikov and V. A. Fateev, *Sov. Phys. JETP* **62**, 215 (1985).
- <sup>60</sup> P. Griffin and D. Nemeschansky, *Nucl. Phys. B* **323**, 545 (1989).
- <sup>61</sup> P. Di Francesco, P. Mathieu, and D. Sénéchal, *Conformal Field Theory* (Springer, Berlin, 1997).
- <sup>62</sup> I. Affleck, M. Oshikawa, and H. Saleur, *J. Phys. A* **34**, 1073 (2001).
- <sup>63</sup> V. G. Knizhnik and A. B. Zamolodchikov, *Nucl. Phys. B* **247**, 83 (1984).
- <sup>64</sup> V. A. Fateev, *Int. J. Mod. Phys. A* **6**, 2109 (1991).
- <sup>65</sup> M. N. Barber and M. T. Batchelor, *Phys. Rev. B* **40**, 4621 (1989).
- <sup>66</sup> I. Affleck, *J. Phys.:Condens. Matter* **2**, 405 (1990).
- <sup>67</sup> Y. Fuji and P. Lecheminant, *Phys. Rev. B* **95**, 125130 (2017).



# Conclusion

Il est donc possible de trouver la phase de Haldane et ses généralisations en utilisant un système expérimental modélisé par le modèle de double-puits unidimensionnel. Plus particulièrement, le Chap. 1 a permis de caractériser la phase de Haldane et de concevoir ses généralisations qui doivent apparaître pour des chaînes de Heisenberg antiferromagnétiques dans une représentation linéaire de  $SU(N)$ . L'obtention de telles chaînes est difficile en utilisant directement des bosons ou des fermions mais devient en principe plus aisée en partant d'un système décrit par un modèle d'échelle.

Il est possible d'implémenter la symétrie  $SU(N)$  en utilisant des alcalino-terreux (ou assimilés) ultra-froids comme le précise le Chap. 2. En fonction de l'espèce utilisée, plusieurs valeurs de  $N$  peuvent être atteintes. Le chapitre décrit également trois méthodes pour implémenter un modèle d'échelle en utilisant ces fermions et dont le plus prometteur est le modèle double-puits (au demi-remplissage).

C'est ce modèle qui est étudié dans le régime couplage faible du Chap. 3, i.e. lorsque les interactions entre atomes sont moins importantes que l'effet tunnel entre sites du réseau. Cette étude, qui utilise abondamment des outils de théorie des champs conformes perturbés et de bosonisation, permet de tracer des premiers diagrammes de phases (un pour chaque  $N$ ), valides pour ce régime particulier des paramètres du modèle. Malheureusement, aucune des phases qui y figure n'est une phase topologique. Ces diagrammes sont cependant compatibles avec les résultats obtenus par une méthode numérique, le *Density Matrix Renormalisation Group* qui peut, en plus, explorer le régime où les interactions sont plus importantes. C'est dans ce régime que des signatures de phases topologiques protégées par la symétrie de type Haldane sont présentes.

C'est donc naturellement ce même régime de couplage fort qui est étudié dans le Chap. 4. En partant de la limite atomique perturbée par des termes tunnel, il est à nouveau possible de tracer des diagrammes, mais dans ce nouveau régime de paramètres. Ces diagrammes sont eux aussi compatibles avec les résultats numériques et font apparaître les phases topologiques attendues. Additionnellement, il est possible de dériver le hamiltonien effectif descriptif de ces phases, et le modèle de Heisenberg antiferromagnétique dans certaines "vraies" représentations de  $SU(N)$  en chaque site apparaît sans surprise dans le cas des  $N$  pairs. À terme, ce résultat est aussi valable pour  $N = 3$  (et vraisemblablement tous les  $N$  impairs), mais moins



## Conclusion

---

directement, et avec une importance cruciale du degré de liberté orbital.

Plus précisément, le hamiltonien effectif est alors celui d'un modèle d'échelle de spin dont une chaîne est dans la représentation fondamentale de  $SU(N)$  et l'autre, dans sa représentation conjuguée. Ce modèle, et ses généralisations, sont étudiés dans leur ensemble Chap. 5. Son diagramme de phase fait justement apparaître la phase topologique, dite chirale Haldane, dans la région atteinte (de manière effective) par le modèle de double-puits.

Cette étude dans sa totalité est une étape indispensable pour obtenir un jour des réalisations expérimentales de ces phases de Haldane et pouvoir ainsi mieux les étudier (en temps que représentantes des phases topologiques protégées par la symétrie) voire les utiliser à d'autres fins, comme en informatique quantique [276]. Elle ne peut cependant pas être considérée comme terminée tant que l'expérience réaliste qu'elle propose n'est pas implémentée et que les phases de Haldane ne sont pas observées. La direction principale sur laquelle prolonger la réflexion consisterait à raffiner le protocole expérimental pour stabiliser davantage ces phases en plus de les rendre plus facilement accessibles.

De nombreuses autres directions d'études sont également disponibles comme la meilleure caractérisation des transitions de phases topologiques, entre une phase topologiquement triviale et une phase topologique d'une part, mais également entre deux phases topologiques d'autre part ! Certaines autres phases, même si elles ne sont pas topologiques restent intéressantes, l'exemple souvent cité est le cas des phases supraconductrices qui apparaissent régulièrement dans des modèles proches du double-puits mais dans le cas incommensurable [237]. Ces modèles sont pertinents pour décrire des systèmes unidimensionnels ou quasi-unidimensionnels "réels" tels que des nanotubes de carbone [277].

Le cadre de ces études ne s'arrête pas non plus au cas unidimensionnel, puisque la symétrie  $SU(N)$  peut également servir de base pour la construction d'une dimension synthétique [278]. C'est une implémentation de la tentative plus générale de comprendre les phénomènes de dimensions supérieures (ici, à deux dimensions) à partir d'une version du problème bien choisi à une dimension moindre (ici, une dimension), et souvent plus simple à résoudre. C'est, entre autre, pour cette même raison que les modèles d'échelles (de spins ou de fermions) sont des systèmes particulièrement étudiés : rajouter des montants à l'échelle permettrait de déduire, à la limite, le comportement bidimensionnel du modèle initial [279]. Il s'agissait d'ailleurs de la problématique initiale de cette thèse.

Enfin, il est possible d'étudier exactement les mêmes systèmes abordés dans le manuscrit mais sans une partie des nombreuses hypothèses faites au cours de cette thèse. D'une part relaxer l'hypothèse sur la température nulle et d'autre part briser explicitement l'invariance par translation à cause d'un défaut sont tous deux utiles pour comprendre la portée de l'étude à température nulle faite ici et l'influence du désordre. Ils restent des problèmes souvent très complexes qui ont pourtant une importance capitale.

Ainsi, même si cette thèse n'est qu'un exemple de tentative de compréhension de ces problé-

matiques, ce n'est que par l'accumulation de tels travaux, toute proportion gardée, qu'il est possible de réaliser un progrès scientifique. C'est de cette manière que je propose de répondre à la question posée en introduction : à quoi ça sert ?



# A Notions pratiques sur $SU(N)$

## A.1 Généralités

$SU(N)$  est un groupe de Lie d'ordre  $N^2 - 1$ . L'algèbre de Lie  $\mathfrak{su}(N)$  est engendré par  $N^2 - 1$  générateurs  $\{T^a\}_{a \in \llbracket 1, N^2 - 1 \rrbracket}$  de trace nulle :  $\text{Tr}[T^a] = 0$ . En fonction de la représentation (matricielle) de  $SU(N)$  considérée, les expressions de ces générateurs changent, mais peuvent toutes être exprimées en fonction de la représentation définissante (souvent la représentation fondamentale) et des constantes de structure. Par ailleurs, il est possible de choisir une normalisation globale différente pour ces générateurs en fonction des usages. Cette section utilise la convention la plus courante, et la section suivante donne les diverses conventions utilisées dans la thèse, choisies par cohérence vis-à-vis des articles correspondants (pour lesquelles les conventions étaient choisies en fonction du public auquel les articles s'adressaient).

Les relations de commutations des générateurs sont les suivantes :

$$[T^a, T^b] = i f^{abc} T^c, \quad (\text{A.1})$$

où  $f^{abc}$  est un tenseur complètement antisymétrique vis-à-vis des trois exposants  $a, b, c$  et nommé tenseur de structure de l'algèbre. Il vérifie :

$$f^{cda} f^{cdb} = g \delta^{ab}, \quad (\text{A.2})$$

où  $g$  est le nombre de Coxeter, soit  $g = N$  ici. Les relations d'anticommutations des générateurs sont :

$$\{T^a, T^b\} = \frac{\delta^{ab}}{N} + d^{abc} T^c, \quad (\text{A.3})$$

où  $d^{abc}$  est le tenseur complètement symétrique qui vérifie :

$$d^{cda} d^{cdb} = \frac{N^2 - 4}{N} \delta^{ab}. \quad (\text{A.4})$$

Ainsi, si  $r$  est la dimension de la représentation  $\mathcal{R}$  choisie dans laquelle sont exprimés les générateurs, alors :

$$\text{Tr} \left[ T^a(\mathcal{R}) T^b(\mathcal{R}) \right] = \frac{r}{2N} \delta^{ab}. \quad (\text{A.5})$$

C'est d'ailleurs souvent cette expression qui est utilisée pour préciser la convention de normalisation choisie. Il est également utile de connaître l'égalité suivante si la représentation choisie est la représentation fondamentale :

$$\sum_{a=1}^{N^2-1} T_{\alpha\beta}^a T_{\gamma\delta}^a = \frac{1}{2} \left( \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \frac{1}{N} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right). \quad (\text{A.6})$$

## A.2 Conventions

La convention précédente, aussi notée  $\text{Tr} [T^a T^b] = \delta^{ab}/2$  pour la représentation fondamentale est utilisée pour les Secs. 1.1 (les matrices de Pauli sont divisées par 2 !), 2.2.2, 3.1 et 3.2 (qui utilise la convention à travers les définitions de l'Ann B), et l'Ann. C. C'est donc la convention privilégiée pour le couplage faible. La convention  $\text{Tr} [T^a T^b] = \delta^{ab}$ , plus immédiate pour la visualisation en termes de diagrammes d'Hartree et Fock est utilisée essentiellement pour le couplage fort, soit tout le Chap. 4 mais aussi tout le Chap. 5 (y compris la partie en "couplage faible"). Enfin la convention  $\text{Tr} [T^a T^b] = 6\delta^{ab}$  (pour la représentation fondamentale de  $SU(3)$  seulement) est utilisé dans la Sec. 3.3.3 pour la démonstration des poids des représentations et seulement la démonstration, le DMRG utilise la seconde convention par ailleurs.

Les matrices "nommées" ont toujours la même expression. Pour les matrices de Pauli :

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.7a})$$

$$\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.7b})$$

et les matrices de Gell-Mann notées  $\lambda^a$  :

$$\lambda^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8a})$$

$$\lambda^4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8b})$$

$$\lambda^7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda^8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8c})$$

où la Sec. 3.3.3 utilise ces matrices multipliées par  $\sqrt{3}$ . Lorsqu'il y a une telle constante, les matrices sont notées  $G^a$  ou  $\tilde{G}^a$ .



# B Matériel additionnel pour le couplage faible

## B.1 Courants de Wess-Zumino-Witten

Les opérateurs courants de la décomposition de Wess-Zumino-Witten sont définis ci-dessous (seuls les courants gauches sont explicités, les droits se déduisent directement des gauches par échange  $L \rightarrow R$ ). Il est possible de définir des courants individuels à chaque secteur orbital ou alternativement de les définir plus globalement vis-à-vis de ce degré de liberté. Ainsi, pour les courants individuels à chaque secteur, les courants associés à la symétrie  $(U(1))_\ell$  sont :

$$J_{\ell L} = \sum_{\sigma} : L_{\ell\sigma}^{\dagger} L_{\ell\sigma} :. \quad (\text{B.1})$$

Pour la symétrie  $(SU(N)_1)_\ell$  associée au spin nucléaire de chaque secteur :

$$J_{\ell L}^a = \sum_{\sigma\sigma'} : L_{\ell\sigma}^{\dagger} T_{\sigma\sigma'}^a L_{\ell\sigma'} :, \quad (\text{B.2})$$

avec  $a = 1 \dots N^2 - 1$  et les  $\{T_{\sigma\sigma'}^a\}$  sont les générateurs de  $SU(N)$  définis Ann. A.2 (d'après la convention de couplage faible). Ces courants ont l'avantage d'être plus souvent utilisables que les suivants car ils apparaissent même en l'absence de tout type de symétrie orbitale. Mais le reste du hamiltonien d'interaction qui ne peut pas être exprimé en fonction de ces courants a tendance à être plus compliqué à traiter. Dans la mesure du possible, il est préférable d'utiliser le second ensemble des courants globaux (qui représentent une alternative, et donc se substituent aux précédents). Pour la symétrie  $U(1)_c$  :

$$J_L = \sum_{\ell} \sum_{\sigma} : L_{\ell\sigma}^{\dagger} L_{\ell\sigma} :. \quad (\text{B.3})$$



## Appendix B. Matériel additionnel pour le couplage faible

---

Pour la symétrie orbitale  $SU(2)_o$  (en réalité  $SU(2)_N^1$ ) :

$$\vec{j}_L = \sum_{\ell'} \sum_{\sigma} : L_{\ell\sigma}^\dagger \frac{\vec{\sigma}_{\ell\ell'}}{2} L_{\ell'\sigma} :, \quad (\text{B.4})$$

avec les  $\sigma^j$  les matrices de Pauli usuelles définies Ann. A.2. Par commodité, deux des trois courants peuvent être substitués par :

$$j_L^\pm = j_L^x \pm i j_L^y. \quad (\text{B.5})$$

Les courants associés à la symétrie du spin nucléaire  $SU(N)_2$  sont :

$$J_L^a = \sum_{\ell} \sum_{\sigma\sigma'} : L_{\ell\sigma}^\dagger T_{\sigma\sigma'}^a L_{\ell\sigma'} :. \quad (\text{B.6})$$

Tandis que les courants spécifiques à  $SU(2N)_1$  sont :

$$\mathcal{J}_L^{a,i} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\ell\ell'} \sum_{\sigma\sigma'} : L_{\ell\sigma}^\dagger T_{\sigma\sigma'}^a \sigma_{\ell\ell'}^i L_{\ell'\sigma'} :, \quad (\text{B.7})$$

et sont également définis par commodité :

$$\mathcal{J}_L^{a,\pm} = \mathcal{J}_L^{a,x} \pm i \mathcal{J}_L^{a,y}. \quad (\text{B.8})$$

Si on définit  $\{J_\alpha(z)\}_\alpha$  l'ensemble des courants associés à la symétrie  $G$ , alors les courants forment une algèbre (fermée) de Kac-Moody au sens des OPEs si :

$$\forall \alpha, \beta, \exists a_{\alpha\beta}, b_{\alpha\beta}^\gamma \in \mathbb{C}, \text{ tels que } J_\alpha(z) J_\beta(\omega) \sim \frac{a_{\alpha\beta}}{(z-\omega)^2} + \sum_\gamma \frac{b_{\alpha\beta}^\gamma J_\gamma(\omega)}{z-\omega}. \quad (\text{B.9})$$

Ainsi, les courants B.1 forment seuls une algèbre, de même que tous les courants B.2, B.3, B.4 et B.6 pris ensemble. Les courants B.7 ne forment, eux, une algèbre qu'avec les courants B.4 et B.6.

La totalité du hamiltonien d'interaction ne peut pas toujours être écrite qu'en utilisant seulement les courants définis jusqu'à présent. C'est en particulier le cas du modèle double-puits au demi remplissage (par opposition au cas incommensurable). Il faut alors définir d'autres opérateurs qui n'interviennent pas dans la décomposition en courant du hamiltonien de WZW

---

<sup>1</sup>La notation en indice au groupe est utilisée pour parler d'algèbre de Kac-Moody (incluant les algèbres affines au sens des OPEs utilisées ici) et dénote, en termes profanes, le nombre d'états redondants dûs au(x) degré(s) de liberté inutilisé(s) vis-à-vis de la symétrie considérée.

(Wess-Zumino-Witten). Il s'agit de :

$$A_{\ell p L}^{\alpha\beta+} = L_{\ell\mu}^{\dagger} A_{\mu\nu}^{\alpha\beta} L_{p\nu} = -\frac{i}{2} \left( L_{\ell\alpha}^{\dagger} L_{p\beta}^{\dagger} - L_{\ell\beta}^{\dagger} L_{p\alpha}^{\dagger} \right) \quad (\text{B.10a})$$

$$A_{\ell p L}^{\alpha\beta-} = \left( A_{\ell p L}^{\alpha\beta+} \right)^{\dagger} = -\frac{i}{2} \left( L_{p\alpha} L_{\ell\beta} - L_{p\beta} L_{\ell\alpha} \right) \quad (\text{B.10b})$$

$$S_L^{\alpha\beta+} = L_{1\mu}^{\dagger} S_{\mu\nu}^{\alpha\beta} L_{2\nu}^{\dagger} = \frac{1}{2} \left( L_{1\alpha}^{\dagger} L_{2\beta}^{\dagger} + L_{1\beta}^{\dagger} L_{2\alpha}^{\dagger} \right) \quad (\text{B.10c})$$

$$S_L^{\alpha\beta-} = \left( S_L^{\alpha\beta+} \right)^{\dagger} = \frac{1}{2} \left( L_{2\alpha} L_{1\beta} + L_{2\beta} L_{1\alpha} \right) \quad (\text{B.10d})$$

## B.2 Opérateurs d'interactions

Les opérateurs B.10, en plus des courants WZW, sont utiles pour définir les opérateurs d'interactions qui s'écrivent alors (avec convention sur les indices répétés):

$$O_1 = J_L^a J_R^a, \quad (\text{B.11a})$$

$$O_{1,C} = \frac{1}{2} (J_L^a J_L^a + J_R^a J_R^a), \quad (\text{B.11b})$$

$$O_2^{+-} = \frac{1}{2} (\mathcal{J}_L^{a,+} \mathcal{J}_R^{a,-} + \mathcal{J}_L^{a,-} \mathcal{J}_R^{a,+}), \quad (\text{B.11c})$$

$$O_3^{++} = \frac{1}{2} (\mathcal{J}_L^{a,+} \mathcal{J}_R^{a,+} + \mathcal{J}_L^{a,-} \mathcal{J}_R^{a,-}), \quad (\text{B.11d})$$

$$O_2 = \mathcal{J}_L^{a,x} \mathcal{J}_R^{a,x}, \quad (\text{B.11e})$$

$$O_3 = \mathcal{J}_L^{a,y} \mathcal{J}_R^{a,y}, \quad (\text{B.11f})$$

$$O_4 = \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_R^{a,z}, \quad (\text{B.11g})$$

$$O_{4,C} = \frac{1}{2} (\mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_L^{a,z} + \mathcal{J}_R^{a,z} \mathcal{J}_R^{a,z}), \quad (\text{B.11h})$$

$$O_5^{+-} = \frac{1}{2} (J_L^+ J_R^- + J_L^- J_R^+), \quad (\text{B.11i})$$

$$O_6^{++} = \frac{1}{2} (J_L^+ J_R^+ + J_L^- J_R^-), \quad (\text{B.11j})$$

$$O_5 = j_L^x j_R^x, \quad (\text{B.11k})$$

$$O_6 = j_L^y j_R^y, \quad (\text{B.11l})$$

$$O_7 = j_L^z j_R^z, \quad (\text{B.11m})$$

$$O_{7,C} = \frac{1}{2} (j_L^z j_L^z + j_R^z j_R^z), \quad (\text{B.11n})$$

$$O_8 = J_L J_R, \quad (\text{B.11o})$$

$$O_{8,C} = \frac{1}{2} (J_L J_L + J_R J_R), \quad (\text{B.11p})$$

$$O_9 = S_L^{\alpha\beta+} S_R^{\alpha\beta-} + S_L^{\alpha\beta-} S_R^{\alpha\beta+}, \quad (\text{B.11q})$$

$$O_{10} = \frac{1}{2} \sum_l (A_{lL}^{\alpha\beta+} A_{lR}^{\alpha\beta-} + A_{lL}^{\alpha\beta-} A_{lR}^{\alpha\beta+}), \quad (\text{B.11r})$$

$$O_{11} = A_{geL}^{\alpha\beta+} A_{geR}^{\alpha\beta-} + A_{geL}^{\alpha\beta-} A_{geR}^{\alpha\beta+}, \quad (\text{B.11s})$$

$$O_{12} = \frac{1}{2} (A_{11L}^{\alpha\beta+} A_{22R}^{\alpha\beta-} + A_{11L}^{\alpha\beta-} A_{22R}^{\alpha\beta+} + (1 \leftrightarrow 2)), \quad (\text{B.11t})$$

où l'indice  $C$  signifie chiral, et où les opérateurs  $O_2^{+-}$ ,  $O_3^{++}$ ,  $O_5^{+-}$  et  $O_6^{++}$  sont des alternatives à  $O_2$ ,  $O_3$ ,  $O_5$  et  $O_6$  (la même chose peut être faite avec  $O_{10}$  et  $O_{12}$  [219]). L'ensemble de ces opérateurs forment aussi une algèbre fermée au sens des OPEs, comme montré par l'Ann B.4.

### B.3 Calcul de la limite continue du hamiltonien d'interaction

#### B.3.1 OPEs sur les courants

Une fois la limite continue implémentée (par exemple en appliquant la formule Eq. 3.13), la réécriture du hamiltonien d'interaction se fait par introduction de l'ordre normal et OPE successive. J'écris ici quelques étapes importantes pour ces dernières opérations pour le lecteur qui souhaite s'en inspirer pour des calculs futurs.

$$\mathcal{R}(J_L J_L) = \lim_{z-\omega \rightarrow 0} J_L(z) J_L(\omega) \quad (\text{B.12a})$$

$$= \text{const.} + :J_L J_L:(\omega) + \mathcal{O}(z-\omega) \quad (\text{B.12b})$$

$$= \frac{2N}{(2\pi(z-\omega))^2} + \sum_{\ell\ell'\sigma\sigma'} :L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} L_{\ell'\sigma'}^\dagger L_{\ell'\sigma'}: \\ + \sum_{\ell\sigma} \frac{1}{2\pi} \left( : \partial_z L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} : - : L_{\ell\sigma}^\dagger \partial_z L_{\ell\sigma} : \right) \quad (\text{B.12c})$$

$$\mathcal{R}(j_L^i j_L^i) = \frac{2N}{(2\pi(z-\omega))^2} + \sum_{\ell\ell'\ell''\sigma\sigma'} :L_{\ell\sigma}^\dagger \frac{\sigma_{\ell\ell'}^i}{2} L_{\ell'\sigma} L_{\ell''\sigma'}^\dagger \frac{\sigma_{\ell''\ell''}^i}{2} L_{\ell''\sigma'}: \\ + \sum_{\ell\sigma} \frac{1}{8\pi} \left( : \partial_z L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} : - : L_{\ell\sigma}^\dagger \partial_z L_{\ell\sigma} : \right) \quad (\text{B.12d})$$

$$\mathcal{R}(J_L^A J_L^A) = \frac{(N^2-1)}{(2\pi(z-\omega))^2} + \sum_{\ell\ell'\sigma\sigma''\sigma'''} :L_{\ell\sigma}^\dagger T_{\sigma\sigma'}^A L_{\ell'\sigma} L_{\ell''\sigma''}^\dagger T_{\sigma''\sigma'''}^A L_{\ell'''\sigma'''}: \\ + \frac{(N^2-1)}{4\pi N} \sum_{\ell\sigma} \left( : \partial_z L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} : - : L_{\ell\sigma}^\dagger \partial_z L_{\ell\sigma} : \right) \quad (\text{B.12e})$$

$$\mathcal{R}(\mathcal{J}_L^{A,i} \mathcal{J}_L^{A,i}) = \frac{(N^2-1)}{(2\pi(z-\omega))^2} \\ + \sum_{\ell\ell'\ell''\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''} :L_{\ell\sigma}^\dagger \frac{\sigma_{\ell\ell'}^i T_{\sigma\sigma'}^A}{\sqrt{2}} L_{\ell'\sigma} L_{\ell''\sigma'}^\dagger \frac{\sigma_{\ell''\ell''}^i T_{\sigma''\sigma'''}^A}{\sqrt{2}} L_{\ell'''\sigma'''}: \\ + \frac{(N^2-1)}{8\pi N} \sum_{\ell\sigma} \left( : \partial_z L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} : - : L_{\ell\sigma}^\dagger \partial_z L_{\ell\sigma} : \right) \quad (\text{B.12f})$$

$$\mathcal{R}(J_{\ell L} J_{\ell L}) = \frac{N}{(2\pi(z-\omega))^2} \\ + \sum_{\sigma\sigma'} :L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} L_{\ell\sigma'}^\dagger L_{\ell\sigma'}: + \sum_{\sigma} \frac{1}{2\pi} \left( : \partial_z L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} : - : L_{\ell\sigma}^\dagger \partial_z L_{\ell\sigma} : \right) \quad (\text{B.12g})$$

$$\mathcal{R}(J_{\ell L}^A J_{\ell L}^A) = \frac{(N^2-1)}{(2\pi(z-\omega))^2} + \sum_{\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''} :L_{\ell\sigma}^\dagger T_{\sigma\sigma'}^A L_{\ell\sigma} L_{\ell\sigma''}^\dagger T_{\sigma''\sigma'''}^A L_{\ell\sigma'''}: \\ + \frac{(N^2-1)}{4\pi N} \sum_{\sigma} \left( : \partial_z L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} : - : L_{\ell\sigma}^\dagger \partial_z L_{\ell\sigma} : \right) \quad (\text{B.12h})$$

$$\mathcal{R}(J_{g L} J_{e L}) = \sum_{\sigma\sigma'} :L_{g\sigma}^\dagger L_{g\sigma} L_{e\sigma'}^\dagger L_{e\sigma'}: \quad (\text{B.12i})$$

$$\mathcal{R}(J_{g L}^A J_{e L}^A) = \sum_{\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''} :L_{g\sigma}^\dagger T_{\sigma\sigma'}^A L_{g\sigma} L_{e\sigma''}^\dagger T_{\sigma''\sigma'''}^A L_{e\sigma'''}: \quad (\text{B.12j})$$

## Appendix B. Matériel additionnel pour le couplage faible

Ces égalités ont pour conséquence que :

$$\sum_{\sigma\sigma'} : L_{1\sigma}^\dagger L_{1\sigma} L_{2\sigma'}^\dagger L_{2\sigma'} := \frac{1}{4} : J_L J_L : - : j_L^z j_L^z : \quad (\text{B.13a})$$

$$\sum_{\sigma\sigma'} : L_{1\sigma}^\dagger L_{1\sigma'} L_{2\sigma'}^\dagger L_{2\sigma} := \frac{1}{2} : J_L^a J_L^a : - : \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_L^{a,z} : + \frac{1}{4N} : J_L J_L : - \frac{1}{N} : j_L^z j_L^z : \quad (\text{B.13b})$$

$$\sum_{\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''} : L_{1\sigma}^\dagger T_{\sigma\sigma'}^a L_{1\sigma'} L_{2\sigma''}^\dagger T_{\sigma''\sigma'''}^a L_{2\sigma'''} := \frac{1}{2} : J_L^a J_L^a : - : \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_L^{a,z} : \quad (\text{B.13c})$$

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma\sigma'} \left( : L_{1\sigma}^\dagger L_{1\sigma} L_{1\sigma'}^\dagger L_{1\sigma'} : + L_{2\sigma}^\dagger L_{2\sigma} L_{2\sigma'}^\dagger L_{2\sigma'} : \right) \\ &= -\frac{1}{N+1} : J_L^a J_L^a : - \frac{2}{N+1} : \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_L^{a,z} : + \frac{N-1}{2N} \left( : J_L J_L : + 4 : j_L^z j_L^z : \right) \end{aligned} \quad (\text{B.13d})$$

$$\sum_{\sigma\sigma'} : L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} L_{\ell\sigma'}^\dagger L_{\ell\sigma'} := \frac{N-1}{N} : J_{\ell L} J_{\ell L} : - \frac{2}{N+1} : J_{\ell L}^A J_{\ell L}^A : \quad (\text{B.13e})$$

$$\sum_{\sigma\sigma'} : L_{g\sigma}^\dagger L_{g\sigma} L_{e\sigma'}^\dagger L_{e\sigma'} := 2 : J_{gL}^A J_{eL}^A : + \frac{1}{N} : J_{gL} J_{eL} : \quad (\text{B.13f})$$

$$\begin{aligned} & \sum_{\ell\sigma} \frac{1}{2\pi} \left( : \partial_z L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} : - : L_{\ell\sigma}^\dagger \partial_z L_{\ell\sigma} : \right) \\ &= \frac{1}{N+1} \left( : J_L^a J_L^a : + 2 : \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_L^{a,z} : \right) + \frac{1}{2N} \left( : J_L J_L : + 4 : j_L^z j_L^z : \right) \end{aligned} \quad (\text{B.13g})$$

$$= \frac{2}{N+1} : J_{\ell L}^A J_{\ell L}^A : + \frac{1}{N} : J_{\ell L} J_{\ell L} : \quad (\text{B.13h})$$

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma\sigma'} : L_{1\sigma}^\dagger L_{2\sigma} L_{1\sigma'}^\dagger L_{2\sigma'} : + : L_{2\sigma}^\dagger L_{1\sigma} L_{2\sigma'}^\dagger L_{1\sigma'} : \\ &= : j_L^+ j_L^+ : + : j_L^- j_L^- : - \frac{1}{2(N+1)} \left( : J_L^a J_L^a : + 2 : \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_L^{a,z} : \right) - \frac{1}{4N} \left( : J_L J_L : + 4 : j_L^z j_L^z : \right). \end{aligned} \quad (\text{B.13i})$$

La décomposition en courant du hamiltonien sans interaction est bien retrouvée :

$$\sum_{\ell\sigma} \frac{1}{2} \left( : \partial_z L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} : - : L_{\ell\sigma}^\dagger \partial_z L_{\ell\sigma} : \right) = \frac{\pi}{2N} \left( : J_L J_L : \right) + \frac{2\pi}{N+2} \left( : J_L^a J_L^a : + : j_L^i j_L^i : \right), \quad (\text{B.14})$$

C'est-à-dire en terme du hamiltonien de charge  $H[U(1)]$  et des hamiltoniens WZW de  $SU(N)_2$  et  $SU(2)_N$  :

$$H_{\text{non-int}} = H[U(1)] + W[SU(N); 2] + W[SU(2); N]. \quad (\text{B.15})$$

Enfin, pour les termes achiraux :

$$: J_L J_R : - 4 : j_L^z j_R^z : = 2 \left( : L_{1\alpha}^\dagger L_{1\alpha} R_{2\beta}^\dagger R_{2\beta} : + : R_{1\alpha}^\dagger R_{1\alpha} L_{2\beta}^\dagger L_{2\beta} : \right) \quad (\text{B.16a})$$

$$: J_L J_R : + 4 : j_L^z j_R^z : = 2 \left( : L_{1\alpha}^\dagger L_{1\alpha} R_{1\beta}^\dagger R_{1\beta} : + : R_{2\beta}^\dagger R_{2\beta} L_{2\alpha}^\dagger L_{2\alpha} : \right) \quad (\text{B.16b})$$

$$: J_L^a J_R^a : - 2 : \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_R^{a,z} : = 2 \left( : L_{1\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^a L_{1\beta} R_{2\alpha'}^\dagger T_{\alpha'\beta'}^a R_{2\beta'} : + : L_{2\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^a L_{2\beta} R_{1\alpha'}^\dagger T_{\alpha'\beta'}^a R_{1\beta'} : \right) \quad (\text{B.16c})$$

$$= : L_{1\alpha}^\dagger L_{1\beta} R_{2\beta}^\dagger R_{2\alpha} : + : L_{2\alpha}^\dagger L_{2\beta} R_{1\beta}^\dagger R_{1\alpha} : - \frac{1}{2N} \left( : J_L J_R : - 4 : j_L^z j_R^z : \right)$$

### B.3. Calcul de la limite continue du hamiltonien d'interaction

$$: J_L^a J_R^a : + 2 : \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_R^{a,z} : = 2 \left( : L_{1\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^a L_{1\beta} R_{1\alpha'}^\dagger T_{\alpha'\beta'}^a R_{1\beta'} : + : L_{2\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^a L_{2\beta} R_{2\alpha'}^\dagger T_{\alpha'\beta'}^a R_{2\beta'} : \right) \quad (\text{B.16d})$$

$$=: L_{1\alpha}^\dagger L_{1\beta} R_{1\beta}^\dagger R_{1\alpha} : + : L_{2\alpha}^\dagger L_{2\beta} R_{2\beta}^\dagger R_{2\alpha} : - \frac{1}{2N} (: J_L J_R : + 4 : j_L^z j_R^z :)$$

$$: j_L^+ j_R^- : + : j_L^- j_R^+ : = : L_{1\alpha}^\dagger L_{2\alpha} R_{2\beta}^\dagger R_{1\beta} : + : L_{2\alpha}^\dagger L_{1\alpha} R_{1\beta}^\dagger R_{2\beta} : \quad (\text{B.16e})$$

$$: \mathcal{J}_L^{a,+} \mathcal{J}_R^{a,-} : + : \mathcal{J}_L^{a,-} \mathcal{J}_R^{a,+} : = : L_{1\alpha}^\dagger L_{2\beta} R_{2\beta}^\dagger R_{1\alpha} : + : L_{2\alpha}^\dagger L_{1\beta} R_{1\beta}^\dagger R_{2\alpha} : - \frac{1}{N} (: j_L^+ j_R^- : + : j_L^- j_R^+ :)$$

$$(\text{B.16f})$$

#### B.3.2 Calculs des termes d'interactions

D'après l'Eq. 2.25, le hamiltonien d'interaction peut se séparer en quatre termes :

$$H_{\text{int}} = H_{\text{int}}^1 + H_{\text{int}}^2 + H_{\text{int}}^3 + H_{\text{int}}^4 \quad (\text{B.17})$$

pilotés par  $U$ ,  $V$ ,  $J_H$  et  $W$  définis Eqs. 2.26 respectivement. Chacun de ces termes, à la limite continue, se séparent en termes réguliers (notés  $q = 0$ ) et *Umklapp* s'ils ont une phase. Ces derniers se moyennent à zéro en général, sauf pour certains remplissages commensurables comme le demi-remplissage qui annule la phase  $e^{2i(k_F^+ + k_F^-)x}$ . Ces termes sont :

$$H_{\text{int},q=0}^1 = \frac{Ua_0}{2} \sum_{\ell} \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{\sigma\sigma'} \left( : L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} : (x) : L_{\ell\sigma'}^\dagger L_{\ell\sigma'} : (x) + : R_{\ell\sigma}^\dagger R_{\ell\sigma} : (x) : R_{\ell\sigma'}^\dagger R_{\ell\sigma'} : (x) \right. \\ \left. + 2 : R_{\ell\sigma}^\dagger R_{\ell\sigma} : (x) : L_{\ell\sigma'}^\dagger L_{\ell\sigma'} : (x) + 2 : L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} : (x) : R_{\ell\sigma'}^\dagger R_{\ell\sigma'} : (x) \right), \quad (\text{B.18a})$$

$$H_{\text{int},q=2k_F}^1 = \frac{Ua_0}{2} \sum_{\ell} \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{\sigma\sigma'} e^{2ik_F^\ell x} \left( : R_{\ell\sigma}^\dagger R_{\ell\sigma} : (x) : L_{\ell\sigma'}^\dagger R_{\ell\sigma'} : (x) + : L_{\ell\sigma}^\dagger R_{\ell\sigma} : (x) : R_{\ell\sigma'}^\dagger R_{\ell\sigma'} : (x) \right. \\ \left. + : L_{\ell\sigma}^\dagger R_{\ell\sigma} : (x) : L_{\ell\sigma'}^\dagger L_{\ell\sigma'} : (x) + : L_{\ell\sigma}^\dagger L_{\ell\sigma} : (x) : L_{\ell\sigma'}^\dagger R_{\ell\sigma'} : (x) \right) + (L \leftrightarrow R, k_F^\ell \rightarrow -k_F^\ell), \quad (\text{B.18b})$$

$$H_{\text{int},q=4k_F}^1 = \frac{Ua_0}{2} \sum_{\ell} \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{\sigma\sigma'} e^{4ik_F^\ell x} : L_{\ell\sigma}^\dagger R_{\ell\sigma} : (x) : L_{\ell\sigma'}^\dagger R_{\ell\sigma'} : (x) + (L \leftrightarrow R, k_F^\ell \rightarrow -k_F^\ell), \quad (\text{B.18c})$$

$$H_{\text{int},q=0}^2 = Va_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{\sigma\sigma'} \left( : L_{1\sigma}^\dagger L_{1\sigma} : (x) : L_{2\sigma'}^\dagger L_{2\sigma'} : (x) + : R_{1\sigma}^\dagger R_{1\sigma} : (x) : R_{2\sigma'}^\dagger R_{2\sigma'} : (x) \right. \\ \left. + : R_{1\sigma}^\dagger R_{1\sigma} : (x) : L_{2\sigma'}^\dagger L_{2\sigma'} : (x) + : L_{1\sigma}^\dagger L_{1\sigma} : (x) : R_{2\sigma'}^\dagger R_{2\sigma'} : (x) \right) \quad (\text{B.18d})$$

$$H_{\text{int},q=2(k_F^+ - k_F^-)}^2 = Va_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{\sigma\sigma'} e^{2i(k_F^+ - k_F^-)x} : L_{1\sigma}^\dagger R_{1\sigma} : (x) : R_{2\sigma'}^\dagger L_{2\sigma'} : (x) + h.c., \quad (\text{B.18e})$$

$$H_{\text{int},q=2k_F}^2 = Va_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{\sigma\sigma'} \left( e^{2ik_F^2 x} : R_{1\sigma}^\dagger R_{1\sigma} : (x) : L_{2\sigma'}^\dagger R_{2\sigma'} : (x) + : L_{1\sigma}^\dagger L_{1\sigma} : (x) : L_{2\sigma'}^\dagger R_{2\sigma'} : (x) \right) \\ \left. + e^{2ik_F^2 x} : L_{1\sigma}^\dagger R_{1\sigma} : (x) : L_{2\sigma'}^\dagger L_{2\sigma'} : (x) + : L_{1\sigma}^\dagger R_{1\sigma} : (x) : R_{2\sigma'}^\dagger R_{2\sigma'} : (x) \right) + (L \leftrightarrow R, k_F^\ell \rightarrow -k_F^\ell), \quad (\text{B.18f})$$

## Appendix B. Matériel additionnel pour le couplage faible

$$H_{\text{int},q=2(k_F^1+k_F^2)}^2 = Va_0 \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{\sigma\sigma'} e^{2i(k_F^1+k_F^2)x} : L_{1\sigma}^\dagger R_{1\sigma} : (x) : L_{2\sigma'}^\dagger R_{2\sigma'} : (x) + h.c., \quad (\text{B.18g})$$

$$H_{\text{int},q=0}^3 = J_H a_0 \sum_{A=1}^{N^2-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( : S_1^{A,L} : (x) S_2^{A,L} : (x) + : S_1^{A,L} : (x) : S_2^{A,R} : (x) \right. \\ \left. + : S_1^{A,R} : (x) : S_2^{A,L} : (x) + : S_1^{A,R} : (x) : S_2^{A,R} : (x) \right) \quad (\text{B.18h})$$

$$H_{\text{int},q=2(k_F^1-k_F^2)}^3 = J_H a_0 \sum_{A=1}^{N^2-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{2i(k_F^1-k_F^2)x} : L_{1\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^A R_{1\beta} : (x) : R_{2\alpha'}^\dagger T_{\alpha'\beta'}^A L_{2\beta'} : (x) + h.c., \quad (\text{B.18i})$$

$$H_{\text{int},q=2k_F}^3 = J_H a_0 \sum_{A=1}^{N^2-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left( e^{2ik_F x} \left( : R_{1\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^A R_{1\beta} : (x) L_{2\alpha'}^\dagger T_{\alpha'\beta'}^A R_{2\beta'} : (x) \right. \right. \\ \left. \left. + : L_{1\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^A L_{1\beta} : (x) L_{2\alpha'}^\dagger T_{\alpha'\beta'}^A R_{2\beta'} : (x) \right) \right. \\ \left. + e^{2ik_F x} \left( : L_{1\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^A R_{1\beta} : (x) L_{2\alpha'}^\dagger T_{\alpha'\beta'}^A L_{2\beta'} : (x) \right. \right. \\ \left. \left. + : L_{1\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^A R_{1\beta} : (x) R_{2\alpha'}^\dagger T_{\alpha'\beta'}^A R_{2\beta'} : (x) \right) \right) + (L \leftrightarrow R, k_F^\ell \rightarrow -k_F^\ell), \quad (\text{B.18j})$$

$$H_{\text{int},q=2(k_F^1+k_F^1)}^3 = J_H a_0 \sum_{A=1}^{N^2-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{2i(k_F^1+k_F^1)x} : L_{\ell\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^A R_{\ell\beta} : (x) : L_{2\alpha'}^\dagger T_{\alpha'\beta'}^A R_{2\beta'} : (x) + h.c., \quad (\text{B.18k})$$

$$H_{\text{int},q=0}^4 = Wa_0 \sum_{\sigma\sigma'} \int dx \left( 2R_{2\sigma}^\dagger R_{1\sigma} L_{2\sigma'}^\dagger L_{1\sigma'} + 2R_{1\sigma}^\dagger R_{2\sigma} L_{1\sigma'}^\dagger L_{2\sigma'} \right. \\ \left. + 2R_{2\sigma}^\dagger L_{1\sigma} L_{2\sigma'}^\dagger R_{1\sigma'} + 2R_{1\sigma}^\dagger L_{2\sigma} L_{1\sigma'}^\dagger R_{2\sigma'} \right) \quad (\text{B.18l})$$

$$H_{\text{int},q=2(k_F^1-k_F^2)}^4 = Wa_0 \sum_{\sigma\sigma'} \int dx e^{2i(k_F^1-k_F^2)x} \left( R_{2\sigma}^\dagger R_{1\sigma} R_{2\sigma'}^\dagger R_{1\sigma'} + L_{1\sigma}^\dagger L_{2\sigma} L_{1\sigma'}^\dagger L_{2\sigma'} \right) + h.c. \quad (\text{B.18m})$$

$$H_{\text{int},q=2k_F}^4 = 0 \quad (!) \quad (\text{B.18n})$$

$$H_{\text{int},q=2(k_F^1+k_F^2)}^4 = Wa_0 \sum_{\sigma\sigma'} \int dx e^{2i(k_F^1+k_F^2)x} \left( L_{2\sigma}^\dagger R_{1\sigma} L_{2\sigma'}^\dagger R_{1\sigma'} + L_{1\sigma}^\dagger R_{2\sigma} L_{1\sigma'}^\dagger R_{2\sigma'} \right) + h.c. \quad (\text{B.18o})$$

Il est alors possible d'exprimer ces termes en fonctions des courants :

$$H_{\text{int},q=0}^1 = \frac{Ua_0}{2} \sum_{a=1}^{N^2-1} \int dx \left[ -\frac{1}{N+1} (: J_L^a J_L^a : + 2 : \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_L^{a,z} :) \right. \\ \left. + \frac{N-1}{2N} (: J_L J_L : + 4 j_L^z j_L^z :) + (L \leftrightarrow R) \right. \\ \left. + \frac{N-1}{N} (J_L J_R + 4 j_L^z j_R^z) - 2 (J_L^a J_R^a + 2 \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_R^{a,z}) \right], \quad (\text{B.19a})$$

$$H_{\text{int},q=4k_F}^1 = \frac{Ua_0}{2} \sum_{\ell=1}^k \int_{-\infty}^{\infty} dx \sum_{\alpha\beta} \left( e^{4ik_F^\ell x} A_{\ell\ell L}^{\alpha\beta+} A_{\ell\ell R}^{\alpha\beta-} + e^{-4ik_F^\ell x} A_{\ell\ell R}^{\alpha\beta+} A_{\ell\ell L}^{\alpha\beta-} \right), \quad (\text{B.19b})$$

$$H_{\text{int},q=0}^2 = Va_0 \int dx \left[ \frac{1}{4} : J_L J_L : - : j_L^z j_L^z : + (L \leftrightarrow R) + \frac{1}{2} (J_L J_R - 4 j_L^z j_R^z) \right], \quad (\text{B.19c})$$

## B.4. Calcul des OPEs des opérateurs d'interactions

$$H_{\text{int},q=2(k_F^1-k_F^2)}^2 = -V a_0 \sum_{a=1}^{N^2-1} \int dx e^{2i(k_F^1-k_F^2)x} \left[ \mathcal{J}_L^{a,+} \mathcal{J}_R^{a,-} + \frac{1}{N} j_L^+ j_R^- \right] + h.c. \quad (\text{B.19d})$$

$$H_{\text{int},q=2(k_F^1+k_F^2)}^2 = V a_0 \int \sum_{\alpha\beta} dx e^{2i(k_F^1+k_F^2)x} \left( S_L^{\alpha\beta+} S_R^{\alpha\beta-} + A_{12L}^{\alpha\beta+} A_{12R}^{\alpha\beta-} \right) + h.c. \quad (\text{B.19e})$$

$$H_{\text{int},q=0}^3 = J_H a_0 \sum_{a=1}^{N^2-1} \int dx \left[ \frac{1}{2} : J_L^a J_L^a : - : \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_L^{a,z} : + (L \leftrightarrow R) + \frac{1}{2} (J_L^a J_R^a - 2 \mathcal{J}_L^{a,z} \mathcal{J}_R^{a,z}) \right] \quad (\text{B.19f})$$

$$H_{\text{int},q=2(k_F^1-k_F^2)}^3 = J_H a_0 \sum_{a=1}^{N^2-1} \int dx e^{2i(k_F^1-k_F^2)x} \left[ \frac{1}{2N} \mathcal{J}_L^{a,+} \mathcal{J}_R^{a,-} - \frac{N^2-1}{2N^2} j_L^+ j_R^- \right] + h.c. \quad (\text{B.19g})$$

$$H_{\text{int},q=2(k_F^1+k_F^2)}^3 = J_H a_0 \sum_{\alpha\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{2i(k_F^1+k_F^2)x} \left( \frac{N-1}{2N} S_L^{\alpha\beta+} S_R^{\alpha\beta-} - \frac{N+1}{2N} A_{12L}^{\alpha\beta+} A_{12R}^{\alpha\beta-} \right) + h.c., \quad (\text{B.19h})$$

$$H_{\text{int},q=0}^4 = W a_0 \sum_{\sigma\sigma'} \int dx \left( -2 (\mathcal{J}_L^{a,+} \mathcal{J}_R^{a,+} + \mathcal{J}_L^{a,-} \mathcal{J}_R^{a,-}) + 2 \left( 1 - \frac{1}{N} \right) (j_R^+ j_L^+ + j_R^- j_L^-) \right) \quad (\text{B.19i})$$

$$H_{\text{int},q=2(k_F^1-k_F^2)}^4 = W a_0 \sum_{\sigma\sigma'} \int dx e^{2i(k_F^1-k_F^2)x} (j_L^+ j_L^+ + j_R^- j_R^-) + h.c. \quad (\text{B.19j})$$

$$H_{\text{int},q=2(k_F^1+k_F^2)}^4 = W a_0 \sum_{\sigma\sigma'} \int dx e^{2i(k_F^1+k_F^2)x} \left( A_{22L}^{\alpha\beta+} A_{11R}^{\alpha\beta-} + (1 \leftrightarrow 2) \right) + h.c. \quad (\text{B.19k})$$

où les opérateurs qui ne sont pas des courants de WZW n'apparaissent que pour les termes *Umklapp*.

## B.4 Calcul des OPEs des opérateurs d'interactions

Le calcul des OPEs des opérateurs d'interactions se fait avec les mêmes règles que précédemment, mais avec plus d'opérations.

Pour un opérateur d'interaction achiral  $O_i(z, \bar{z}) =: L_a^\dagger A_{ab} L_b R_c^\dagger B_{cd} R_d : (z, \bar{z})$  la formule générique suivante s'applique :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(O_i(z, \bar{z}) O_j(0, 0)) = & \left[ \frac{\delta_{ad} \delta_{bc} \delta_{a'd'} \delta_{b'c'}}{|2\pi z|^4} + \frac{1}{|2\pi z|^2} \left( \delta_{bc} \delta_{b'c'} : L_a^\dagger L_d : (0) : R_{a'}^\dagger R_{d'} : (0) \right. \right. \\ & \left. \left. + (bc \leftrightarrow ad) + (b'c' \leftrightarrow a'd') + (bc \leftrightarrow ad, b'c' \leftrightarrow a'd') \right) \right] A_{ab} B_{cd} A_{a'b'} B_{c'd'} + \mathcal{O}(1) \end{aligned}$$

Le premier terme (souvent nul) est l'anomalie et est sans conséquence, c'est le second terme qui pilote la renormalisation à une boucle. Le calcul de chaque combinaison entre deux opérateurs d'interaction est nécessaire pour trouver les coefficients qui apparaissent dans les équations de renormalisation. Les résultats de ces calculs sont présentés Tab. B.1 et B.3. Les opérateurs avec les exposants +- et ++ sont utiles après la transformation Eq. 3.39 de la section 3.2.1. Leur alternative sans ces exposants est plus naturelle dans le cas général.



$O$	$O_1$	$O_2$	$O_3$	$O_2^{+-}$	$O_3^{++}$	$O_4$	$O_5$	$O_6$	$O_5^{+-}$	$O_6^{++}$	$O_7$	$O_8$
$O_1$	$NO_1$	$NO_2$	$NO_3$	$NO_2^{+-}$	$NO_3^{++}$	$NO_4$	0	0	0	0	0	0
$O_2$	$\frac{N}{4}O_1$	$\frac{N}{4}O_1$	$\frac{N^2-1}{N^2}O_7 + \frac{N^2-4}{2N}O_4$	$\frac{N}{4}O_1 + \frac{N^2-1}{N^2}O_7 + \frac{N^2-4}{2N}O_4$	$\frac{N}{4}O_1 - \frac{N^2-1}{N^2}O_7 - \frac{N^2-4}{2N}O_4$	$\frac{N^2-1}{N^2}O_6 + \frac{N^2-4}{2N}O_3$	0	$O_4$	$O_4$	$-O_4$	$O_3$	0
$O_3$	$\cdot$	$\cdot$	$\frac{N}{4}O_1$	$\frac{N}{4}O_1 + \frac{N^2-1}{N^2}O_7 + \frac{N^2-4}{2N}O_4$	$-\frac{N}{4}O_1 + \frac{N^2-1}{N^2}O_7 + \frac{N^2-4}{2N}O_4$	$\frac{N^2-1}{N^2}O_5 + \frac{N^2-4}{2N}O_2$	$O_4$	0	$O_4$	$O_4$	$O_2$	0
$O_2^{+-}$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$2\frac{N^2-1}{N^2}O_7 + \frac{N^2-4}{N}O_4$	0	$\frac{N^2-1}{N^2}O_5^{+-} + \frac{N^2-4}{2N}O_2^{+-}$	$O_4$	$O_4$	$2O_4$	0	$O_2^{+-}$	0
$O_3^{++}$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$-\frac{N}{2}O_1 - 2\frac{N^2-1}{N^2}O_7 - \frac{N^2-4}{N}O_4$	$-\frac{N^2-1}{N^2}O_6^{++} - \frac{N^2-4}{2N}O_3^{++}$	$-O_4$	$O_4$	0	$-2O_4$	$-O_3^{++}$	0
$O_4$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\frac{NO_1}{4}$	$O_3$	$O_2$	$O_2^{+-}$	$-O_3^{++}$	0	0
$O_5$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	0	$O_7$	$O_7$	$-O_7$	$O_6$	0
$O_6$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	0	$O_7$	$O_7$	$O_5$	0
$O_5^{+-}$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$2O_7$	0	$O_5^{+-}$	0
$O_6^{++}$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$-2O_7$	$-O_6^{++}$	0
$O_7$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	0	0
$O_8$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	$\cdot$	0

Table B.1 – Tableau des OPEs des opérateurs d'interactions sans l'éventuelle anomalie (terme divergent qui ne multiplie pas un opérateur). Puisqu'ils sont sous-dominants, les éventuels termes en  $1/|z|$  ont été enlevés puis tous les termes restants ont été multipliés par  $-|2\pi z|^2$ . Puisque le tableau est symétrique, les termes du triangle inférieur ont aussi été omis.

Operator	$O_1$	$O_2$	$O_3$	$O_2^{+-}$	$O_3^{++}$	$O_4$	$O_5$	$O_6$	$O_5^{+-}$	$O_6^{++}$	$O_7$	$O_8$	$O_9$	$O_{10}$	$O_{11}$	$O_{12}$
Coefficient	$4(N^2-1)$	$\frac{N^2-1}{4}$	$\frac{N^2-1}{4}$	$\frac{N^2-1}{2}$	$\frac{N^2-1}{2}$	$\frac{N^2-1}{4}$	$\frac{N^2}{4}$	$\frac{N^2}{4}$	$\frac{N^2}{4}$	$\frac{N^2}{2}$	$\frac{N^2}{4}$	$4N^2$	$N(N+1)$	$N(N-1)$	$N(N-1)$	$2N(N-1)$

Table B.2 – Tableau récapitulatif des anomalies des OPEs des opérateurs d'interactions qui n'apparaissent que lors de la contraction d'un opérateur avec lui-même. Pour plus de lisibilité, toutes ont été multipliées par  $|2\pi z|^4$ .

## B.5. Equations de renormalisation

$O$	$O_9$	$O_{10}$	$O_{11}$	$O_{12}$
$O_1$	$\frac{N^2+N-2}{N} O_9$	$\frac{N^2-N-2}{N} O_{10}$	$\frac{N^2-N-2}{N} O_{11}$	$\frac{N^2-N-2}{N} O_{12}$
$O_2$	$\frac{N+1}{4} (O_{10} - O_{12})$	$\frac{N^2-N-2}{2N} O_{11} + \frac{(N-1)}{2} O_9$	$\frac{N^2-N-2}{4N} (O_{10} + O_{12})$	$-\frac{N-1}{2} O_9 + \frac{N^2-N-2}{2N} O_{11}$
$O_3$	$\frac{N+1}{4} (O_{10} + O_{12})$	$\frac{N^2-N-2}{2N} O_{11} + \frac{(N-1)}{2} O_9$	$\frac{N^2-N-2}{4N} (O_{10} - O_{12})$	$+\frac{N-1}{2} O_9 - \frac{N^2-N-2}{2N} O_{11}$
$O_2^{+-}$	$\frac{N+1}{2} O_{10}$	$(N-1) O_9 + \frac{N^2-N-2}{N} O_{11}$	$\frac{N^2-N-2}{2N} O_{10}$	0
$O_3^{++}$	$-\frac{N+1}{2} O_{12}$	0	$\frac{N^2-N-2}{2N} O_{12}$	$-(N-1) O_9 + \frac{N^2-N-2}{N} O_{11}$
$O_4$	$\frac{N+1}{2} O_{11}$	$\frac{N^2-N-2}{2N} O_{10}$	$\frac{(N-1)}{2} O_9$	$-\frac{N^2-N-2}{2N} O_{12}$
$O_5$	0	$O_{11}$	$\frac{1}{2} (O_{10} + O_{12})$	$O_{11}$
$O_6$	0	$O_{11}$	$\frac{1}{2} (O_{10} - O_{12})$	$-O_{11}$
$O_5^{+-}$	0	$2O_{11}$	$O_{10}$	0
$O_6^{++}$	0	0	$O_{12}$	$2O_{11}$
$O_7$	0	$O_{10}$	0	$-O_{12}$
$O_8$	$4O_9$	$4O_{10}$	$4O_{11}$	$4O_{12}$
$O_9$	$(N+2) O_1 + \frac{N+1}{N} O_8$	$2NO_2^{+-}$	$2NO_4$	$2N(O_3 - O_2)$
$O_{10}$	.	$2(N-2)(O_1 + 2O_4) + 2\frac{N-1}{N}(4O_7 + O_8)$	$2(N-2)O_2^{+-} + 4\frac{N-1}{N}O_5^{+-}$	0
$O_{11}$	.	.	$(N-2)O_1 + \frac{N-1}{N}O_8$	$2(N-2)(O_2 - O_3) + 4\frac{N-1}{N}(O_5 - O_6)$
$O_{12}$	.	.	.	$2(N-2)(O_1 - 2O_4) + 2\frac{N-1}{N}(O_8 - 4O_7)$

Table B.3 – Tableau des OPEs des opérateurs d’interactions (suite) sans l’éventuelle anomalie.

## B.5 Equations de renormalisation

Les équations de renormalisation 3.37 sont explicitement :

$$g'_1 = \frac{N}{4\pi} \left( g_1 g_1 + \frac{1}{4} (g_2 g_2 + g_3 g_3 + g_4 g_4) \right) + \frac{N+2}{4\pi} g_9 g_9 + \frac{N-2}{4\pi} (2g_{10} g_{10} + g_{11} g_{11} + 2g_{12} g_{12}) \quad (\text{B.20a})$$

$$= \frac{N}{4\pi} \left( g_1 g_1 + \frac{1}{4} (2g_2^{+-} g_2^{+-} + 2g_3^{++} g_3^{++} + g_4 g_4) \right) + \frac{N+2}{4\pi} g_9 g_9 + \frac{N-2}{4\pi} (2g_{10} g_{10} + g_{11} g_{11} + 2g_{12} g_{12}) \quad (\text{B.20b})$$

$$g'_2 = \frac{N}{2\pi} g_1 g_2 + \frac{N^2-4}{4N\pi} g_3 g_4 + \frac{1}{2\pi} g_4 g_6 + \frac{1}{2\pi} g_3 g_7 + \frac{N}{\pi} g_9 g_{10} + \frac{N-2}{\pi} g_{10} g_{11} - \frac{N}{\pi} g_9 g_{12} + \frac{N-2}{\pi} g_{11} g_{12} \quad (\text{B.20c})$$

$$g'_3 = \frac{N}{2\pi} g_1 g_3 + \frac{N^2-4}{4N\pi} g_2 g_4 + \frac{1}{2\pi} g_4 g_5 + \frac{1}{2\pi} g_2 g_7 + \frac{N}{\pi} g_9 g_{10} + \frac{N-2}{\pi} g_{10} g_{11} + \frac{N}{\pi} g_9 g_{12} - \frac{N-2}{\pi} g_{11} g_{12} \quad (\text{B.20d})$$

$$g_2^{+-} = \frac{N}{2\pi} g_1 g_2^{+-} + \frac{N^2-4}{4N\pi} g_2^{+-} g_4 + \frac{1}{2\pi} g_4 g_5^{+-} + \frac{1}{2\pi} g_2^{+-} g_7 + \frac{N}{\pi} g_9 g_{10} + \frac{N-2}{\pi} g_{10} g_{11} \quad (\text{B.20e})$$

## Appendix B. Matériel additionnel pour le couplage faible

$$g_3^{++'} = \frac{N}{2\pi} g_1 g_3^{++} - \frac{N^2-4}{4N\pi} g_3^{++} g_4 - \frac{1}{2\pi} g_3^{++} g_7 - \frac{1}{2\pi} g_6^{++} g_4 - \frac{N}{\pi} g_9 g_{12} + \frac{N-2}{\pi} g_{11} g_{12} \quad (\text{B.20f})$$

$$g_4' = \frac{N}{2\pi} g_1 g_4 + \frac{N^2-4}{4N\pi} g_2 g_3 + \frac{1}{2\pi} g_3 g_5 + \frac{1}{2\pi} g_2 g_6 + \frac{N-2}{\pi} g_{10} g_{10} + \frac{N}{\pi} g_9 g_{11} - \frac{N-2}{\pi} g_{12} g_{12} \quad (\text{B.20g})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{N}{2\pi} g_1 g_4 + \frac{N^2-4}{4N\pi} g_2^{+-} g_2^{+-} - \frac{N^2-4}{4N\pi} g_3^{++} g_3^{++} + \frac{1}{\pi} g_2^{+-} g_5^{+-} - \frac{1}{\pi} g_3^{++} g_6^{++} \\ &\quad + \frac{N-2}{\pi} g_{10} g_{10} + \frac{N}{\pi} g_9 g_{11} - \frac{N-2}{\pi} g_{12} g_{12} \end{aligned} \quad (\text{B.20h})$$

$$g_5' = \frac{N^2-1}{N^2 2\pi} g_3 g_4 + \frac{1}{2\pi} g_6 g_7 + 2 \frac{N-1}{N\pi} g_{10} g_{11} + 2 \frac{N-1}{N\pi} g_{11} g_{12} \quad (\text{B.20i})$$

$$g_6' = \frac{N^2-1}{N^2 2\pi} g_2 g_4 + \frac{1}{2\pi} g_5 g_7 + 2 \frac{N-1}{N\pi} g_{10} g_{11} - 2 \frac{N-1}{N\pi} g_{11} g_{12} \quad (\text{B.20j})$$

$$g_5^{+-'} = \frac{N^2-1}{N^2 2\pi} g_2^{+-} g_4 + \frac{1}{2\pi} g_5^{+-} g_7 + 2 \frac{N-1}{N\pi} g_{10} g_{11} \quad (\text{B.20k})$$

$$g_6^{++'} = -\frac{N^2-1}{N^2 2\pi} g_3^{++} g_4 - \frac{1}{2\pi} g_6^{++} g_7 + 2 \frac{N-1}{N\pi} g_{11} g_{12} \quad (\text{B.20l})$$

$$g_7' = \frac{N^2-1}{N^2 2\pi} g_2 g_3 + \frac{1}{2\pi} g_5 g_6 + \frac{2(N-1)}{N\pi} g_{10} g_{10} - \frac{2(N-1)}{N\pi} g_{12} g_{12} \quad (\text{B.20m})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{N^2-1}{N^2 2\pi} g_2^{+-} g_2^{+-} - \frac{N^2-1}{N^2 2\pi} g_3^{++} g_3^{++} + \frac{1}{2\pi} g_5^{+-} g_5^{+-} - \frac{1}{2\pi} g_6^{++} g_6^{++} \\ &\quad + \frac{2(N-1)}{N\pi} g_{10} g_{10} - \frac{2(N-1)}{N\pi} g_{12} g_{12} \end{aligned} \quad (\text{B.20n})$$

$$g_8' = \frac{N+1}{N4\pi} g_9 g_9 + \frac{N-1}{N2\pi} g_{10} g_{10} + \frac{N-1}{N4\pi} g_{11} g_{11} + \frac{N-1}{N2\pi} g_{12} g_{12} \quad (\text{B.20o})$$

$$\begin{aligned} g_9' &= \frac{N^2+N-2}{N2\pi} g_1 g_9 + 2 \frac{1}{\pi} g_8 g_9 + \frac{N-1}{4\pi} g_2 g_{10} + \frac{N-1}{4\pi} g_3 g_{10} \\ &\quad + \frac{N-1}{4\pi} g_4 g_{11} - \frac{N-1}{4\pi} g_2 g_{12} + \frac{N-1}{4\pi} g_3 g_{12} \end{aligned} \quad (\text{B.20p})$$

$$= \frac{N^2+N-2}{N2\pi} g_1 g_9 + 2 \frac{1}{\pi} g_8 g_9 + \frac{N-1}{2\pi} g_2^{+-} g_{10} + \frac{N-1}{4\pi} g_4 g_{11} - \frac{N-1}{2\pi} g_3^{++} g_{12} \quad (\text{B.20q})$$

$$\begin{aligned} g_{10}' &= \frac{N+1}{8\pi} (g_2 g_9 + g_3 g_9) + \frac{N^2-N-2}{N2\pi} g_1 g_{10} + \frac{N^2-N-2}{N4\pi} g_4 g_{10} + \frac{1}{2\pi} g_7 g_{10} \\ &\quad + \frac{2}{\pi} g_8 g_{10} + \frac{N^2-N-2}{8N\pi} (g_2 g_{11} + g_3 g_{11}) + \frac{1}{4\pi} (g_5 g_{11} + g_6 g_{11}) \end{aligned} \quad (\text{B.20r})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{N+1}{4\pi} g_2^{+-} g_9 + \frac{N^2-N-2}{N2\pi} g_1 g_{10} + \frac{N^2-N-2}{N4\pi} g_4 g_{10} + \frac{1}{2\pi} g_7 g_{10} \\ &\quad + \frac{2}{\pi} g_8 g_{10} + \frac{N^2-N-2}{4N\pi} g_2^{+-} g_{11} + \frac{1}{2\pi} g_5^{+-} g_{11} \end{aligned} \quad (\text{B.20s})$$

$$\begin{aligned} g_{11}' &= \frac{N+1}{4\pi} g_4 g_9 + \frac{N^2-N-2}{N4\pi} (g_2 g_{10} + g_3 g_{10}) + \frac{1}{2\pi} (g_5 g_{10} + g_6 g_{10}) + \frac{N^2-N-2}{N2\pi} g_1 g_{11} \\ &\quad + \frac{2}{\pi} g_8 g_{11} + \frac{N^2-N-2}{4N\pi} (g_2 g_{12} - g_3 g_{12}) + \frac{1}{2\pi} (g_5 g_{12} - g_6 g_{12}) \end{aligned} \quad (\text{B.20t})$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{N+1}{4\pi} g_4 g_9 + \frac{N^2-N-2}{N2\pi} g_2^{+-} g_{10} + \frac{1}{\pi} g_5^{+-} g_{10} + \frac{N^2-N-2}{N2\pi} g_1 g_{11} + \frac{2}{\pi} g_8 g_{11} \\
 &\quad + \frac{N^2-N-2}{2N\pi} g_3^{++} g_{12} + \frac{1}{\pi} g_6^{++} g_{12}
 \end{aligned} \tag{B.20u}$$

$$\begin{aligned}
 g'_{12} &= \frac{N+1}{8\pi} (g_3 g_9 - g_2 g_9) + \frac{N^2-N-2}{N8\pi} (g_2 g_{11} - g_3 g_{11}) + \frac{1}{4\pi} (g_5 g_{11} - g_6 g_{11}) \\
 &\quad + \frac{N^2-N-2}{N2\pi} \left( g_1 g_{12} - \frac{1}{2} g_4 g_{12} \right) + \frac{1}{2\pi} (4g_8 g_{12} - g_7 g_{12})
 \end{aligned} \tag{B.20v}$$

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{N+1}{4\pi} g_3^{++} g_9 + \frac{N^2-N-2}{N4\pi} g_3^{++} g_{11} + \frac{1}{2\pi} g_6^{++} g_{11} \\
 &\quad + \frac{N^2-N-2}{N2\pi} \left( g_1 g_{12} - \frac{1}{2} g_4 g_{12} \right) + \frac{1}{2\pi} (4g_8 g_{12} - g_7 g_{12})
 \end{aligned} \tag{B.20w}$$

Qui peuvent être rendues plus lisibles en changeant la normalisation :

$$f_{1,9,10,11,12} = \frac{N}{\pi} g_{1,9,10,11,12} \tag{B.21a}$$

$$f_{2,3,4,2^{+-},3^{++}} = \frac{N}{2\pi} g_{2,3,4,2^{+-},3^{++}} \tag{B.21b}$$

$$f_{5,6,7,5^{+-},6^{++}} = \frac{N^2}{2\pi} g_{5,6,7,5^{+-},6^{++}} \tag{B.21c}$$

$$f_8 = \frac{2N^2}{\pi} g_8 \tag{B.21d}$$

Ainsi :

$$f'_1 = \frac{1}{4} (f_1 f_1 + f_2 f_2 + f_3 f_3 + f_4 f_4) + \frac{N+2}{4N} f_9 f_9 + \frac{N-2}{4N} (2f_{10} f_{10} + f_{11} f_{11} + 2f_{12} f_{12}) \tag{B.22a}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{4} (f_1 f_1 + 2f_2^{+-} f_2^{+-} + 2f_3^{++} f_3^{++} + f_4 f_4) + \frac{N+2}{4N} f_9 f_9 + \frac{N-2}{4N} (2f_{10} f_{10} + f_{11} f_{11} + 2f_{12} f_{12})
 \end{aligned} \tag{B.22b}$$

$$f'_2 = \frac{1}{2} f_1 f_2 + \frac{N^2-4}{2N^2} f_3 f_4 + \frac{1}{N^2} (f_4 f_6 + f_3 f_7) + \frac{1}{2} (f_9 f_{10} - f_9 f_{12}) + \frac{N-2}{2N} (f_{10} f_{11} + f_{11} f_{12}) \tag{B.22c}$$

$$f'_3 = \frac{1}{2} f_1 f_3 + \frac{N^2-4}{2N^2} f_2 f_4 + \frac{1}{N^2} (f_4 f_5 + f_2 f_7) + \frac{1}{2} (f_9 f_{10} + f_9 f_{12}) + \frac{N-2}{2N} (f_{10} f_{11} - f_{11} f_{12}) \tag{B.22d}$$

$$f_2^{+-} = \frac{1}{2} f_1 f_2^{+-} + \frac{N^2-4}{2N^2} f_2^{+-} f_4 + \frac{1}{N^2} (f_4 f_5^{+-} + f_2^{+-} f_7) + \frac{1}{2} f_9 f_{10} + \frac{N-2}{2N} f_{10} f_{11} \tag{B.22e}$$

$$f_3^{++} = \frac{1}{2} f_1 f_3^{++} - \frac{N^2-4}{2N^2} f_3^{++} f_4 - \frac{1}{N^2} (f_4 f_6^{++} + f_3^{++} f_7) - \frac{1}{2} f_9 f_{12} - \frac{N-2}{2N} f_{11} f_{12} \tag{B.22f}$$

$$f'_4 = \frac{1}{2} f_1 f_4 + \frac{N^2-4}{2N^2} f_2 f_3 + \frac{1}{N^2} (f_3 f_5 + f_2 f_6) + \frac{1}{2} f_9 f_{11} + \frac{N-2}{2N} (f_{10} f_{10} - f_{12} f_{12}) \tag{B.22g}$$

$$= \frac{1}{2} f_1 f_4 + \frac{N^2-4}{2N^2} (f_2^{+-} f_2^{+-} - f_3^{++} f_3^{++}) + \frac{2}{N^2} (f_2^{+-} f_5^{+-} - f_3^{++} f_6^{++})$$

## Appendix B. Matériel additionnel pour le couplage faible

$$+ \frac{N-2}{2N} (f_{10}f_{10} - f_{12}f_{12}) + \frac{1}{2} f_9 f_{11} \quad (\text{B.22h})$$

$$f'_5 = \frac{N^2-1}{N^2} f_3 f_4 + \frac{1}{N^2} f_6 f_7 + \frac{N-1}{N} (f_{10}f_{11} + f_{11}f_{12}) \quad (\text{B.22i})$$

$$f'_6 = \frac{N^2-1}{N^2} f_2 f_4 + \frac{1}{N^2} f_5 f_7 + \frac{N-1}{N} (f_{10}f_{11} - f_{11}f_{12}) \quad (\text{B.22j})$$

$$f_5^{+-} = \frac{N^2-1}{N^2} f_2^{+-} f_4 + \frac{1}{N^2} f_5^{+-} f_7 + \frac{N-1}{N} f_{10}f_{11} \quad (\text{B.22k})$$

$$f_6^{++} = -\frac{N^2-1}{N^2} f_3^{++} f_4 - \frac{1}{N^2} f_6^{++} f_7 + \frac{N-1}{N} f_{11}f_{12} \quad (\text{B.22l})$$

$$f'_7 = \frac{N^2-1}{N^2} f_2 f_3 + \frac{1}{N^2} f_5 f_6 + \frac{N-1}{N} (f_{10}f_{10} - f_{12}f_{12}) \quad (\text{B.22m})$$

$$= \frac{N^2-1}{N^2} (f_2^{+-} f_2^{+-} - f_3^{++} f_3^{++}) + \frac{1}{N^2} (f_5^{+-} f_5^{+-} - f_6^{++} f_6^{++}) + \frac{(N-1)}{N} (f_{10}f_{10} - f_{12}f_{12}) \quad (\text{B.22n})$$

$$f'_8 = \frac{N+1}{2N} f_9 f_9 + \frac{N-1}{2N} (2f_{10}f_{10} + f_{11}f_{11} + 2f_{12}f_{12}) \quad (\text{B.22o})$$

$$f'_9 = \frac{N^2+N-2}{2N^2} f_1 f_9 + \frac{1}{N^2} f_8 f_9 + \frac{N-1}{2N} (f_2 f_{10} + f_3 f_{10} + f_4 f_{11} - f_2 f_{12} + f_3 f_{12}) \quad (\text{B.22p})$$

$$= \frac{N^2+N-2}{2N} f_1 f_9 + \frac{1}{N^2} f_8 f_9 + \frac{N-1}{2N} (2f_2^{+-} f_{10} + f_4 f_{11} - 2f_3^{++} f_{12}) \quad (\text{B.22q})$$

$$f'_{10} = \frac{N+1}{4N} (f_2 f_9 + f_3 f_9) + \frac{N^2-N-2}{4N^2} (2f_1 f_{10} + 2f_4 f_{10} + f_2 f_{11} + f_3 f_{11}) \\ + \frac{1}{2N^2} (2f_7 f_{10} + 2f_8 f_{10} + f_5 f_{11} + f_6 f_{11}) \quad (\text{B.22r})$$

$$= \frac{N+1}{2N} f_2^{+-} f_9 + \frac{N^2-N-2}{2N^2} (f_1 f_{10} + f_4 f_{10} + f_2^{+-} f_{11}) + \frac{1}{N^2} (f_7 f_{10} + f_8 f_{10} + f_5^{+-} f_{11}) \quad (\text{B.22s})$$

$$f'_{11} = \frac{N+1}{2N} f_4 f_9 + \frac{N^2-N-2}{2N^2} (f_2 f_{10} + f_3 f_{10} + f_1 f_{11} + f_2 f_{12} - f_3 f_{12}) \\ + \frac{1}{N^2} (f_5 f_{10} + f_6 f_{10} + f_8 f_{11} + f_5 f_{12} - f_6 f_{12}) \quad (\text{B.22t})$$

$$= \frac{N+1}{2N} f_4 f_9 + \frac{N^2-N-2}{2N^2} (2f_2^{+-} f_{10} + f_1 f_{11} + 2f_3^{++} f_{12}) + \frac{1}{N^2} (2f_5^{+-} f_{10} + f_8 f_{11} + 2f_6^{++} f_{12}) \quad (\text{B.22u})$$

$$f'_{12} = \frac{N+1}{4N} (f_3 f_9 - f_2 f_9) + \frac{N^2-N-2}{4N^2} (f_2 f_{11} - f_3 f_{11} + 2f_1 f_{12} - 2f_4 f_{12}) \\ + \frac{1}{2N^2} (f_5 f_{11} - f_6 f_{11} + 2f_8 f_{12} - 2f_7 f_{12}) \quad (\text{B.22v})$$

$$= -\frac{N+1}{2N} f_3^{++} f_9 + \frac{N^2-N-2}{2N^2} (f_3^{++} f_{11} + f_1 f_{12} - f_4 f_{12}) + \frac{1}{N^2} (f_6^{++} f_{11} + f_8 f_{12} - f_7 f_{12}) \quad (\text{B.22w})$$

## C Approche de couplage faible ; cas incommensurable du modèle g-e et *p-band*

Dans le cas incommensurable, c'est-à-dire dans le cas où le remplissage moyen n'est pas un nombre entier de particules par site, ou plus généralement lorsque  $a_0 k_F / \pi \notin \mathbb{Q}$  (ou combinaisons des vecteurs de Fermi lorsqu'il y en a plusieurs). Dans ce cas les termes *Umklapp* de l'Ann. B.3.2 sont tous nuls, et l'approche de couplage faible Chap. 3 se trouve simplifiée du point de vue des équations de renormalisations. La séparation spin-charge y est alors systématique mais aucune des phases ne peut être gappée (car il n'est pas possible de former un motif, forcément commensurable, sur toute la chaîne, voire briser l'invariance par translation). Puisque toutes les phases sont critiques, ce n'est plus le motif, mais l'instabilité dominante qu'il faut identifier pour caractériser ces phases. Toutes les phases SPTs de type Haldane à 1D sont gappées, et donc aucune de celles-ci ne peut apparaître ici. L'étude du remplissage incommensurable du modèle g-e et *p-band* de la Sec. 2.3 a été réalisée dans le cadre de cette thèse Ref. [208] et est attachée dans la suite de cette annexe par commodité. Le cas incommensurable du puits sera vraisemblablement publié dans la Ref. [220] ou un article qui le suit.

# One-dimensional two-orbital $SU(N)$ ultracold fermionic quantum gases at incommensurate filling: A low-energy approach

V. Bois, P. Fromholz, and P. Lecheminant

*Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation, CNRS UMR 8089, Université de Cergy-Pontoise, Site de Saint-Martin, F-95300 Cergy-Pontoise Cedex, France*

(Received 5 February 2016; revised manuscript received 18 March 2016; published 13 April 2016)

We investigate the zero-temperature phase diagram of two-orbital  $SU(N)$  fermionic models at incommensurate filling which are directly relevant to strontium and ytterbium ultracold atoms loading into a one-dimensional optical lattice. Using a low-energy approach that takes into account explicitly the  $SU(N)$  symmetry, we find that a spectral gap for the nuclear-spin degrees of freedom is formed for generic interactions. Several phases with one or two gapless modes are then stabilized which describe the competition between different density instabilities. In stark contrast to the  $N = 2$  case, no dominant pairing instabilities emerge and the leading superfluid one is rather formed from bound states of  $2N$  fermions.

DOI: [10.1103/PhysRevB.93.134415](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.134415)

## I. INTRODUCTION

Ultracold gases of alkaline-earth-like atoms have recently attracted much interest due to their striking properties. One remarkable property is the large decoupling between electronic and nuclear spin degrees of freedom for states with zero total electronic angular momentum [1,2]. It leads to collisional properties which are independent of the nuclear spin states and the emergence of an extended  $SU(N)$  continuous symmetry where  $N = 2I + 1$  ( $I$  being the nuclear spin) can be as large as 10 for  $^{87}\text{Sr}$  fermionic atoms. These atoms as well as  $^{171}\text{Yb}$ ,  $^{173}\text{Yb}$  ones have been cooled down to reach the quantum degeneracy [3,4]. In this respect, the Mott-insulating phase, when loading these atoms in optical lattice, and the one-dimensional (1D) Luttinger physics of these multicomponent fermions have been investigated experimentally recently [5–7]. It paves the way of the quantum simulation of  $SU(N)$  many-body physics with the realization of exotic phases such as  $SU(N)$  chiral spin liquid states or  $SU(N)$  symmetry-protected topological phases [8–18].

A second important property of alkaline-earth-like atoms is the existence of a long-lived metastable excited state ( $^3P_0$ ) coupled to the ground state ( $^1S_0$ ) via an ultranarrow doubly forbidden transition. This makes them ideal systems for the realization of the most precise atomic clocks [19]. The existence of these two levels might also provide new experimental realization of paradigmatic models of Kondo and heavy-fermions physics [20–24] or two-orbital quantum magnetism such as the Kugel-Khomskii model [2,25]. In the latter case, the two electronic states  $|g\rangle = ^1S_0$  and  $|e\rangle = ^3P_0$  simulate the orbital degree of freedom and the spin-exchange scattering between these states has been characterized recently experimentally in fermionic  $^{87}\text{Sr}$  and  $^{173}\text{Yb}$  atoms [26–30]. Despite the fact that  $g$  and  $e$  states possess no electronic angular momentum, the tuning of interorbital interactions can be performed by exploiting the existence of an orbital Feshbach resonance between two ytterbium atoms with different orbital and nuclear spin quantum numbers [29–31]. It opens an avenue for studying the interplay between the orbital and  $SU(N)$  nuclear spin degrees of freedom which might lead to interesting exotic many-body physics.

In this paper, we will focus on this interplay in the special 1D case by means of perturbative and nonperturbative field-theoretical techniques which keep track explicitly of the non-Abelian  $SU(N)$  symmetry of the problem. In this respect, several two-orbital  $SU(N)$  fermionic lattice models with contact interactions can be considered in the context of alkaline-earth-like atoms [2,14,16,32,33].

A first lattice model, the  $g - e$  model, which is directly relevant to recent experiments [26–28], is defined from the existence of four different scattering lengths that stem from the two-body collisions with  $g$  and  $e$  atomic states [2]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{g-e} = & - \sum_{m=g,e} t_m \sum_i \sum_{\alpha=1}^N (c_{m\alpha,i}^\dagger c_{m\alpha,i+1} + \text{H.c.}) \\ & - \mu \sum_{m=g,e} \sum_i n_{m,i} + \sum_{m=g,e} \frac{U_{mm}}{2} \sum_i n_{m,i} (n_{m,i} - 1) \\ & + V \sum_i n_{g,i} n_{e,i} + V_{\text{ex}}^{g-e} \sum_{i,\alpha\beta} c_{g\alpha,i}^\dagger c_{e\beta,i}^\dagger c_{g\beta,i} c_{e\alpha,i}, \quad (1) \end{aligned}$$

where  $c_{m\alpha,i}^\dagger$  denotes the fermionic creation operator on the site  $i$  with nuclear spin index  $\alpha$  ( $\alpha = 1, \dots, N$  with  $N = 2I + 1$ ) and orbital index  $m = g, e$  which labels the two atomic states  $^1S_0$  and  $^3P_0$ , respectively. In Eq. (1), the local fermion numbers of the species  $m = g, e$  at the site  $i$  are defined by  $n_{m,i} = \sum_{\alpha=1}^N c_{m\alpha,i}^\dagger c_{m\alpha,i}$ . The  $g - e$  model (1) is invariant under continuous  $U(1)_c$  and  $SU(N)_s$  symmetries:

$$c_{m\alpha,i} \mapsto e^{i\theta} c_{m\alpha,i}, \quad c_{m\alpha,i} \mapsto \sum_{\beta} U_{\alpha\beta} c_{m\beta,i}, \quad (2)$$

$U$  being an  $SU(N)$  matrix. The two transformations (2) respectively refer to the conservation of the total number of atoms, that will be called  $U(1)_c$  charge symmetry in the following for simplicity, and the  $SU(N)_s$  symmetry in the nuclear-spin sector. On top of these obvious symmetries, the Hamiltonian is also invariant under a  $U(1)_o$  orbital symmetry:

$$c_{g\alpha,i} \mapsto e^{i\theta_o} c_{g\alpha,i}, \quad c_{e\alpha,i} \mapsto e^{-i\theta_o} c_{e\alpha,i}, \quad (3)$$

which means that the total fermion numbers for  $g$  and  $e$  states are conserved separately in Eq. (1).

A second two-orbital  $SU(N)$  fermionic lattice model can be defined by considering only the atoms in the  $g$  state as in experiments [7] and the orbital degrees of freedom are the two degenerate first-excited  $p_x$  and  $p_y$  states of a 2D harmonic trap [32,33]. More specifically, alkaline-earth atoms are loaded into a 1D optical lattice (running in the  $z$  direction) with moderate strength of harmonic confining potential  $m\omega^2(x^2 + y^2)/2$  in the direction perpendicular to the chain. It is assumed that the  $s$  level of the oscillator is fully occupied while the  $p$  levels of the oscillator are partially filled. The resulting lattice model reads as follows in the tight-binding approximation [14,32,33]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{p\text{-band}} = & -t \sum_{i,m\alpha} (c_{m\alpha,i}^\dagger c_{m\alpha,i+1} + \text{H.c.}) - \mu \sum_i n_i \\ & + \frac{U_1 + U_2}{4} \sum_i n_i^2 \\ & + \sum_i [2U_2(T_i^x)^2 + (U_1 - U_2)(T_i^z)^2], \end{aligned} \quad (4)$$

where  $c_{m\alpha,i}^\dagger$  is a creation fermionic operator with orbital index  $m = p_x, p_y$  and nuclear spin components  $\alpha = 1, \dots, N$  on the  $i$ th site of the optical lattice. In Eq. (4),  $n_i = \sum_{m\alpha} c_{m\alpha,i}^\dagger c_{m\alpha,i}$  describes the density operator on the  $i$ th site and a pseudospin operator for the orbital degrees of freedom has been defined

$$T_i^a = \frac{1}{2} c_{m\alpha,i}^\dagger \sigma_{mn}^a c_{n\alpha,i}, \quad (5)$$

$\sigma^a$  ( $a = x, y, z$ ) being the Pauli matrices and a summation over repeated indices (except those which label the lattice sites) is implied in the following. In stark contrast to the  $g - e$  model (1), the  $p$ -band model (4) has a hopping term which does not depend on the orbital state. The use of harmonic potential in the  $xy$  direction implies a constraint of the two coupling constants  $U_{1,2}$  in Eq. (4):  $U_1 = 3U_2$  [14]. As we will see later, the harmonic line plays a special role for  $N > 2$  as the result of the competition between several different instabilities. It is then interesting to consider the generalized  $p$ -band model (4), which can be realized by introducing a quartic confinement potential, to fully reveal the physics along the harmonic line. As it can be easily seen, the  $p$ -band model (4) enjoys a  $U(1)_c \times SU(N)_s$  continuous symmetry which is defined by Eq. (2). Along the harmonic line  $U_1 = 3U_2$ , it displays an additional  $U(1)_o$  symmetry which is a rotation along the  $y$  axis in the orbital subspace. Model (4) exhibits also this extended  $U(1)_o$  symmetry when  $U_2 = 0$  or  $U_1 = U_2$ , where it becomes equivalent to two decoupled single-orbital  $SU(N)$  Hubbard chain models. In remaining cases, the  $U(1)_o$  continuous symmetry in the orbital sector is explicitly broken in contrast to the  $g - e$  model.

In this paper, we investigate the low-energy properties of the two-orbital  $SU(N)$  models (1, 4) at incommensurate filling by means of one-loop renormalization group (RG) approach and non-Abelian bosonization techniques [34–37]. The latter approach is crucial to fully take into account the presence of the  $SU(N)$  symmetry in this problem of alkaline-earth cold atoms. The half-filled case of these models has already been analyzed by complementary techniques in Refs. [12,14,17]. Several interesting phases, including symmetry-protected topological phases, have been found due to the interplay between orbital and nuclear spin degrees of freedom. The specific  $N = 2$  case at incommensurate filling has been recently studied in Ref. [38]

where the competition between different dominant superconducting pairing instabilities has been revealed. As we will show here, the physics of two-orbital  $SU(N)$  models turns out to be very different when  $N > 2$ . We find that the zero-temperature phase diagram of these models is characterized by competing density instabilities. In stark contrast to the conclusion of Ref. [39], no dominant superconducting pairing instabilities can appear in an  $SU(N)$  spin-gap phase when  $N > 2$  since they are not singlet under the  $SU(N)$  symmetry when  $N > 2$ . In this respect, we find that the leading superfluid instability is rather formed from bound states of  $2N$  fermions giving rise to a molecular Luttinger liquid behavior at sufficiently small density [40,41].

The rest of the paper is organized as follows. In Sec. II, we perform the continuum limit of the two models (1, 4) in terms of  $2N$  left-right moving Dirac fermions. The effective low-energy Hamiltonian is then described in a basis where the  $SU(N)$  nuclear-spin symmetry is made explicit. The one-loop RG analysis of the continuum model is presented in Sec. III. We then map out in Sec. IV the zero-temperature phase diagram of models (1, 4). Finally, Sec. V contains our concluding remarks.

## II. CONTINUUM LIMIT

In this section, the continuum limit of the two-orbital  $SU(N)$  Hubbard models (1, 4) at incommensurate filling is determined.

### A. $p$ -band model case

Let us first consider the weak-coupling approach to the  $p$ -band model (4) at incommensurate filling. The latter model has two degenerate Fermi points  $\pm k_F$ . The starting point of the continuum-limit procedure is the linearization of the noninteracting energy spectrum in the vicinity of the Fermi points and the introduction of  $2N$  left-right moving Dirac fermions [34,42]:

$$c_{m\alpha,i} \rightarrow \sqrt{a_0} (L_{m\alpha} e^{-ik_F x} + R_{m\alpha} e^{ik_F x}), \quad (6)$$

with  $m = p_x, p_y$ ,  $\alpha = 1, \dots, N$ , and  $x = ia_0$ ,  $a_0$  being the lattice spacing. The noninteracting Hamiltonian density is equivalent to that of  $2N$  left-right moving Dirac fermions:

$$\mathcal{H}_0 = -iv_F (: R_{m\alpha}^\dagger \partial_x R_{m\alpha} : - : L_{m\alpha}^\dagger \partial_x L_{m\alpha} :), \quad (7)$$

where  $v_F = 2ta_0 \sin(k_F a_0)$  is the Fermi velocity and  $: A :$  denotes the standard normal ordering of an operator  $A$ . The continuum limit of the  $p$ -band model is then achieved by replacing (6) into the interacting part of the lattice model Hamiltonian (4) and keeping only nonoscillating contributions.

At incommensurate filling, there is no umklapp process which couples charge and other orbital or  $SU(N)$  degrees of freedom. Model (4) enjoys then a “spin-charge” separation in the low-energy limit which is the hallmark of 1D conductors [34,42]:

$$\mathcal{H}_{p\text{-band}} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_{so}, \quad (8)$$

with  $[\mathcal{H}_c, \mathcal{H}_{so}] = 0$ . The physical properties of the charge degrees of freedom are governed by  $\mathcal{H}_c$  and  $\mathcal{H}_{so}$  describes



the interplay between SU(N) nuclear spins and orbital degrees of freedom.

The charge Hamiltonian takes the form of a Tomonaga-Luttinger model with Hamiltonian density:

$$\mathcal{H}_c = \frac{v_c}{2} \left[ \frac{1}{K_c} (\partial_x \Phi_c)^2 + K_c (\partial_x \Theta_c)^2 \right], \quad (9)$$

which accounts for metallic properties in the Luttinger liquid universality class [34,42]. In this low-energy approach, the charge excitations are described by the bosonic field  $\Phi_c$  and its dual field  $\Theta_c$ . The explicit form of the Luttinger parameters  $v_c$  and  $K_c$  in the weak-coupling regime can be extracted from the continuum limit and we find

$$K_c = \frac{1}{\sqrt{1 + g_c/\pi v_F}}, \quad v_c = v_F \sqrt{1 + g_c/\pi v_F}, \quad (10)$$

with  $g_c = a_0(N-1)(U_1 + U_2)$ .

We now consider the continuum description of the Hamiltonian  $\mathcal{H}_{so}$  in Eq. (8). To this end, we need to introduce several chiral fermionic bilinear terms which will be useful to perform a one-loop RG analysis of  $\mathcal{H}_{so}$ . These quantities can be identified by exploiting the continuous symmetry of the lattice model (4). The noninteracting model (7) enjoys a  $U(2N)|_L \otimes U(2N)|_R$  symmetry which results from its invariance under independent unitary transformations on the  $2N$  left and right Dirac fermions. Its massless properties are then governed by a conformal field theory (CFT)  $U(2N)_1 = U(1)_c \times SU(2N)_1$  based on this  $U(2N)$  symmetry [37]. Since the  $p$ -band model displays an extended global SU(N) symmetry, we need to decompose the  $SU(2N)_1$  CFT, with  $2N-1$  bosonic gapless modes, into a CFT which is directly related to the SU(N) symmetry. The resulting decomposition is similar to the one which occurs in the multichannel Kondo problem with the use of the conformal embedding [43]:  $U(2N)_1 \supset U(1)_c \times SU(N)_2 \times SU(2)_N$ . In this respect, we introduce the currents which generate the  $SU(N)_2 \times SU(2)_N$  CFT of the problem:

$$\begin{aligned} J_L^a &= L_{n\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^a L_{n\beta} \quad SU(N)_2 \text{ (nuclear) spin currents,} \\ j_L^i &= \frac{1}{2} L_{m\alpha}^\dagger \sigma_{mn}^i L_{n\alpha} \quad SU(2)_N \text{ orbital currents,} \quad (11) \\ J_L^{a,i} &= \frac{1}{\sqrt{2}} L_{m\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^a \sigma_{mn}^i L_{n\beta} \quad \text{mixed currents,} \end{aligned}$$

where  $\sigma^i$  ( $i = x, y, z$ ) and  $T^a$  ( $a = 1, \dots, N^2 - 1$ ) are respectively the Pauli matrices and SU(N) generators in the fundamental representation of SU(N) normalized such that:  $\text{Tr}(T^a T^b) = \delta^{ab}/2$ . The combination  $\mathcal{J}_L^A = (J_L^a, j_L^i, J_L^{a,i})$  with  $A = 1, \dots, 4N^2 - 1$  defines  $SU(2N)_1$  left currents of the noninteracting theory (7).

With all these definitions at hand, we are able to derive the continuum limit of the  $p$ -band model (4). We will neglect all chiral contributions which account for velocity anisotropies and focus on the interacting Hamiltonian. One can then derive the continuum limit of  $\mathcal{H}_{so}$  in terms of the currents (11) and similar expressions for the right-moving ones. After standard calculations, we get the interacting part of  $\mathcal{H}_{so}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{so}^{\text{int}} &= g_1 J_L^a J_R^a + g_2 J_L^{a,x} J_R^{a,x} + g_3 J_L^{a,z} J_R^{a,z} + g_4 J_L^{a,y} J_R^{a,y} \\ &+ g_5 J_L^x J_R^x + g_6 J_L^z J_R^z + g_7 J_L^y J_R^y, \quad (12) \end{aligned}$$

with the following identification for the coupling constants:

$$\begin{aligned} g_1 &= -a_0(U_2 + U_1), \\ g_2 &= -4a_0U_2, \\ g_3 &= 2a_0(U_2 - U_1), \\ g_4 &= g_7 = 0, \\ g_5 &= a_0 \frac{4(N-1)}{N} U_2, \\ g_6 &= a_0 \frac{2(N-1)}{N} (U_1 - U_2). \end{aligned} \quad (13)$$

In the interacting Hamiltonian (12), we have included additional perturbations with coupling constants  $g_{4,7}$  which will be generated at one-loop order within the RG approach as we will see in Sec. III.

### B. $g-e$ model case

We now turn to the continuum limit of the  $g-e$  model (1) with  $t_g = t_e$  and  $U_{gg} = U_{ee}$  so that the only two Fermi points  $\pm k_F$  we get do not depend on the orbital state as in the  $p$ -band model; see Eq. (6). The continuum Hamiltonian of the  $g-e$  model (1) at incommensurate filling also takes the general form (8) where the charge degrees of freedom are governed by the Tomonaga-Luttinger Hamiltonian density (9). The Luttinger parameters are still given by Eq. (10) with  $g_c = a_0((N-1)U - V_{\text{ex}}^{g-e} + NV)$ .

The low-energy Hamiltonian  $\mathcal{H}_{so}$ , which accounts for the interaction between orbital and nuclear spin degrees of freedom, displays the same structure as in Eq. (12). The main difference stems from the fact that we have now the constraints  $g_2 = g_4$  and  $g_5 = g_7$  in Eq. (12) since the  $g-e$  model (1) is invariant under the  $U(1)_o$  orbital symmetry. After straightforward calculations, we get the following identification for the coupling constants:

$$\begin{aligned} g_1 &= -a_0(U + V_{\text{ex}}^{g-e}), \\ g_2 &= g_4 = -2a_0V, \\ g_3 &= -2a_0(U - V_{\text{ex}}^{g-e}), \\ g_5 &= g_7 = 2a_0(V_{\text{ex}}^{g-e} - V/N), \\ g_6 &= \frac{2a_0}{N}((N-1)U + V_{\text{ex}}^{g-e} - NV). \end{aligned} \quad (14)$$

The anisotropic case  $t_g \neq t_e$  and  $U_{gg} \neq U_{ee}$  of the  $g-e$  model (1) is directly related to ytterbium and strontium atoms since the scattering lengths corresponding to the collisions between  $g-g$  and  $e-e$  states are different experimentally [26–28]. In this anisotropic case, the noninteracting energy spectrum can have now four different Fermi points  $\pm k_{g,eF}$  which depend on the orbital state [39]. The linearization of the spectrum around these Fermi points is then described by

$$c_{m\alpha,i} \rightarrow \sqrt{a_0}(L_{m\alpha} e^{-ik_{mF}x} + R_{m\alpha} e^{ik_{mF}x}), \quad (15)$$

with  $m = g, e$  and  $\alpha = 1, \dots, N$ . One important modification of the continuum-limit procedure is the impossibility to use the basis (11) of the low-energy approach which assumes an  $g \leftrightarrow e$  invariance between the orbital states to define the  $SU(N)_2$  current  $J_{R,L}^a$ . In this respect, we introduce  $U(1)$  and  $SU(N)_1$

left-moving currents for each orbital state  $m = g, e$ :

$$\begin{aligned} J_{mL} &= : L_{m\alpha}^\dagger L_{m\alpha} := \sqrt{\frac{N}{\pi}} \partial_x \Phi_{mL}, \\ J_{mL}^a &= L_{m\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^a L_{m\beta}, \end{aligned} \quad (16)$$

with  $a = 1, \dots, N^2 - 1$  and similar definitions for the right movers. The bosonic field  $\Phi_m = \Phi_{mL} + \Phi_{mR}$  describes the  $U(1)_m$  density fluctuations in the orbital  $m = g, e$  subspace.

At incommensurate filling, the continuum Hamiltonian separates into the  $U(1)_g \times U(1)_e$  part which stands for  $g$  and  $e$  orbital density fluctuations, and a non-Abelian part corresponding to the symmetry breaking  $SU(N)_g \times SU(N)_e \rightarrow SU(N)_s$  when the interactions are switched on. The Abelian part can be expressed in terms of the bosonic fields for each orbital:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{U(1) \times U(1)} &= \sum_{m=g,e} \frac{v_m}{2} \left[ \frac{1}{K_m} (\partial_x \Phi_m)^2 + K_m (\partial_x \Theta_m)^2 \right] \\ &+ \frac{a_0(NV - V_{\text{ex}}^{g-e})}{\pi} \partial_x \Phi_g \partial_x \Phi_e, \end{aligned} \quad (17)$$

where  $\Theta_m = \Phi_{mL} - \Phi_{mR}$  is the dual field to  $\Phi_m$  and the Luttinger parameters are

$$\begin{aligned} K_m &= \left( 1 + \frac{a_0(N-1)U_{mm}}{\pi v_{mF}} \right)^{-1/2}, \\ v_m &= v_{mF} \left( 1 + \frac{a_0(N-1)U_{mm}}{\pi v_{mF}} \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (18)$$

$v_{mF} = 2ta_0 \sin(k_{Fm}a_0)$  being the Fermi velocity for the band  $m = g, e$ .

The Hamiltonian (17) can then be diagonalized by introducing the charge and orbital fields [39]:

$$\begin{aligned} \Phi_c &= \frac{1}{\sqrt{v_g + v_e}} \left( \sqrt{\frac{v_g}{K_g}} \Phi_g + \sqrt{\frac{v_e}{K_e}} \Phi_e \right), \\ \Phi_o &= \frac{1}{\sqrt{v_g + v_e}} \left( \sqrt{\frac{v_g}{K_g}} \Phi_g - \sqrt{\frac{v_e}{K_e}} \Phi_e \right), \end{aligned} \quad (19)$$

so that it takes the form of two decoupled Tomonaga-Luttinger liquid Hamiltonian densities:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{U(1) \times U(1)} &= \frac{v_c}{2} \left[ \frac{1}{K_c} (\partial_x \Phi_c)^2 + K_c (\partial_x \Theta_c)^2 \right] \\ &+ \frac{v_o}{2} \left[ \frac{1}{K_o} (\partial_x \Phi_o)^2 + K_o (\partial_x \Theta_o)^2 \right], \end{aligned} \quad (20)$$

where  $K_c$  and  $K_o$  (respectively  $v_c$  and  $v_o$ ) are Luttinger parameters (respectively velocities) for respectively the charge and orbital degrees of freedom:

$$\begin{aligned} K_{c,o} &= \left( 1 \pm \frac{a_0(NV - V_{\text{ex}}^{g-e}) \sqrt{K_g K_e}}{\pi \sqrt{v_g v_e}} \right)^{-1/2}, \\ v_{c,o} &= \bar{v} \left( 1 \pm \frac{a_0(NV - V_{\text{ex}}^{g-e}) \sqrt{K_g K_e}}{\pi \sqrt{v_g v_e}} \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (21)$$

$\bar{v} = (v_g + v_e)/2$  being the average velocity.

The interacting part of the non-Abelian sector takes the form of an  $SU(N)_1$  current-current interaction after neglecting

chiral contributions as before:

$$\mathcal{H}_{\text{SU}(N)}^{\text{int}} = \sum_{m=g,e} \lambda_m J_{mL}^a J_{mR}^a + \lambda (J_{gL}^a J_{eR}^a + J_{eL}^a J_{gR}^a), \quad (22)$$

with  $\lambda_g = -2U_{gg}a_0$ ,  $\lambda_e = -2U_{ee}a_0$ , and  $\lambda = -2V_{\text{ex}}^{g-e}a_0$ .

### III. ONE-LOOP RENORMALIZATION GROUP ANALYSIS

The one-loop RG calculation enables one to deduce the infrared (IR) properties of model (12) and thus to map out the zero-temperature phase diagram of the  $g - e$  model (1) and  $p$ -band model (4). In similar problems, the one-loop RG approach has been very accurate to deduce the phase diagram even beyond the weakly coupled regime. An example is the  $N = 2$  case which was directly compared to numerical simulations [38,44]. We expect that higher-loop RG calculations will not modify the phase diagrams apart from the locations of quantum phase transitions that are not related to the special continuous symmetry of the lattice model.

#### A. RG approach for the $p$ -band model

We start with the  $p$ -band model case. To this end, it is convenient for the RG analysis to introduce the following rescaled coupling constants:

$$\begin{aligned} g_1 &= \frac{\pi}{N} f_1, \\ g_{2,3,4} &= \frac{2\pi}{N} f_{2,3,4}, \\ g_{5,6,7} &= \frac{2\pi}{N^2} f_{5,6,7}. \end{aligned} \quad (23)$$

After cumbersome calculations, we find the following one-loop RG equations:

$$\begin{aligned} \dot{f}_1 &= \frac{1}{4} (f_1^2 + f_2^2 + f_3^2 + f_4^2), \\ \dot{f}_2 &= \frac{1}{2} f_1 f_2 + \frac{N^2 - 4}{2N^2} f_3 f_4 + \frac{1}{N^2} (f_4 f_6 + f_3 f_7), \\ \dot{f}_3 &= \frac{1}{2} f_1 f_3 + \frac{N^2 - 4}{2N^2} f_2 f_4 + \frac{1}{N^2} (f_2 f_7 + f_4 f_5), \\ \dot{f}_4 &= \frac{1}{2} f_1 f_4 + \frac{N^2 - 4}{2N^2} f_2 f_3 + \frac{1}{N^2} (f_2 f_6 + f_3 f_5), \\ \dot{f}_5 &= \frac{N^2 - 1}{N^2} f_3 f_4 + \frac{1}{N^2} f_6 f_7, \\ \dot{f}_6 &= \frac{N^2 - 1}{N^2} f_2 f_4 + \frac{1}{N^2} f_5 f_7, \\ \dot{f}_7 &= \frac{N^2 - 1}{N^2} f_2 f_3 + \frac{1}{N^2} f_5 f_6. \end{aligned} \quad (24)$$

The analysis of the RG Eq. (24) for  $N = 2$  has been done in Ref. [38]. The latter case is very special since the one-loop RG Eq. (24) contains several terms which vanish and a free-field approach based on Majorana fermions can be applied [38]. For the case  $N > 2$ , Eq. (24) have less symmetries and the Majorana-fermion approach of Ref. [38] cannot be used here so that the analysis is more involved. We performed the numerical analysis of the RG Eq. (24) by a Runge-Kutta procedure. The

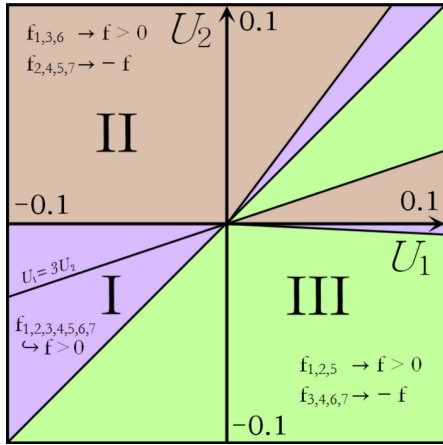


FIG. 1. Numerical phase diagram of the  $p$ -band model (4) obtained from the one-loop RG analysis in the  $N = 4$  case. The same phase diagram is obtained for all  $N > 4$  with a weak- $N$  dependence for the position of some phase-transition lines when  $U_1 > 0$ . For  $N = 3$ , the vicinity of the harmonic line is hard to resolve numerically.

RG flow in the  $N = 3$  case turns out to be very slow when  $U_1 > 0$ . The transition lines of Fig. 1 in the repulsive regime, especially the vicinity of the harmonic line, are difficult to be resolved for  $N = 3$  within our numerical scheme. In this respect, we will investigate this special case elsewhere by means of density-matrix renormalization group calculations to shed light on this issue. When  $N > 3$ , the numerical analysis turns out to be much simpler and it leads to the results presented in Fig. 1.

As depicted in Fig. 1, our numerical results reveal that the RG flow goes in the strong-coupling regime in the far IR along three asymptotic lines:

$$\begin{aligned} \text{I} : f_2 = f_3 = f_4 = f_5 = f_6 = f_7 = f_1 = f^* > 0, \\ \text{II} : f_2 = -f_3 = f_4 = f_5 = -f_6 = f_7 = -f_1 = -f^*, \\ \text{III} : f_2 = -f_3 = -f_4 = f_5 = -f_6 = -f_7 = f_1 = f^*. \end{aligned} \quad (25)$$

These lines give rise to the three different regions of Fig. 1 that we analyze in the next section.

### B. RG approach for the $g - e$ model

We now look at the  $g - e$  model. We first consider the isotropic case with  $t_g = t_e$  and  $U_{gg} = U_{ee}$  so that the one-loop RG equations are still given by Eq. (24) with the initial conditions (14). The numerical analysis is presented in Fig. 2 depending on the sign of  $V_{ex}^{g-e}$ .

On top of the asymptotes (I) and (II) of Eq. (25) which occur in the  $p$ -band model, we have a new one which defines the region IV in Fig. 2:

$$\text{IV} : f_1 = -f_3 = f^* > 0, \quad \frac{f_{2,4,5,6,7}}{f_1} \rightarrow 0. \quad (26)$$

In the orbital anisotropic case  $t_g \neq t_e$  and  $U_{gg} \neq U_{ee}$ , the analysis is much simpler. Indeed, model (22) describes three commuting marginal  $SU(N)_1$  current-current interactions with one-loop RG equation of the general form:  $\dot{f} = f^2$ . The

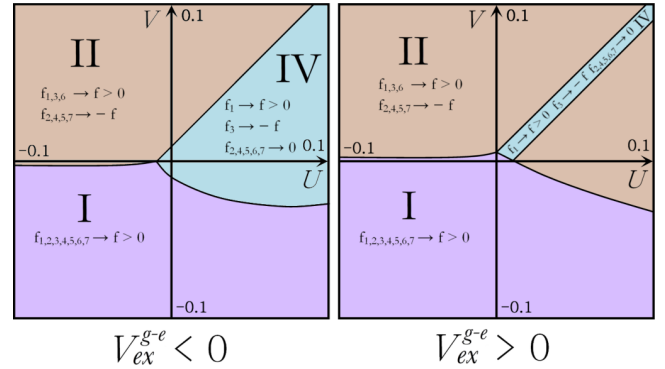


FIG. 2. Numerical one-loop RG phase diagram for the  $g - e$  model (1) with  $t_g = t_e$  and  $U_{gg} = U_{ee}$  in the  $N = 4$  case. The same phase diagram is obtained for all  $N > 4$  with a weak- $N$  dependence for the position of the phase-transition lines. For  $N = 3$ , the latter are hard to be resolved numerically.

fate of these perturbations in the far IR limit depend then only on the sign of the coupling constants  $g_m$  and  $g$ . The different scattering lengths of two atoms collision have been determined recently experimentally for strontium and ytterbium atoms [26–28]. The interactions  $U_{gg}$  and  $U_{ee}$  are always repulsive so that  $\lambda_m < 0$  for  $m = g, e$  and  $V_{ex}^{g-e} > 0$ , i.e.,  $\lambda < 0$ , for ytterbium atoms [27,28]. Yet in the following, for completeness, we will consider the two cases  $V_{ex}^{g-e} > 0$  and  $V_{ex}^{g-e} < 0$  as in Fig. 2. When  $V_{ex}^{g-e} > 0$ , the interactions in the effective low-energy Hamiltonian (22) are then marginally irrelevant and a fully gapless  $2N$ -component Luttinger liquid behavior with central charge  $c = 2N$  emerges in the IR limit. In contrast, when  $V_{ex}^{g-e} < 0$ , i.e.,  $\lambda > 0$ , the last interaction in Eq. (22) is marginally relevant and opens a spin gap for the nuclear-spin degrees of freedom. The resulting phase is then a gapless  $c = 2$  phase which stems from the two-component Luttinger behavior (20) of the charge and orbital degrees of freedom.

## IV. PHASE DIAGRAMS

In this section, we investigate the nature of the dominant electronic instability when  $N > 2$  in each of the corresponding regions of Figs. 1 and 2. The zero-temperature phase diagrams of the  $g - e$  model (1) and the  $p$ -band model (4) can then be deduced from this analysis.

### A. Region I

In region I of Figs. 1 and 2, the one-loop RG equations flow along a special ray where  $f_i = f^* > 0$  ( $i = 1, \dots, 7$ ). The RG Eq. (24) becomes degenerate:  $\dot{f} = f^2$ , which signals the presence of an enlarged symmetry. In fact, in region I of Fig. 1, the Hamiltonian (12) enjoys a dynamical symmetry enlargement [45,46] in the far IR with the emergence of a higher  $SU(2N)$  symmetry which unifies orbital and nuclear-spin degrees of freedom:

$$\mathcal{H}_{so}^{\text{int}*} = f^* \mathcal{J}_L^A \mathcal{J}_R^A, \quad (27)$$

where  $\mathcal{J}_L^A = (J_L^a, J_L^i, J_L^{a,i})$  are left chiral  $SU(2N)_1$  currents with  $A = 1, \dots, 4N^2 - 1$ . The IR Hamiltonian takes the form

of an  $SU(2N)$  Gross-Neveu (GN) model [47], which is an integrable massive field theory when  $f^* > 0$  [48]. The orbital and nuclear spin degrees of freedom are thus fully gapped and a  $c = 1$  critical phase is formed which stems from the gapless charge degrees of freedom described by the bosonic field  $\Phi_c$  in Eq. (9). Using the general duality approach to 1D interacting fermions of Ref. [49], one expects the emergence of a gapless  $2k_F$  charge-density wave (CDW) phase due to this  $SU(2N)$  symmetry enlargement. Its lattice order parameter is defined through  $n_{2k_F}(j) = \sum_{m,\alpha} e^{i2k_F x} c_{m\alpha,j}^\dagger c_{m\alpha,j}$ , with  $x = ja_0$ , and  $m = g, e$  or  $m = p_x, p_y$ , respectively, for the  $g - e$  and  $p$ -band models. In the continuum limit (6) we get

$$n_{2k_F} = R_{m\alpha}^\dagger L_{m\alpha}. \quad (28)$$

Since this operator is an  $SU(2N)$  singlet, it is worth expressing it in the noninteracting  $U(1)_c \times SU(2N)_1$  CFT basis. In this respect, we use the so-called non-Abelian bosonization which enables one to find a bosonic description for fermionic bilinears in such a basis [35–37]:

$$L_{l\alpha}^\dagger R_{p\beta} \sim \exp(i\sqrt{2\pi/N}\Phi_c) g_{p\beta,l\alpha}, \quad (29)$$

where  $g$  is the  $SU(2N)_1$  primary field with scaling dimension  $\frac{2N-1}{2N}$  which transforms in the fundamental representation of  $SU(2N)$  [50]. The IR physics which results from the strong-coupling regime of the  $SU(2N)$  GN model (27) can then be inferred from a simple semiclassical analysis. In particular, the interacting part of the  $SU(2N)$  GN model can be expressed in terms of  $\text{Tr } g$ :  $\mathcal{H}_{\text{so}}^{\text{int}*} \sim -f^* |\text{Tr } g|^2$ , so that  $\langle \text{Tr } g \rangle \neq 0$  in the ground state of that phase since  $f^* > 0$ . Using the correspondence (29), we thus obtain in region I

$$n_{2k_F} \sim \exp(-i\sqrt{2\pi K_c/N}\Phi_c), \quad (30)$$

where we have rescaled the charge bosonic field by its Luttinger parameter. The equal-time density-density correlation can then easily be computed as follows:

$$\langle n(x)n(0) \rangle \simeq A \cos(2k_F x) x^{-K_c/N} - \frac{NK_c}{\pi^2 x^2}, \quad (31)$$

where  $n(x)$  is the continuum description of the lattice density operator  $n_i$  and  $A$  is some nonuniversal amplitude.

Due to the existence of the  $SU(N)_s$  nuclear-spin symmetry, there is no pairing instability which competes with the  $2k_F$  CDW in region I. Indeed, a general superconducting pairing operator  $c_{m\alpha,i}^\dagger c_{n\beta,i}$  is not a singlet under the  $SU(N)_s$  symmetry when  $N > 2$ . In the continuum limit, its nuclear-spin part cannot sustain a nonzero expectation value in the gapful  $SU(2N)$  invariant model (27). All pairing instabilities are thus fluctuating orders with short-ranged correlation functions in stark contrast to the conclusion of Ref. [39]. However, we may consider a molecular superfluid (MS) instability made of  $2N$  fermions as in 1D cold fermionic atoms with higher spins [40,41,51,52]:  $M_i^\dagger = \prod_{\alpha=1}^N c_{g\alpha,i}^\dagger c_{e\alpha,i}$  for the  $g - e$  model or  $M_i^\dagger = \prod_{\alpha=1}^N c_{p_x\alpha,i}^\dagger c_{p_y\alpha,i}$  for the  $p$ -band model. In stark contrast to fermionic pairings,  $M_i$  is a singlet under the  $SU(2N)$  symmetry. The equal-time correlation function of this MS order parameter has been determined in Refs. [40,52] in a phase where the  $SU(2N)$  symmetry is restored in the far IR

limit as in Eq. (27):

$$\langle M^\dagger(x)M(0) \rangle \sim x^{-N/K_c}. \quad (32)$$

We thus see that  $2k_F$  CDW and MS instabilities compete. In particular, a dominant MS instability requires  $K_c > N$  and thus a fairly large value of  $K_c$  which, with only short-range interaction, is not guaranteed. As shown in Refs. [40,41], in the low-density regime and for attractive interactions, such value of the Luttinger parameter can be reached for on-site interactions which signals the emergence of a molecular Luttinger phase. Apart from that case, we expect a dominant  $2k_F$  CDW in region I.

## B. Region II

In region II of Figs. 1 and 2, the one-loop RG equations flow along the special ray (II) of Eq. (25). The resulting interacting IR Hamiltonian takes the form of the  $SU(2N)$  GN model (27) when a duality transformation  $\mathcal{D}_1$  on the left currents of Eq. (12) is performed:

$$\begin{aligned} J_L^{a,(x,y)} &\xrightarrow{\mathcal{D}_1} -J_L^{a,(x,y)}, \\ J_L^{a,z} &\xrightarrow{\mathcal{D}_1} J_L^{a,z}, \\ j_L^{(x,y)} &\xrightarrow{\mathcal{D}_1} -j_L^{(x,y)}, \\ j_L^z &\xrightarrow{\mathcal{D}_1} j_L^z, \\ J_L^a &\xrightarrow{\mathcal{D}_1} J_L^a, \end{aligned} \quad (33)$$

whereas all right-moving currents remain invariant. This duality symmetry leads to  $f_{2,4,5,7} \rightarrow -f_{2,4,5,7}$  in Eq. (12) which is indeed a symmetry of the one-loop RG equations (24). The duality transformation has a simple interpretation on the left-moving Dirac fermions (the right ones being untouched):

$$\begin{aligned} L_{1\alpha} &\xrightarrow{\mathcal{D}_1} L_{1\alpha}, \\ L_{2\alpha} &\xrightarrow{\mathcal{D}_1} -L_{2\alpha}, \end{aligned} \quad (34)$$

where the orbital index is denoted by  $1 \equiv g, p_x$  and  $2 \equiv e, p_y$  for the  $g - e$  and  $p$ -band models, respectively. Since the  $SU(2N)$  GN model (27) is a massive field theory, we deduce that orbital and nuclear-spin low-lying excitations are fully gapped in region II. Taking account of the charge degrees of freedom (9), we conclude that a Luttinger-liquid phase with central charge  $c = 1$  is stabilized. The nature of the dominant electronic instability of that phase can be deduced from the duality transformation (34) on the  $2k_F$ -CDW order parameter (28), which governs the IR physics in region I:

$$\begin{aligned} n_{2k_F} &= R_{l\alpha}^\dagger L_{l\alpha} \xrightarrow{\mathcal{D}_1} \mathcal{O}_{\text{ODW}_z}^{2k_F} = R_{1\alpha}^\dagger L_{1\alpha} - R_{2\alpha}^\dagger L_{2\alpha} \\ &= R_{l\alpha}^\dagger \sigma_{lm}^z L_{m\alpha}. \end{aligned} \quad (35)$$

The underlying lattice order parameter is the  $2k_F$  component of an orbital density wave (ODW) along the  $z$  axis in the orbital subspace:

$$\mathcal{O}_{\text{ODW}_z}(i) = c_{l\alpha,i}^\dagger \sigma_{lm}^z c_{m\alpha,i}, \quad (36)$$

with  $l, m = g, e$  and  $l, m = p_x, p_y$  for respectively the  $g - e$  model (1) and the  $p$ -band model (4). Using the result (31)

in region I, the leading asymptotics of the equal-time ODW correlation function is:

$$\langle \mathcal{O}_{\text{ODW}_z}(x) \mathcal{O}_{\text{ODW}_z}(0) \rangle \sim \cos(2k_F x) x^{-K_c/N}. \quad (37)$$

Again as in region I, this instability competes with the MS one (32).

### C. Region III

Asymptote (III) of the one-loop RG flow occurs only in the region III of the  $p$ -band model (see Fig. 1). Along this special ray, the interacting IR Hamiltonian is again equivalent to the SU(2N) GN model (27) when a duality transformation  $\mathcal{D}_2$  on the left currents of Eq. (12) is performed:

$$\begin{aligned} J_L^{a,(z,y)} &\xrightarrow{\mathcal{D}_2} -J_L^{a,(z,y)}, \\ J_L^{a,x} &\xrightarrow{\mathcal{D}_2} J_L^{a,x}, \\ j_L^{(z,y)} &\xrightarrow{\mathcal{D}_2} -j_L^{(z,y)}, \\ j_L^x &\xrightarrow{\mathcal{D}_2} j_L^x, \\ J_L^a &\xrightarrow{\mathcal{D}_2} J_L^a, \end{aligned} \quad (38)$$

whereas all right-moving currents remain invariant. This duality symmetry leads to  $f_{3,4,6,7} \rightarrow -f_{3,4,6,7}$  which is indeed a symmetry of the one-loop RG equations (24) and expresses as follows in terms of the left-moving Dirac fermions:

$$\begin{aligned} L_{1\alpha} &\xrightarrow{\mathcal{D}_2} L_{2\alpha}, \\ L_{2\alpha} &\xrightarrow{\mathcal{D}_2} L_{1\alpha}, \end{aligned} \quad (39)$$

the right-moving Dirac fermions being invariant under the transformation. We have again a gapless  $c = 1$  phase where orbital and nuclear spin degrees of freedom are fully gapped. The dominant instability of phase III is obtained from the  $2k_F$ -CDW order parameter (28) by performing the duality symmetry (39):

$$\begin{aligned} n_{2k_F} &= R_{1\alpha}^\dagger L_{1\alpha} \xrightarrow{\mathcal{D}_2} \mathcal{O}_{\text{ODW}_x}^{2k_F} = R_{1\alpha}^\dagger L_{2\alpha} + R_{2\alpha}^\dagger L_{1\alpha} \\ &= R_{1\alpha}^\dagger \sigma_{lm}^x L_{m\alpha}. \end{aligned} \quad (40)$$

The latter being related to the continuum description of the  $2k_F$  component of an ODW along the  $x$  axis in the orbital subspace:

$$\mathcal{O}_{\text{ODW}_x}(i) = c_{1\alpha,i}^\dagger \sigma_{lm}^x c_{m\alpha,i}, \quad (41)$$

with  $l, m = p_x, p_y$ . We thus get a power-law behavior for its equal-time correlation function:

$$\langle \mathcal{O}_{\text{ODW}_x}(x) \mathcal{O}_{\text{ODW}_x}(0) \rangle \sim \cos(2k_F x) x^{-K_c/N}, \quad (42)$$

which competes also with the MS one (32).

### D. Region IV

In the region IV of Fig. 2 for the  $g - e$  model, the one-loop RG flow is attracted along the special ray (26). Contrary to the previous regions, this asymptote is not described by an SU(2N) dynamical symmetry enlargement in the IR limit. Along the

line (26), the interacting part of the Hamiltonian density which governs the IR physics of region IV reads as follows:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{so}}^{\text{int}*} &= \frac{\pi f^*}{N} (J_L^a J_R^a - 2J_L^{a,z} J_R^{a,z}) \\ &= \frac{2\pi f^*}{N} (J_{gL}^a J_{eR}^a + J_{gR}^a J_{eL}^a), \end{aligned} \quad (43)$$

where we have used the SU(N)<sub>1</sub> currents defined in Eq. (16). Performing a chiral transformation ( $\Omega$ ) on the left-moving Dirac fermions  $L_{g,e\alpha} \xrightarrow{\Omega} L_{e,g\alpha}$ , model (43) takes the form of two independent U(N) Thirring (or chiral GN) models, one for each orbital degree of freedom:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{so}}^* &= -i v_F (:R_{m\alpha}^\dagger \partial_x R_{m\alpha} : - :L_{m\alpha}^\dagger \partial_x L_{m\alpha} :) \\ &+ \frac{2\pi f^*}{N} J_{mL}^a J_{mR}^a = \frac{\pi v_F}{N} \sum_{m=g,e} (:J_{mL}^2 : + :J_{mR}^2 :) \\ &+ \frac{2\pi v_F}{N+1} (:J_{mL}^a J_{mL}^a : + L \rightarrow R) + \frac{2\pi f^*}{N} J_{mL}^a J_{mR}^a, \end{aligned} \quad (44)$$

where  $J_{mL,R}$  denotes the U(1) chiral currents for each orbital  $m = g, e$  as in Eq. (16). The U(N) Thirring model is an integrable field theory and for  $f^* > 0$  its non-Abelian SU(N) spin sector has a spectral gap [48]. Two gapless U(1) degrees of freedom, one for each orbital, emerges then in the far IR limit, giving rise to an extended  $c = 2$  gapless phase.

This phase is governed by the competition between two ODW instabilities along the  $x$  and  $y$  axis:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{\text{ODW}_x}^{2k_F} &= R_{g\alpha}^\dagger L_{e\alpha} + R_{e\alpha}^\dagger L_{g\alpha} \\ &\xrightarrow{\Omega} R_{m\alpha}^\dagger L_{m\alpha}, \\ \mathcal{O}_{\text{ODW}_y}^{2k_F} &= -i R_{g\alpha}^\dagger L_{e\alpha} + i R_{e\alpha}^\dagger L_{g\alpha} \\ &\xrightarrow{\Omega} -i R_{g\alpha}^\dagger L_{g\alpha} + i R_{e\alpha}^\dagger L_{e\alpha}, \end{aligned} \quad (45)$$

after applying the preceding chiral transformation of the left-moving Dirac fermions. We now apply the non-Abelian bosonization approach and use the following identification, similar to Eq. (29):

$$L_{m\alpha}^\dagger R_{m\beta} \sim e^{i\sqrt{4\pi/N}\Phi_m} g_{\beta\alpha}, \quad (46)$$

where there is no sum over  $m$  and  $g$  is the SU(N)<sub>1</sub> primary field with scaling dimension  $\frac{N-1}{N}$  which acts in the nuclear-spin sector. One finds then the identification:

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{\text{ODW}_x}^{2k_F} &\sim (e^{-i\sqrt{4\pi/N}\Phi_g} + e^{-i\sqrt{4\pi/N}\Phi_e}) \text{Tr} g^\dagger, \\ \mathcal{O}_{\text{ODW}_y}^{2k_F} &\sim (e^{-i\sqrt{4\pi/N}\Phi_g} - e^{-i\sqrt{4\pi/N}\Phi_e}) \text{Tr} g^\dagger. \end{aligned} \quad (47)$$

The next step of the approach is to consider symmetric and antisymmetric combination of the bosonic fields:

$$\Phi_+ = \frac{\Phi_g + \Phi_e}{\sqrt{2}}, \quad \Phi_- = \frac{\Phi_g - \Phi_e}{\sqrt{2}}, \quad (48)$$



and taking into account that  $\langle \text{Tr}g^\dagger \rangle \neq 0$  in the ground state of the Thirring models (44), we finally get

$$\begin{aligned}\mathcal{O}_{\text{ODW}_x}^{2k_F} &\sim e^{-i\sqrt{2\pi}K_+/N\Phi_+} \cos(\sqrt{2\pi}K_-/N\Phi_-), \\ \mathcal{O}_{\text{ODW}_y}^{2k_F} &\sim e^{-i\sqrt{2\pi}K_+/N\Phi_+} \sin(\sqrt{2\pi}K_-/N\Phi_-),\end{aligned}\quad (49)$$

where  $K_\pm$  are the Luttinger parameters for the bosons  $\Phi_\pm$ . One can relate these parameters to the charge and orbital ones ( $K_{c,o}$ ) which occur in the  $U(1)_g \times U(1)_e$  description of density fluctuations (20) of the anisotropic  $g - e$  model. The chirality transformation  $L_{g,e\alpha} \xleftrightarrow{\Omega} L_{e,g\alpha}$  leads to  $\Phi_c \xleftrightarrow{\Omega} \Phi_+$  and  $\Phi_o \xleftrightarrow{\Omega} -\Phi_-$ , so that  $K_+ = K_c$  and  $K_- = 1/K_o$ . The parameter  $K_+$  corresponds thus to the charge Luttinger parameter  $K_c$  which is given by Eq. (10) while  $K_- = 1/K_o \simeq 1$  according to our one-loop RG approach in region IV. Using the definition of the ODW along the  $x$  axis (41) and a similar one for the  $y$  axis, the leading asymptotics of the equal-time ODW correlation functions are then given by

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{O}_{\text{ODW}_x}(x)\mathcal{O}_{\text{ODW}_x}(0) \rangle &\sim \cos(2k_F x)x^{-K_c/N-1/(NK_o)}, \\ \langle \mathcal{O}_{\text{ODW}_y}(x)\mathcal{O}_{\text{ODW}_y}(0) \rangle &\sim \cos(2k_F x)x^{-K_c/N-1/(NK_o)},\end{aligned}\quad (50)$$

with  $K_o \simeq 1$ . The region IV with extended  $c = 2$  quantum criticality describes the competition between these two ODW instabilities.

### E. Harmonic line of the $p$ -band model

We now consider the harmonic line of the  $p$ -band model (4) with  $U_1 = 3U_2 > 0$  which plays a special role for repulsive interaction when  $N > 2$ . Indeed, according to the numerical RG phase diagram, depicted in Fig. 1, this harmonic line corresponds to the transition line between phase II and phase III. It belongs thus to the self-dual manifold of the duality  $\mathcal{D}_1\mathcal{D}_2$  symmetry which is defined as

$$\begin{aligned}J_L^{a,(x,z)} &\xrightarrow{\mathcal{D}_1\mathcal{D}_2} -J_L^{a,(x,z)}, \\ J_L^{a,y} &\xrightarrow{\mathcal{D}_1\mathcal{D}_2} J_L^{a,y}, \\ j_L^{(x,z)} &\xrightarrow{\mathcal{D}_1\mathcal{D}_2} -j_L^{(x,z)}, \\ j_L^y &\xrightarrow{\mathcal{D}_1\mathcal{D}_2} j_L^y, \\ J_L^a &\xrightarrow{\mathcal{D}_1\mathcal{D}_2} J_L^a.\end{aligned}\quad (51)$$

The self-duality condition gives a strong constraint on the interacting part of the Hamiltonian density which governs the IR physics of the harmonic line for repulsive interaction:

$$\mathcal{H}_{\text{so}}^{\text{int}*} = g_1 J_L^a J_R^a + g_4 J_L^{a,y} J_R^{a,y} + g_7 j_L^y j_R^y, \quad (52)$$

where the numerical RG flow gives  $f_1 = -f_4 = f^* > 0$  and  $f_7/f_1 \rightarrow 0$  along the harmonic line. After performing a  $\pi/2$  rotation along the  $x$  axis in the orbital space, the physics along the harmonic line is equivalent to that of region IV with central charge  $c = 2$ . Using the result (50), we deduce that the harmonic line, which has an extended  $U(1)_o$  symmetry, describes the competition between the ODW orders (37), (42) along the  $z$  and  $x$  axis. The leading asymptotics of equal-time ODW correlation functions (37), (42) acquire

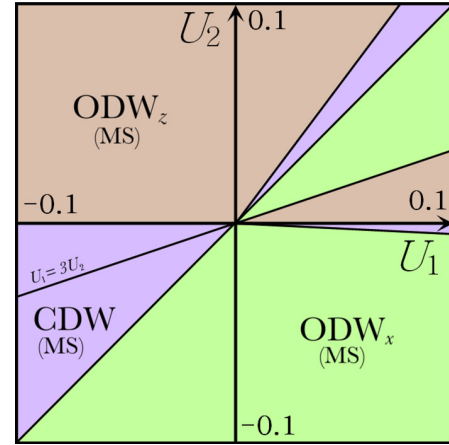


FIG. 3. Phase diagram of the  $p$ -band model (4) for  $N > 2$ . Same caption as Fig. 1. All phases are gapless with central charge  $c = 1$  and the dominant instabilities are indicated together with the competing MS one.

then an additional power-law contribution along the  $p$ -band harmonic line:

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{O}_{\text{ODW}_x}(x)\mathcal{O}_{\text{ODW}_x}(0) \rangle &\sim \cos(2k_F x)x^{-K_c/N-1/(NK_o)}, \\ \langle \mathcal{O}_{\text{ODW}_z}(x)\mathcal{O}_{\text{ODW}_z}(0) \rangle &\sim \cos(2k_F x)x^{-K_c/N-1/(NK_o)},\end{aligned}\quad (53)$$

with  $K_o \simeq 1$ . One observes that the two ODW order parameters are unified along the harmonic line. In this respect, the latter plays a similar role as the XY line in the spin-1/2 antiferromagnetic XYZ Heisenberg chain [53].

### F. Phase diagrams and quantum phase transitions

With all these results, we can now map out the zero-temperature phase diagram of the  $g - e$  model (1) and the  $p$ -band model (4) at incommensurate filling.

#### 1. $p$ -band model

Figure 3 presents the phase diagram of the  $p$ -band model for  $N > 2$  deduced from Fig. 1 and the analysis of dominant instabilities in regions I, II, and III.

The quantum phase transition between the  $\text{ODW}_x$  and  $\text{ODW}_z$  phases belongs to the self-dual manifold of the  $\mathcal{D}_1\mathcal{D}_2$  duality symmetry. The repulsive harmonic line  $U_1 = 3U_2 > 0$  corresponds to one transition. The analysis of that line reveals that the transition between  $\text{ODW}_x$  and  $\text{ODW}_z$  phases is governed by a  $c = 2$  CFT with gapless charge and orbital modes.

As seen in Fig. 3, the transitions between the CDW and  $\text{ODW}_x$  phases occur along the special line  $U_1 = U_2$  where the  $p$ -band model becomes equivalent to the two decoupled single-orbital  $SU(N)$  Fermi Hubbard model with coupling  $U_1$ . We then deduce that the  $U_1 = U_2 > 0$  (respectively  $U_1 = U_2 < 0$ ) line has a gapless behavior with central charge  $c = 2N$  (respectively  $c = 2$ ).

The nature of the phase transition between the CDW and  $\text{ODW}_z$  phases can be investigated by looking at the self-dual manifold of the duality  $\mathcal{D}_1$  symmetry. The RG flow is then attracted along the line  $f_1 = f_3 = f_6 = f^* > 0$ , and

$f_2 = f_4 = f_5 = f_7 = 0$ . The interacting part of the Hamiltonian density along this self-dual manifold reads as follows:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{so}}^{\text{int}*} &= \frac{\pi f^*}{N} \left( J_L^a J_R^a + 2J_L^{a,z} J_R^{a,z} + \frac{2}{N} j_L^z j_R^z \right) \\ &= \frac{2\pi f^*}{N} \left( J_{p_x,L}^a J_{p_x,R}^a + J_{p_y,L}^a J_{p_y,R}^a + \frac{1}{N} j_L^z j_R^z \right), \end{aligned} \quad (54)$$

where we have used the SU(N)<sub>1</sub> currents defined in Eq. (16) for each orbital  $m = p_x, p_y$ . A spin gap is formed for the nuclear-spin degrees of freedom which stems from the marginal relevant SU(N) current-current interaction. A gapless  $c = 2$  behavior then results from the spin-gap opening. This result can be simply understood from Fig. 3 as we observe that the  $U_2 = 0$  line with  $U_1 < 0$  is a transition line between the CDW and ODW<sub>z</sub> phases. The  $p$ -band model along that line corresponds to two decoupled attractive SU(N) Hubbard models so that a  $c = 2$  quantum critical behavior is thus expected in accordance with the previous self-dual analysis.

### 2. Isotropic $g - e$ model

We now focus on the  $g - e$  model (1) with  $t_g = t_e$  and  $U_{gg} = U_{ee}$ . The resulting phase diagram is given in Fig. 4.

The nature of the transition between the CDW and ODW<sub>z</sub> phases is identical to that of the  $p$ -band model. We then focus only on the phase transition with  $V_{\text{ex}}^{g-e} > 0$  and sufficiently strong  $U > 0$ , which is relevant to ytterbium atoms. According to Fig. 4, a phase transition between ODW<sub>z</sub> and the  $c = 2$  gapless phases might occur. The one-loop RG numerical analysis predicts that the transition is governed by the manifold with an enlarged SU(2)<sub>o</sub> orbital rotational symmetry with low-energy Hamiltonian:

$$\mathcal{H}_{\text{so}}^{\text{int}*} = \frac{\pi f^*}{N} \left( J_L^a J_R^a - \alpha J_L^{a,i} J_R^{a,i} + \beta \vec{j}_L \cdot \vec{j}_R \right), \quad (55)$$

where  $f^* > 0$  and  $0 < \alpha, \beta < 1$  ( $\alpha = \beta = 1/3$  when  $N \rightarrow +\infty$ ). The SU(N)<sub>2</sub> sector reaches the strong-coupling behavior before the others and the SU(N)<sub>2</sub> current-current interaction is a massive integrable model. A mass gap is thus generated for the nuclear spin degrees of freedom. After integrating out the latter ones, the analysis of the long-distance physics for the orbital degrees of freedom is similar to the one

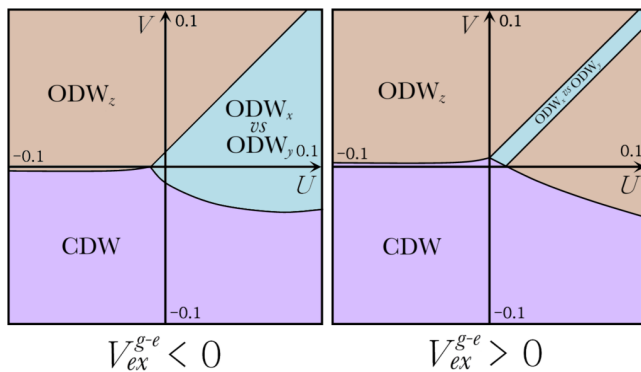


FIG. 4. Phase diagram for the  $g - e$  model (1) with  $t_g = t_e$  and  $U_{gg} = U_{ee}$  for  $N > 2$ . Same caption as Fig. 2.

in Refs. [14,44] and we find the low-energy theory:

$$\mathcal{H}_0^{\text{int}*} = \gamma \text{Tr} \Phi^{(1)} + \frac{\pi f^* \beta}{N} \vec{j}_L \cdot \vec{j}_R, \quad (56)$$

where  $\Phi^{(1)}$  is the spin-1 primary field of the SU(2)<sub>N</sub> CFT with scaling dimension  $4/(N+2)$  and  $\gamma > 0$ . The effective Hamiltonian (56) is the low-energy theory of the spin- $N/2$  SU(2) Heisenberg chain derived by Affleck and Haldane in Ref. [54]. As shown in Refs. [54,55], model (56) has a spectral gap, when  $N$  is even, while it describes a massless flow to the SU(2)<sub>1</sub> CFT when  $N$  is odd. We thus conclude that the transition is first order (respectively critical with  $c = 1$  behavior) in the  $N$  even (respectively odd) case.

### 3. Anisotropic $g - e$ model

As seen in Sec. III B, the anisotropic  $g - e$  model for generic repulsive interactions ( $U_{gg} > 0$ ,  $U_{ee} > 0$ ,  $V_{\text{ex}}^{g-e} > 0$ ) has critical properties in the  $2N$ -component Luttinger liquid universality class. All degrees of freedom are gapless in that phase directly relevant to ytterbium ultracold atoms since one expects  $V_{\text{ex}}^{g-e} > 0$  in that case [27,28]. The leading instability of that phase is an  $2k_F$  CDW (31) or  $2k_F$  SU(N) spin-density wave (SDW) with continuum order parameter:

$$S_{2k_F}^A = R_{m\alpha}^\dagger T_{\alpha\beta}^A L_{m\beta}, \quad (57)$$

with  $m = g, e$ . Using the representation (46) and the change of basis (19), we obtain the leading asymptotics of the equal-time density-density correlation function:

$$\langle n(x)n(0) \rangle \sim \sum_{m=g,e} \cos(2k_{Fm}x) x^{-\Delta_m}, \quad (58)$$

with  $N\Delta_m = 2(N-1) + \bar{v}(K_c + K_o) \frac{K_m}{v_{\text{eff}}}$ . We have obtained a similar estimate for the correlations which involve the  $2k_F$  SDW operator. At this point, these two correlation functions have the same power-law decay. The logarithmic corrections will lift this degeneracy and we expect that the SDW operator will be the dominant instability for repulsive interactions as in the SU(2) case [34,42].

The second possible phase for the anisotropic  $g - e$  model is a  $c = 2$  gapless phase when  $V_{\text{ex}}^{g-e} < 0$ . As discussed in Sec. III B, there is now a spin gap for the nuclear-spin degrees of freedom and the two gapless modes are the bosonic fields  $\Phi_c$  and  $\Phi_o$  of Eq. (20). A two-component Luttinger liquid governs then the low-energy properties of this phase. The physics is very similar to that of Region IV of Sec. IV D since the formation of the spin gap in the nuclear-spin sector is described by the same marginal relevant current-current interaction of Eq. (43). We deduce that the  $c = 2$  gapless phase with  $V_{\text{ex}}^{g-e} < 0$  corresponds to the competition between the ODWs along the  $x$  axis and  $y$  axis (45).

## V. CONCLUSION

We have presented a detailed field-theory analysis of 1D two-orbital SU(N) fermionic models which governs the low-energy properties of ultracold alkaline-earth-like fermionic atoms loading into a 1D optical lattice.

Using a formalism which takes explicitly into account the non-Abelian SU(N)<sub>s</sub> symmetry, we have found that the U(1)<sub>c</sub>

charge sector decouples from the orbital-nuclear spin ones at incommensurate filling. For the  $p$ -band model, a spectral gap is formed in the latter sector and as a consequence, most of the phase diagrams are occupied by Luttinger liquid phases with a single gapless bosonic mode (hence a central charge  $c = 1$ ). More gapless degrees of freedom can be found along phase transition lines with  $U(1)_o$  invariance. In this respect, the harmonic line  $U_1 = 3U_2 > 0$  of the  $p$ -band model plays a special role with the existence of two gapless modes. We have shown that this line describes the competition between two different orbital density waves when  $N > 2$ .

The analysis of the  $g - e$   $SU(N)$  model is similar and generically an  $SU(N)$  spin gap for the nuclear-spin degrees of freedom is formed. However, for repulsive interactions and in the anisotropic case  $U_{gg} \neq U_{ee}$ , a situation which is directly relevant to experiments with alkaline-earth-like fermionic atoms, a fully gapless phase with central charge  $c = 2N$  occurs with  $2N$ -component Luttinger liquid physics.

We have clarified the nature of the dominant instability in each phase of two-orbital  $SU(N)$  fermionic models. In stark contrast to the  $N = 2$  case, no dominant pairing instability is found. The hallmark of these incommensurate two-orbital  $SU(N)$  models is the competition between various density instabilities when  $N > 2$ . The leading superfluid instability turns out to be a molecular one found by bound states of  $2N$  fermions as in the single-orbital attractive 1D  $SU(2N)$  fermionic Hubbard model [40,41].

In the light of the very recent experimental progress with strontium or ytterbium cold fermionic quantum gases, we hope that it will be possible in the future to unveil part of the rich phase diagram of two-orbital  $SU(N)$  models that we describe in this paper.

#### ACKNOWLEDGMENTS

The authors are grateful to S. Capponi, M. Moliner, and K. Totsuka for important discussions. We would like to thank CNRS (France) for financial support (PICS grant).

- 
- [1] M. A. Cazalilla, A. F. Ho, and M. Ueda, *New J. Phys.* **11**, 103033 (2009).
- [2] A. V. Gorshkov, M. Hermele, V. Gurarie, C. Xu, P. S. Julienne, J. Ye, P. Zoller, E. Demler, M. D. Lukin, and A. M. Rey, *Nat. Phys.* **6**, 289 (2010).
- [3] B. J. DeSalvo, M. Yan, P. G. Mickelson, Y. N. Martinez de Escobar, and T. C. Killian, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 030402 (2010).
- [4] S. Taie, Y. Takasu, S. Sugawa, R. Yamazaki, T. Tsujimoto, R. Murakami, and Y. Takahashi, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 190401 (2010).
- [5] S. Taie, R. Yamazaki, S. Sugawa, and Y. Takahashi, *Nat. Phys.* **8**, 825 (2012).
- [6] C. Hofrichter, L. Riegger, F. Scazza, M. Höfer, D. Rio Fernandes, I. Bloch, and S. Fölling, [arXiv:1511.07287](https://arxiv.org/abs/1511.07287).
- [7] G. Pagano, M. Mancini, G. Cappellini, P. Lombardi, F. Schafer, H. Hu, X.-J. Liu, J. Catani, C. Sias, M. Inguscio, and L. Fallani, *Nat. Phys.* **10**, 198 (2014).
- [8] M. Hermele and V. Gurarie, *Phys. Rev. B* **84**, 174441 (2011).
- [9] M. Hermele, V. Gurarie, and A. M. Rey, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 135301 (2009).
- [10] M. A. Cazalilla and A. M. Rey, *Rep. Prog. Phys.* **77**, 124401 (2014).
- [11] C. Xu, *Phys. Rev. B* **87**, 144421 (2013).
- [12] H. Nonne, M. Moliner, S. Capponi, P. Lecheminant, and K. Totsuka, *Europhys. Lett.* **102**, 37008 (2013).
- [13] K. Duivenvoorden and T. Quella, *Phys. Rev. B* **87**, 125145 (2013).
- [14] V. Bois, S. Capponi, P. Lecheminant, M. Moliner, and K. Totsuka, *Phys. Rev. B* **91**, 075121 (2015).
- [15] T. Morimoto, H. Ueda, T. Momoi, and A. Furusaki, *Phys. Rev. B* **90**, 235111 (2014).
- [16] S. Capponi, P. Lecheminant, and K. Totsuka, *Ann. Phys. (N.Y.)* **367**, 50 (2016).
- [17] K. Tanimoto and K. Totsuka, [arXiv:1508.07601](https://arxiv.org/abs/1508.07601).
- [18] A. Roy and T. Quella, [arXiv:1512.05229](https://arxiv.org/abs/1512.05229).
- [19] A. Derevianko and H. Katori, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 331 (2011).
- [20] M. Foss-Feig, M. Hermele, V. Gurarie, and A. M. Rey, *Phys. Rev. A* **82**, 053624 (2010).
- [21] L. Isaev and A. M. Rey, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 165302 (2015).
- [22] M. Nakagawa and N. Kawakami, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 165303 (2015).
- [23] R. Zhang, D. Zhang, Y. Cheng, W. Chen, P. Zhang, and H. Zhai, *Phys. Rev. A* **93**, 043601 (2016).
- [24] I. Kuzmenko, T. Kuzmenko, Y. Avishai, and G.-B. Jo, *Phys. Rev. B* **93**, 115143 (2016).
- [25] K. I. Kugel and D. I. Khomskii, *Sov. Phys. Usp.* **25**, 231 (1982).
- [26] X. Zhang, M. Bishof, S. L. Bromley, C. V. Kraus, M. S. Safronova, P. Zoller, A. M. Rey, and J. Ye, *Science* **345**, 1467 (2014).
- [27] F. Scazza, C. Hofrichter, M. Höfer, P. C. De Groot, I. Bloch, and S. Fölling, *Nat. Phys.* **10**, 779 (2014).
- [28] G. Cappellini, M. Mancini, G. Pagano, P. Lombardi, L. Livi, M. Siciliani de Cumis, P. Cancio, M. Pizzocaro, D. Calonico, F. Levi, C. Sias, J. Catani, M. Inguscio, and L. Fallani, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 120402 (2014).
- [29] M. Höfer, L. Riegger, F. Scazza, C. Hofrichter, D. R. Fernandes, M. M. Parish, J. Levinsen, I. Bloch, and S. Fölling, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 265302 (2015).
- [30] G. Pagano, M. Mancini, G. Cappellini, L. Livi, C. Sias, J. Catani, M. Inguscio, and L. Fallani, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 265301 (2015).
- [31] R. Zhang, Y. Cheng, H. Zhai, and P. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 135301 (2015).
- [32] K. Kobayashi, M. Okumura, Y. Ota, S. Yamada, and M. Machida, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 235302 (2012).
- [33] K. Kobayashi, Y. Ota, M. Okumura, S. Yamada, and M. Machida, *Phys. Rev. A* **89**, 023625 (2014).
- [34] A. O. Gogolin, A. A. Nersisyan, and A. M. Tsvelik, *Bosonization and Strongly Correlated Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1998).
- [35] E. Witten, *Commun. Math. Phys.* **92**, 455 (1984).
- [36] V. G. Knizhnik and A. B. Zamolodchikov, *Nucl. Phys. B* **247**, 83 (1984).



- [37] I. Affleck, *Nucl. Phys. B* **265**, 409 (1986).
- [38] V. Bois, S. Capponi, P. Lecheminant, and M. Moliner, *Phys. Rev. B* **92**, 075140 (2015).
- [39] E. Szirmai, *Phys. Rev. B* **88**, 195432 (2013).
- [40] S. Capponi, G. Roux, P. Lecheminant, P. Azaria, E. Boulat, and S. R. White, *Phys. Rev. A* **77**, 013624 (2008).
- [41] G. Roux, S. Capponi, P. Lecheminant, and P. Azaria, *Eur. Phys. J. B* **68**, 293 (2009).
- [42] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension* (Clarendon Press, Oxford, UK, 2004).
- [43] I. Affleck and A. W. W. Ludwig, *Nucl. Phys. B* **352**, 849 (1991).
- [44] H. Nonne, P. Lecheminant, S. Capponi, G. Roux, and E. Boulat, *Phys. Rev. B* **84**, 125123 (2011).
- [45] H.-H. Lin, L. Balents, and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. B* **58**, 1794 (1998).
- [46] R. M. Konik, H. Saleur, and A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. B* **66**, 075105 (2002).
- [47] D. J. Gross and A. Neveu, *Phys. Rev. D* **10**, 3235 (1974).
- [48] N. Andrei and J. H. Lowenstein, *Phys. Lett. B* **90**, 106 (1980).
- [49] E. Boulat, P. Azaria, and P. Lecheminant, *Nucl. Phys. B* **822**, 367 (2009).
- [50] P. Di Francesco, P. Mathieu, and D. Sénéchal, *Conformal Field Theory* (Springer, Berlin, 1997).
- [51] P. Lecheminant, E. Boulat, and P. Azaria, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 240402 (2005).
- [52] P. Lecheminant, P. Azaria, and E. Boulat, *Nucl. Phys. B* **798**, 443 (2008).
- [53] T. Giamarchi and H. J. Schulz, *J. Phys. (France)* **49**, 819 (1988).
- [54] I. Affleck and F. D. M. Haldane, *Phys. Rev. B* **36**, 5291 (1987).
- [55] R. M. Konik, T. Pálmai, G. Takács, and A. M. Tsvelik, *Nucl. Phys. B* **899**, 547 (2015).

## **D** Articles réalisés dans le cadre de cette thèse

En plus de l'article Ref. [208] insérée dans l'Ann. C et déjà publié, l'article Ref. [198] et son *Supplemental Material* Ref. [136] ont, eux aussi, été réalisés dans le cadre de cette thèse. Ce dernier traite de la potentielle implémentation expérimentale du modèle double-puits (thème abordé Sec. 1.5.2), de l'approche du couplage fort du modèle du Chap. 4 et des résultats DMRG associés (présentés Sec. 3.3). La version arXiv est insérée ci-dessous mais le *Supplemental Material* de cette version ne contient pas les discussions sur la classification de  $\text{PSU}(N)$  reprise en partie Sec. 1.4.2 et l'approche heuristique Sec. 4.2.3 qui sont seulement incluses dans la version actuellement soumise. L'approche de couplage fort du double-puits est examinée plus en détails, en plus de son approche de couplage faible (abordée Chap. 3) dans un article en cours de rédaction : Ref. [220] (et donc, qui n'est pas inclus ici). Enfin, l'étude du modèle  $3 - \bar{3}$  Ref. [275] est encore en préparation même si une version préliminaire est incluse Chap 5.

# “Haldane” phases with ultracold fermionic atoms in double-well optical lattices

P. Fromholz,<sup>1</sup> S. Capponi,<sup>2</sup> P. Lecheminant,<sup>1</sup> D. J. Papoular,<sup>1</sup> and K. Totsuka<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation, CNRS UMR 8089, Université de Cergy-Pontoise, Site de Saint-Martin, F-95300 Cergy-Pontoise Cedex, France

<sup>2</sup>Laboratoire de Physique Théorique, CNRS UMR 5152, Université Paul Sabatier, F-31062 Toulouse, France.

<sup>3</sup>Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kitashirakawa Oiwake-Cho, Kyoto 606-8502, Japan.

(Dated: October 2, 2017)

We propose to realize one-dimensional topological phases protected by  $SU(N)$  symmetry using alkali or alkaline-earth atoms loaded into a bichromatic optical lattice. We derive a realistic model for this system and investigate it theoretically. Depending on the parity of  $N$ , two different classes of symmetry-protected topological (SPT) phases are stabilized at half-filling for physical parameters of the model. For even  $N$ , the celebrated spin-1 Haldane phase and its generalization to  $SU(N)$  are obtained with no local symmetry breaking. In stark contrast, at least for  $N = 3$ , a new class of SPT phases, dubbed chiral Haldane phases, that spontaneously break inversion symmetry, emerge with a two-fold ground-state degeneracy. The latter ground states with open-boundary conditions are characterized by different left and right boundary spins which are related by conjugation. Our results show that topological phases are within close reach of the latest experiments on cold fermions in optical lattices.

PACS numbers: 75.10.Pq, 37.10.Jk, 11.30.Ly,

*Introduction* – Symmetry protected topological (SPT) phases have attracted a lot of attention over recent years. These new quantum phases exhibit short-range entanglement and possess only conventional gapped excitations in the bulk, while hosting non-trivial symmetry-protected surface states [1, 2]. A paradigmatic example of one-dimensional (1D) bosonic SPT phases is the Haldane phase found in the spin-1 antiferromagnetic spin chain [3]. In the bulk, the phase looks ordinary, but, in the case of an open-boundary condition [4] or when the chain is cut by doping impurities [5], non-trivial spin-1/2 edge states appear. This phase is protected by the  $SO(3)$  symmetry underlying the Heisenberg model, and more generally, by at least one of the three discrete symmetries: the dihedral group of  $\pi$ -rotations along the  $x, y, z$  axes, time-reversal or inversion symmetries [6, 7].

A fairly complete understanding of 1D bosonic SPT phases has been obtained through various approaches such as group cohomology, matrix-product states, entanglement spectroscopy, and field-theoretical arguments [8–12]. The possible 1D SPT phases associated with a given protecting symmetry  $G$  are classified by its projective representations, i.e., the second cohomology group  $\mathcal{H}^2(G, U(1))$ . For instance, in the presence of  $SO(3)$  symmetry, there is a  $\mathbb{Z}_2$  classification and the Haldane phase is the only SPT phase whose edge states obey a non-trivial projective representation [6, 7].

Richer SPT phases can be obtained when  $G$  is a more general Lie group. For instance, the group  $SU(N)$  leads to a  $\mathbb{Z}_N$  classification predicting  $N - 1$  non-trivial SPT phases [13] protected by  $SU(N)$  ( $PSU(N)$ , more precisely [14]) or by its discrete subgroup  $\mathbb{Z}_N \times \mathbb{Z}_N$  [15, 16]. The edge states of these SPT phases are labeled by the inequivalent projective representations of  $SU(N)$  which are specified by  $\mathbb{Z}_N$  quantum numbers  $n_{\text{top}} = n_Y \pmod{N}$ , with  $n_Y$  being the number of boxes in the Young diagram corresponding to the representation of the boundary spins [13, 17]. In stark contrast to the  $N = 2$  case, i.e.  $G = SO(3)$ , where all the projective repre-

sentations are self-conjugate, the left and right edge states of the  $SU(N)$  SPT phases with  $N > 2$  might belong to *different* projective representations that are related by conjugation. This leads to an interesting class of SPT phases, dubbed chiral Haldane ( $\chi$ H), which spontaneously break the inversion symmetry. These phases are partially characterized by local order parameters and exist in pairs; in one phase, the left and right edge states transform respectively in the  $SU(N)$  representation  $\mathcal{R}$  and its conjugate  $\bar{\mathcal{R}}$ , and vice-versa in the other [18–21]. In the following, we label the SPT phases by the number of boxes in the Young diagrams as  $(n_Y(\mathcal{R}), n_Y(\bar{\mathcal{R}})) \pmod{N}$ . In reflection-symmetric systems, the two topological ground states  $(n_Y(\mathcal{R}), n_Y(\bar{\mathcal{R}}))$  and  $(n_Y(\bar{\mathcal{R}}), n_Y(\mathcal{R}))$  are degenerate.

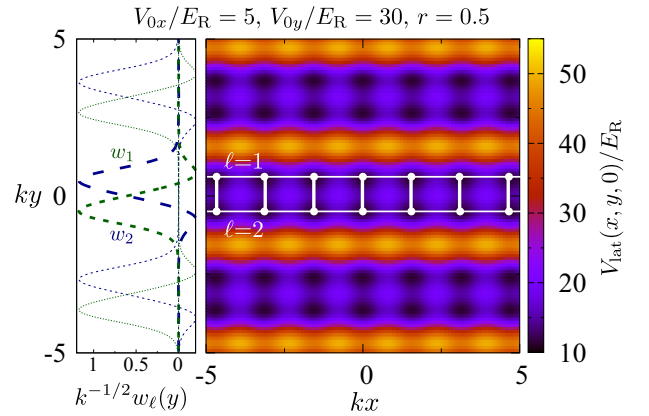


FIG. 1. (Color online) The potential  $V_{\text{lat}}$  in the  $xy$  plane (right panel): three double-well ladder systems are visible. The two independent Wannier functions  $w_1(y)$  and  $w_2(y)$  along  $y$  (left, green and blue) are centered on the two chains ( $\ell = 1, 2$ ). Lengths and energies are respectively expressed in units of the reduced wavelength  $1/k$  and the recoil energy  $E_R = \hbar^2 k^2 / 2m$ . This optical potential yields  $t_{\perp}/t = 2.9$  and  $V/U = 0.086$ .

In this Letter, we propose an implementation of the Haldane phase ( $N = 2$ ) and its generalizations to even- $N$ , as well as the  $\chi$ H phases for  $N = 3$ , with half-filled ultracold fermions loaded into 1D double-well optical lattices. Thanks to their cleanliness and controllability, these systems offer an ideal framework for the realization of the SPT phases, which requires precise symmetries. The  $N = 2$  case may be realized using the two lowest hyperfine states of  ${}^6\text{Li}$ . Larger values of  $N$  may be explored experimentally using  ${}^{87}\text{Sr}$  or  ${}^{173}\text{Yb}$  atoms in their  ${}^1S_0$  ground states, which possess  $\text{SU}(N)$ -symmetry ( $N \leq 10$ ) [22–28]. By means of complementary strong-coupling and numerical techniques, we show that, for all even  $N \geq 2$  and (at least)  $N = 3$ , fully gapped featureless Mott-insulating phases show up in the phase diagram of the underlying lattice fermion models with repulsive interactions. The phases occurring for even- $N$  are identified as the Haldane phase ( $N = 2$ ) or its generalization ( $N \geq 4$ ). On the other hand, for odd  $N$  (at least for  $N = 3$ ), we find that  $\chi$ H phases emerge breaking the inversion symmetry spontaneously. As we will see, these SPT phases are stabilized for realistic parameters of the model, a result which paves the way to their experimental investigation for  $N \leq 10$ .

*Model* – We consider ultracold (alkali, alkaline-earth, or ytterbium) fermions with  $\text{SU}(N)$  symmetry, trapped inside the following potential representing a three-dimensional array of double wells (see Fig. 1):

$$V_{\text{lat}}(x, y, z) = V_{0y} [\sin^2(ky) + r \cos^2(2ky)] + V_{0x} \sin^2(2kx) + V_{0z} \sin^2(2kz), \quad (1)$$

where  $1/k$  denotes the reduced wavelength and  $r$  is a tunable parameter. This potential can be realized optically, using a bichromatic lattice [29] or exploiting interference patterns involving two light beams with different polarizations [30]. Choosing sufficiently large values of  $V_{0y}$  and  $V_{0z}$ , we obtain a single 1D two-leg ladder whose legs ( $\ell = 1$  or  $2$ ) and rungs (labeled  $i$ ) are respectively parallel to the  $x$  and  $y$  axes.

We restrict our analysis to the lowest bands in the  $x$  and  $y$  directions. In the  $y$ -direction, we keep the two lowest bands so as to resolve the two minima of each double well. This leads to the following lattice model:

$$\mathcal{H}_0 = -t \sum_{i,\ell} \sum_{\alpha=1}^N \left( c_{\ell\alpha,i+1}^\dagger c_{\ell\alpha,i} + \text{H.c.} \right) - \mu \sum_i n_i - t_\perp \sum_i \sum_{\alpha=1}^N \left( c_{1\alpha,i}^\dagger c_{2\alpha,i} + \text{H.c.} \right), \quad (2)$$

where the operator  $c_{\ell\alpha,i}^\dagger$  creates a fermion in the nuclear-spin state  $\alpha (= 1, \dots, N)$  on the leg  $\ell (= 1, 2)$  and the rung  $i$ . In Eq. (2), the total density operator on the rung  $i$  is  $n_i = \sum_{\ell\alpha} c_{\ell\alpha,i}^\dagger c_{\ell\alpha,i} = \sum_{\ell\alpha} n_{\ell\alpha,i}$ , and the tunneling amplitudes  $t$  along a leg and  $t_\perp$  along a rung are different in general. We now account for  $\text{SU}(N)$ -symmetric 2-body interactions modeled by the contact Hamiltonian  $g \sum_{\alpha \neq \beta} \int d^3r n_\alpha(\mathbf{r}) n_\beta(\mathbf{r})$ ,

where  $n_\alpha(\mathbf{r})$  is the density operator for fermions in the internal nuclear state  $\alpha$  [22–24]. Retaining the same bands as in Eq. (2), we obtain the following interaction Hamiltonian:

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \frac{U}{2} \sum_i \sum_{\ell=1}^2 \sum_{\alpha \neq \beta} n_{\ell\alpha,i} n_{\ell\beta,i} + V \sum_i \sum_{\alpha \neq \beta} \left\{ n_{1\alpha,i} n_{2\beta,i} + c_{1\alpha,i}^\dagger c_{2\beta,i}^\dagger c_{1\beta,i} c_{2\alpha,i} + \frac{1}{2} \left( c_{1\alpha,i}^\dagger c_{1\beta,i}^\dagger c_{2\beta,i} c_{2\alpha,i} + \text{H.c.} \right) \right\}, \quad (3)$$

where  $U$  is the on-site interaction, and  $V$  encodes the off-site interaction between the two sites on a given rung. There are three types of off-site processes: (i) density-density interaction, (ii) spin-exchange interaction, and (iii) pair-hopping of fermions with different spins from one leg to the other. Hence, Eq. (3) can be viewed as a generalized two-leg fermionic  $\text{SU}(N)$  ladder model with pair-hopping processes. The coefficients  $t$ ,  $t_\perp$ ,  $U$  and  $V$  characterizing the lattice model  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}$  are determined by the Wannier functions corresponding to  $V_{\text{lat}}(\mathbf{r})$  [31], which we calculate numerically following Ref. [32]. In particular, along the rung direction  $y$ , we choose the Wannier functions  $w_1(y)$  and  $w_2(y)$  to be real and localized on the legs  $\ell = 1$  and  $2$ , respectively (see Fig. 1). The orthogonality of the Wannier functions requires that  $w_1(y)$  and  $w_2(y)$  have finite extent around their center with changing signs. The coefficient  $V$  is proportional to  $g \int dy w_1^2 w_2^2$ , and is finite because of a non-zero overlap between the positive functions  $w_1^2$  and  $w_2^2$ . Besides the above three interactions, density-assisted hopping terms [33], proportional to the integral  $g \int dy w_1 w_2^3$ , are also present. However, now the sign change of the Wannier functions strongly suppresses the integral, so that we can safely drop them in Eq. (3). The ratios  $t_\perp/t$  and  $V/U$  are fixed by the optical potential  $V_{\text{lat}}(x, y, z)$ :  $t_\perp/t$  can be tuned from 1 to a few units by varying the parameter  $r$  in Eq. (1) [34], whereas  $V/U$  is of the order of  $10^{-1}$ . The ratio  $U/t$  can be tuned using a magnetic Feshbach resonance in the case of alkali atoms [35], or an optical Feshbach resonance for alkaline-earth atoms [36, 37].

*Strong-coupling analysis* – We now consider the atomic limit of the model (3) to investigate the possible existence of SPT phases in the large- $U$  limit. If we introduce the antisymmetric and symmetric combinations  $d_{1\alpha,i} = (c_{1\alpha,i} - c_{2\alpha,i})/\sqrt{2}$  and  $d_{2\alpha,i} = (c_{1\alpha,i} + c_{2\alpha,i})/\sqrt{2}$ ,  $\mathcal{H}$  takes the form of the  $p$ -band model of Refs. [38–40] in an (effective) orbital magnetic field proportional to  $t_\perp$ :

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i,\alpha} \sum_{m=1,2} \left( d_{m\alpha,i}^\dagger d_{m\alpha,i+1} + \text{H.c.} \right) - \left( \mu + \frac{U+V}{2} \right) \sum_i n_i + 2t_\perp \sum_i T_i^z + \frac{U+V}{4} \sum_i n_i^2 + 2V \sum_i (T_i^z)^2 + (U-V) \sum_i (T_i^x)^2, \quad (4)$$

where  $T_i^a = \frac{1}{2} \sum_{m,n,\alpha} d_{m\alpha,i}^\dagger \sigma_{mn}^a d_{n\alpha,i}$  is the pseudo-spin operator for the orbital degrees of freedom and  $\sigma^a (a = x, y, z)$  the Pauli matrices. In what follows, we restrict ourselves to half-filling (i.e.,  $N$  fermions per rung). The atomic-limit ( $U, V, t_\perp \gg t$ ) energy spectrum of the model (4) is characterized by the  $SU(N)$  and the pseudo-spin ( $\mathbf{T}$ ) irreducible representations [41]. For even  $N$ , in most part of the region  $U > V > 0$ , the orbital pseudo-spin  $\mathbf{T}$  is quenched to a singlet, while the  $SU(N)$  spin is maximized into a self-conjugate representation of  $SU(N)$  described by a Young diagram with two columns with lengths  $N/2$  [40]. To second order in  $t$ , the effective Hamiltonian is given by the  $SU(N)$  Heisenberg model [40]:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(\text{even})} = J \sum_i \sum_{A=1}^{N^2-1} S_{i+1}^A S_i^A, \quad (5)$$

where  $J = 2t^2/(U + V)$  is the spin-exchange constant, and  $S_i^A$  are the local  $SU(N)$  spin operators belonging to the self-conjugate representation mentioned above. For  $N = 2$ , Eq. (5) reduces to the spin-1 Heisenberg chain, whose ground state is in the Haldane phase. For generic even  $N$ , the ground-state properties of the model (5) have recently been investigated in detail in Refs. [17, 40, 42–44], where the ground state has been identified with an  $SU(N)$  SPT phase with  $\mathbb{Z}_N$  quantum numbers  $n_{\text{top}} = N/2 \pmod{N}$  characterized by edge states transforming in the antisymmetric  $(N/2)$ -tensor representation of  $SU(N)$ . Remarkably, for odd  $N$ , the orbital degrees of freedom play a crucial role. To see this, let us consider the  $N = 3$  case and start from  $U = V$  and  $t_\perp = 0$ , where each site of a rung is occupied either by  $\mathbf{3}$  ( $\square$ ) or  $\bar{\mathbf{3}}$  ( $\blacksquare$ ) in the atomic-limit ground state. Regarding  $\mathbf{3}$  and  $\bar{\mathbf{3}}$  as the two orbital states (e.g., up and down) and carrying out the second-order perturbation in  $U - V$  and  $t_\perp$ , we obtain a spin-orbital effective Hamiltonian, which, when  $U > V$ , reduces to an  $SU(3)$  two-leg ladder with different spins ( $\mathbf{3}$  and  $\bar{\mathbf{3}}$ ) on the two legs [45]. The point is that the couplings now depend on the orbital part and, after tracing it out, the system further reduces to the two-leg ladder with diagonal interactions. We numerically investigated the model to find that the  $\chi\text{H}$  phase is stabilized *only* when finite diagonal interactions exist [45]. A relatively large  $t_\perp (> 0)$  freezes the orbital pseudo-spins and the diagonal couplings, that are crucial to the SPT phase, disappear. In fact, both the strong-coupling expansion assuming large  $t_\perp$  and direct numerical simulations for large enough  $t_\perp$  found only a featureless trivial phase [41] in agreement with the above scenario.

*Numerical calculations* – We mapped out the zero-temperature phase diagram of the model (4) at half-filling by means of density-matrix renormalization-group (DMRG) calculations [46]. We have used open boundary conditions, keeping between 2000 and 4000 states depending on the model parameters and sizes in order to keep a discarded weight below  $10^{-5}$ . We fix  $t = 1$  as the unit of energy and, instead of the full  $SU(N)$  symmetry, we have implemented the  $U(1)^N$  symmetry corresponding to the conservation of each species of

fermions ( $\alpha = 1, \dots, N$ ). Starting with the simplest  $N = 2$  case, we reveal that the  $SU(N)$  SPT phases, predicted in the strong-coupling regime, persist down to realistic regions. Figure 2(a) shows the presence of exponentially localized edge states in the spin-resolved local densities  $n_{\ell\alpha,i}$ , which is a clear signature of the spin-Haldane (SH) phase with spin-1/2 edge states. The possible SPT phases in the  $N = 3$  and

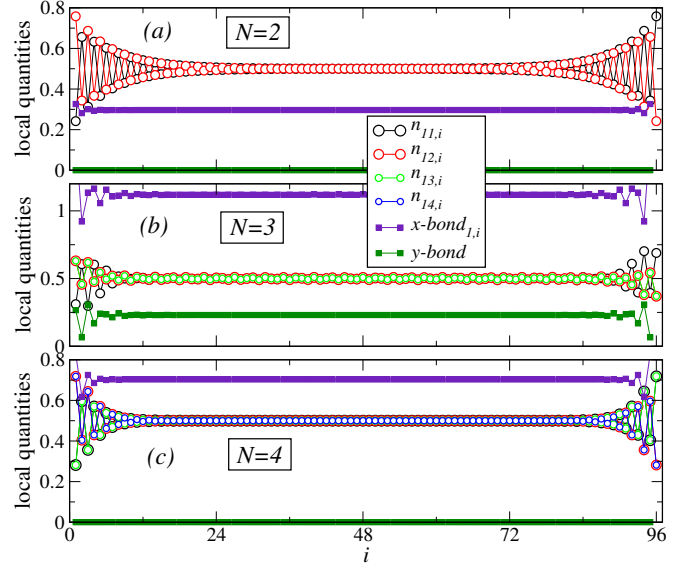


FIG. 2. (Color online) Local densities and bond energies obtained by DMRG for a chain of length  $L = 96$  in the cases  $N = 2, 3$  and  $4$ , using  $t_\perp = 1, U = 12, V = 4$ . The densities and  $x$ -bond (i.e., rung) energies are found to be equal on both chains, and we show them for  $\ell = 1$ . The clear evidence of edge states signals the three SPT phases.

$N = 4$  cases can also be probed using their particular edge states [Fig. 2(b,c)], or their corresponding entanglement spectra (ES) [Fig. 3(b,c)]. The precise nature of the edge states can be inferred from Fig. 2 and, for  $SU(3)$ , we find that the phase for  $t = t_\perp = 1$  is a  $\chi\text{H}$  phase  $(n_Y(\mathcal{R}), n_Y(\bar{\mathcal{R}})) = (1, 2)$  with the left and right edge states respectively transforming in the  $\mathbf{3}$  and  $\bar{\mathbf{3}}$  representations of  $SU(3)$  [41]. As has been mentioned above, when the system is inversion-symmetric, this and the second  $\chi\text{H}$  phase  $(2, 1)$  must be degenerate; DMRG simulations randomly pick one of the two minimally entangled states. In fact, we found that another run with a different sweeping procedure gave access to the second one [41]. This signals the emergence of the  $\chi\text{H}$  phase  $(1, 2)$  or  $(2, 1)$  for  $t = t_\perp = 1$  which spontaneously breaks the inversion symmetry [18, 19]. Similarly, for  $N = 4$ , the edge states in Fig. 2(c) strongly suggest one of the three SPT phases  $(2, 2)$  protected by  $SU(4)$ . Specifically, the edge states are found to belong to the self-conjugate antisymmetric representation of  $SU(4)$  with dimension 6, in agreement with previous studies on the  $N = 4$  case [17, 40, 42, 43]. In order to provide additional insight into these SPT phases, we plot their ES obtained by cutting the chain in the middle and computing the Schmidt eigenvalues of the ground-state wavefunction. The ES of the SH phase is



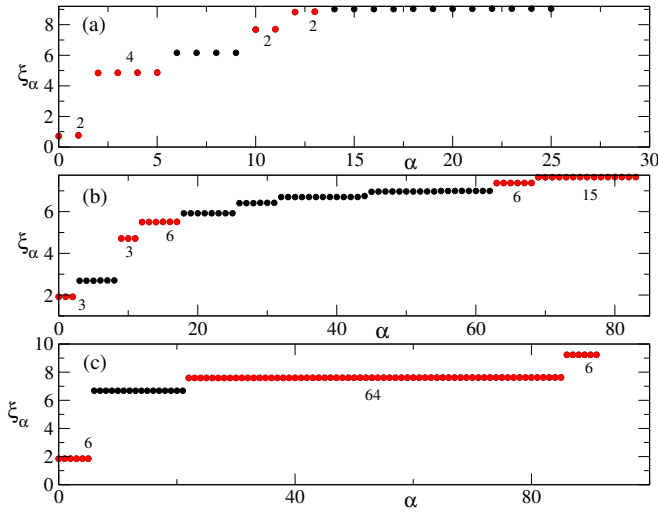


FIG. 3. (Color online) The ES obtained by DMRG on  $L = 48$  chain in the  $N = 2, 3$  and  $4$  model (from top to bottom) using  $t_\perp = 1$ ,  $U = 20$ ,  $V = 2$ . In all three cases, the system is in the SPT phase. Bosonic (fermionic) levels are shown by red (black) circles. Numbers denote the number of quasi-degenerate levels.

known to exhibit *double-degeneracy* for all levels [11], which is a signature of the underlying SPT phase. Figure 3(a) shows the correct even-fold degeneracy in the low-lying part of the entanglement spectrum, which further confirms the presence of the SH phase. A remark is in order about the interpretation of ES shown in Fig. 3. Since our ES are obtained for the fermionic model (4), some of the higher-lying levels belong to the “fermionic sector” of the spectrum and may not exhibit the structure expected in bosonic SPT phases, as is demonstrated in, e.g., Refs. [47, 48]. To resolve this, we separate the bosonic sector (shown by red circles) from the fermionic one (black circles) in Fig. 3. The degeneracy structure of the bosonic sector now perfectly agrees with what we expect for the corresponding SPT phases. In view of the recent developments in entanglement measurements in cold-atom settings [49], our proposal would make precise characterization of SPT phases possible in experiments. In order to show that the  $SU(N)$  SPT phases found above are not restricted to the strong-coupling regime, we plot their extent as a function of  $U$  along the physical line  $U/V = 10$  in Fig. 4 at fixed  $t_\perp = t (= 1)$ . These phases occur in the large- $U$  regime and, for weaker interactions, quantum phase transitions are expected towards fully gapped trivial or dimerized phases which break the translation symmetry spontaneously.

*Summary and experimental prospects* – We have introduced a simple one-dimensional microscopic model to describe alkali or alkaline-earth ultracold fermionic atoms loaded into a bichromatic optical lattice. Using analytical and numerical insight, we have shown how  $SU(N)$  SPT phases can emerge in a large range of parameters. This provides a physical route to realize the SH phase ( $N = 2$ ), its generalization for even  $N$ , as well as the  $\chi$ H phase with  $N = 3$  which breaks sponta-

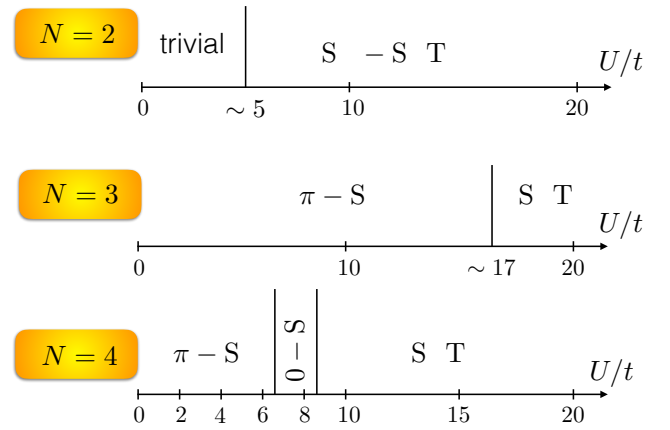


FIG. 4. (Color online) Phase diagram for  $N = 2, 3$  and  $4$  at fixed  $t_\perp = t = 1$ , as a function of  $U$  (with  $U/V = 10$ , see text) obtained from DMRG simulations. In all three cases, we find different SPT phases at strong coupling. For weaker interactions, we find trivial non-degenerate gapped phases, or the out-of-phase (respectively in-phase) dimerized spin-Peierls-like  $\pi$ -SP (respectively 0-SP) phase.

neously the inversion symmetry. The experimental realization of the SH phase with  $N = 2$  may be obtained using the two lowest hyperfine states of  ${}^6\text{Li}$ . In this case, the ratio  $U/t$  may be tuned using the broad Feshbach resonance involving these two states [50]. Furthermore, detection resolved in both density and spin is possible by combining a Fermi-gas microscope with Stern-Gerlach techniques as done in Ref. [51] or by ejecting unwanted spin states using resonant pulses as in Ref. [52]. The typical temperature scale of recent experiments with  ${}^6\text{Li}$  atoms is  $T \simeq (0.5 - 0.8)4t^2/U$  [51]. Interestingly enough, this temperature scale is of the same order of magnitude as the gap of the SH phase [46]:  $\Delta_{\text{SH}} \simeq 0.41J \simeq 0.8t^2/U$  obtained in the large- $U$  limit. As was recently shown numerically in Ref. [53], the main characteristics of the thermal spectral functions of the SH phase with localized edge states are still visible at finite size for  $T \simeq \Delta_{\text{SH}}$ , a temperature scale which is within the reach of forthcoming experiments. Larger values of  $N$  are experimentally accessible using fermionic alkaline-earth or ytterbium atoms. Using typical experimental values for  ${}^{173}\text{Yb}$  which corresponds to the case of  $N = 6$  (scattering length  $a_g = 10.55 \text{ nm}$  [54] and lattice spacing  $\pi/k \approx 400 \text{ nm}$  [55]), we find  $U/V \sim 10$ . Spin-resolved measurements may be performed on these systems using optical Stern-Gerlach techniques [56]. In the light of the recent experimental achievements with cold fermionic quantum gases, we expect the SPT phases discussed in this Letter to be observed in the near future.

The authors are very grateful to V. Bois for his collaboration at the early stage of this work. We would like to thank G. Salomon for important discussions. The authors (SC, PL, and KT) are grateful to CNRS (France) for financial support (PICS grant). One of the authors (KT) is supported in part by JSPS KAKENHI Grant No. 15K05211 and No. JP15H05855. This work was performed using HPC re-

sources from GENCI (Grant No. x2016050225 and No. A0010500225) and CALMIP. Last, the authors thank the program “Exotic states of matter with  $SU(N)$ -symmetry (YITP-T-16-03)” held at Yukawa Institute for Theoretical Physics where early stage of this work has been carried out.

- 
- [1] B. Zeng, X. Chen, D. L. Zhou, and X. G. Wen, arXiv:1508.02595.
- [2] T. Senthil, Annual Review of Condensed Matter Physics **6**, 299 (2015).
- [3] F. D. M. Haldane, Phys. Lett. A **93**, 464 (1983); Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [4] T. Kennedy, J. Phys.: Condensed Matter, **2**, 5737 (1990).
- [5] M. Hagiwara, K. Katsumata, I. Affleck, B. I. Halperin, and J. P. Renard, Phys. Rev. Lett. **65**, 3181 (1990).
- [6] Z. C. Gu and X. G. Wen, Phys. Rev. B **80**, 155131 (2009).
- [7] F. Pollmann, E. Berg, A. M. Turner, and M. Oshikawa, Phys. Rev. B **85**, 075125 (2012).
- [8] X. Chen, Z.-C. Gu, and X.-G. Wen, Phys. Rev. B **83**, 035107 (2011); Phys. Rev. B **84**, 235128 (2011).
- [9] N. Schuch, D. Perez-Garcia, and I. Cirac, Phys. Rev. B **84**, 165139 (2011).
- [10] L. Fidkowski and A. Kitaev, Phys. Rev. B **83**, 075103 (2011).
- [11] F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg, and M. Oshikawa, Phys. Rev. B **81**, 064439 (2010).
- [12] Z. Bi, A. Rasmussen, K. Slagle, and C. Xu, Phys. Rev. B **91**, 134404 (2015).
- [13] K. Duivenvoorden and T. Quella, Phys. Rev. B **87**, 125145 (2013).
- [14] As  $SU(N)$  does not possess non-trivial projective representations, we need to consider the projective unitary group  $PSU(N) \cong SU(N)/\mathbb{Z}_N$  as the protecting symmetry.
- [15] D.V. Else, S.D. Bartlett, and A.C. Doherty, Phys. Rev. B **88**, 085114 (2013).
- [16] K. Duivenvoorden and T. Quella, Phys. Rev. B **88**, 125115 (2013).
- [17] S. Capponi, P. Lecheminant, and K. Totsuka, Ann. Phys. **367**, 50 (2016).
- [18] T. Morimoto, H. Ueda, T. Momoi, and A. Furusaki, Phys. Rev. B **90**, 235111 (2014).
- [19] S. Rachel, D. Schuricht, B. Scharfenberger, R. Thomale, and M. Greiter, J. Phys.: Conf. Ser. **200**, 022049 (2010).
- [20] I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb, H. Tasaki, Comm. Math. Phys. **115**, 477 (1988).
- [21] A. Roy and T. Quella, arXiv:1512.05229.
- [22] M. A. Cazalilla, A. F. Ho, and M. Ueda, New J. Phys. **11**, 103033 (2009).
- [23] A. V. Gorshkov, M. Hermele, V. Gurarie, C. Xu, P. S. Julienne, J. Ye, P. Zoller, E. Demler, M. D. Lukin, and A. M. Rey, Nat. Phys. **6**, 289 (2010).
- [24] M. A. Cazalilla and A. M. Rey, Rep. Prog. Phys. **77**, 124401 (2014).
- [25] S. Taie, R. Yamazaki, S. Sugawa, and Y. Takahashi, Nat. Phys. **8**, 825 (2012).
- [26] G. Pagano, M. Mancini, G. Cappellini, P. Lombardi, F. Schafer, H. Hu, X.-J. Liu, J. Catani, C. Sias, M. Inguscio, and L. Fallani, Nat. Phys. **10**, 198 (2014).
- [27] X. Zhang, M. Bishof, S. L. Bromley, C. V. Kraus, M. S. Safronova, P. Zoller, A. M. Rey, and J. Ye, Science **345**, 1467 (2014).
- [28] F. Scazza, C. Hofrichter, M. Höfer, P. C. De Groot, I. Bloch, and S. Fölling, Nat. Phys. **10**, 779 (2014).
- [29] M. Atala, M. Aidelsburger, M. Lohse, J. T. Barreiro, B. Paredes, and I. Bloch, Nat. Phys **10**, 588 (2014).
- [30] J. Sebby-Strabley, M. Anderlini, P. S. Jessen, and J. V. Porto, Phys. Rev. A **73**, 033605 (2006).
- [31] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).
- [32] I. Bloch and M. Greiner, Adv. At. Mol. Opt. Phys. **52**, 1 (2006).
- [33] F. Werner, O. Parcollet, A. Georges, and S. R. Hassan, Phys. Rev. Lett. **95**, 056401 (2005).
- [34] Typically, increasing  $r$  makes, e.g.,  $t_{\perp}/t$  and  $V/U$  smaller.
- [35] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne, and E. Tiesinga, Rev. Mod. Phys. **82**, 1225 (2010).
- [36] K. Enomoto, K. Kasa, M. Kitagawa, and Y. Takahashi, Phys. Rev. Lett. **101**, 203201 (2008).
- [37] S. Taie, S. Watanabe, T. Ichinose, and Y. Takahashi, Phys. Rev. Lett. **116**, 043202 (2016).
- [38] K. Kobayashi, M. Okumura, Y. Ota, S. Yamada, and M. Machida, Phys. Rev. Lett. **109**, 235302 (2012).
- [39] K. Kobayashi, Y. Ota, M. Okumura, S. Yamada, and M. Machida, Phys. Rev. A **89**, 023625 (2014).
- [40] V. Bois, S. Capponi, P. Lecheminant, M. Moliner, and K. Totsuka, Phys. Rev. B **91**, 075121 (2015).
- [41] See the supplementary material for more information.
- [42] H. Nonne, M. Moliner, S. Capponi, P. Lecheminant, and K. Totsuka, EPL **102**, 37008 (2013).
- [43] K. Tanimoto and K. Totsuka, arXiv:1508.07601.
- [44] K. Wan, P. Nataf, and F. Mila, Phys. Rev. B **96**, 115159 (2017).
- [45] S. Capponi, P. Fromholz, P. Lecheminant, and K. Totsuka, in preparation.
- [46] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005).
- [47] K. Hasebe and K. Totsuka, Phys. Rev. B **87**, 045115 (2013).
- [48] S. Moudgalya and F. Pollmann, Phys. Rev. B **91**, 155128 (2015).
- [49] R. Islam, R. Ma, P.M. Preiss, M. Eric Tai, A. Lukin, M. Rispoli, and M. Greiner, Nature **528**, 77 (2015).
- [50] G. Zurn, T. Lompe, A. N. Wenz, S. Jochim, P. S. Julienne, and J. M. Hutson, Phys. Rev. Lett. **110**, 135301 (2013).
- [51] M. Boll, T. A. Hilker, G. Salomon, A. Omran, J. Nespolo, L. Pollet, I. Bloch, and C. Gross, Science **353**, 1257 (2016).
- [52] M. F. Parsons, A. Mazurenko, C. S. Chiu, G. Ji, D. Greif, and M. Greiner, Science **353**, 1253 (2016).
- [53] J. Becker, T. Köhler, A. C. Tiegel, S. R. Manmana, S. Wessel, and A. Honecker, Phys. Rev. B **96**, 060403(R) (2017).
- [54] M. Kitagawa, K. Enomoto, K. Kasa, Y. Takahashi, R. Ciury, P. Naidon, and P. S. Julienne, Phys. Rev. A **77**, 012719 (2008).
- [55] C. Hofrichter, L. Riegger, F. Scazza, M. Höfer, D. Rio Fernandes, I. Bloch, and S. Fölling, Phys. Rev. X **6**, 021030 (2016).
- [56] S. Stellmer, R. Grimm, and F. Schreck, Phys. Rev. A **84**, 043611 (2011).

## Supplemental Materials: “Haldane” phases with ultracold fermionic atoms in double-well optical lattices

### STRONG-COUPLING EXPANSION FOR SU(3)

In this section, we consider the strong-coupling limit of SU( $N$ ) cold fermions confined in a double-well optical lattice described by the following Hubbard-like Hamiltonian:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -t \sum_i \sum_{\ell=1}^2 \sum_{\alpha=1}^N \left( c_{\ell\alpha, i+1}^\dagger c_{\ell\alpha, i} + \text{H.c.} \right) - t_\perp \sum_i \sum_{\alpha=1}^N \left( c_{1\alpha, i}^\dagger c_{2\alpha, i} + \text{H.c.} \right) - \mu \sum_i n_i \\ & + \frac{U}{2} \sum_i \sum_{\ell=1}^2 \sum_{\alpha \neq \beta} n_{\ell\alpha, i} n_{\ell\beta, i} \\ & + V \sum_i \sum_{\alpha \neq \beta} \left\{ n_{1\alpha, i} n_{2\beta, i} + c_{1\alpha, i}^\dagger c_{2\beta, i}^\dagger c_{1\beta, i} c_{2\alpha, i} + \frac{1}{2} \left( c_{1\alpha, i}^\dagger c_{1\beta, i}^\dagger c_{2\beta, i} c_{2\alpha, i} + \text{H.c.} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{S1})$$

Dropping the inter-chain interactions (i.e.,  $V = 0$ ), we recover the SU( $N$ ) Hubbard ladder. The atomic limit ( $t = 0$ ) of the above Hamiltonian is most conveniently described using the antisymmetric (anti-bonding) and symmetric (bonding) combinations of the  $c$ -fermions introduced in the Letter:

$$d_{1\sigma, i} = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{1\sigma, i} - c_{2\sigma, i}), \quad d_{2\sigma, i} = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_{1\sigma, i} + c_{2\sigma, i}), \quad (\text{S2})$$

in terms of which the atomic-limit Hamiltonian reads as [ $t = 0$  limit of Eq. (4) of the Letter]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \sum_i \mathcal{H}_{\text{on-site}}(i) \\ \mathcal{H}_{\text{on-site}}(i) &= - \left( \mu + \frac{U+V}{2} \right) n_i + 2t_\perp T_i^z + \frac{U+V}{4} n_i^2 + 2V (T_i^z)^2 + (U-V) (T_i^x)^2. \end{aligned} \quad (\text{S3})$$

The orbital pseudo-spin  $\mathbf{T}$  is defined with respect to the  $d$ -fermions:  $T_i^a = \frac{1}{2} \sum_{m, n, \alpha} d_{m\alpha, i}^\dagger \sigma_{mn}^a d_{n\alpha, i}$ . Note that the hopping between the two wells ( $\ell = 1, 2$ ) now translates to the number difference:  $t_\perp (n_{1, i}^{(d)} - n_{2, i}^{(d)})$ . The spectrum of  $\mathcal{H}_{\text{on-site}}$  (S3) is labeled by various quantum numbers, i.e., (i) the total number of particle  $n_i$ , (ii) the orbital pseudo-spin squared  $\mathbf{T}_i^2 = T(T+1)$  ( $T^z$  is not a good quantum number in general) as well as (iii) the SU( $N$ ) irreducible representations which are most conveniently specified by Young diagrams with at most two columns [S1, S2]. Although the on-site part of the Hamiltonian does not contain SU( $N$ )-dependent interactions, the optimal SU( $N$ ) representation is selected by the orbital( $\mathbf{T}$ )-dependent part through the Fermi statistics (see, e.g., Appendix A of Ref. [S3]). The condition of half filling is imposed by setting

$$\mu = \frac{N}{2}(U+V) \quad (\text{S4})$$

for which the spectrum exhibits the particle-hole symmetry:  $n \leftrightarrow 2N - n$ . To ease the notations, we will drop the site index for the on-site limit spectrum.

### Atomic-limit spectrum

The atomic-limit Hamiltonian (S3) commutes with the SU( $N$ ) generators and the orbital pseudo-spin  $\mathbf{T}$ , we can diagonalize it for given SU( $N$ ) representation and  $\mathbf{T}$ . Due to the fermionic statistics, only special combinations of SU( $N$ ) representations



and  $\mathbf{T}$  appear for a given local fermion number  $n$  ( $0 \leq n \leq 2N$ ) [S3]:

$$\square \sim (\underbrace{\square}_{\text{SU}(N)}, \underbrace{\square}_{\text{SU}(2)}) \quad (n = 1) \quad (\text{S5a})$$

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \sim (\square, \bullet) \oplus \left( \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \square \right) \quad (n = 2) \quad (\text{S5b})$$

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \sim \left( \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \square \right) \oplus \left( \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \square \square \square \right) \quad (n = 3) \quad (\text{S5c})$$

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \sim (\square, \bullet) \oplus \left( \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \square \square \right) \oplus \left( \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \square \square \square \square \right) \quad (n = 4) \quad (\text{S5d})$$

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \sim \left( \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \square \right) \oplus \left( \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \square \square \square \right) \oplus \left( \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \square \square \square \square \square \right) \quad (n = 5) \quad (\text{S5e})$$

$$\vdots$$

$${}_{2N} \left\{ \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \right\} \sim (\bullet, \bullet) \quad (n = 2N) \quad (\text{S5f})$$

As the Hamiltonian (S3) does not depend on  $\text{SU}(N)$ , given  $n$ , we just diagonalize (S3) for all allowed  $T$ .

When  $N = 3$ , the fermion number can take  $n = 0, 1, \dots, 6 (= 2N)$ . The energy-spectrum for the fermion number  $n$  is given by:

$$E_{n=0,6}(\bullet, T = 0) = 0 \quad (\text{S6a})$$

$$E_{n=1,5}((\mathbf{3}, \bar{\mathbf{3}}), T = 1/2) = \begin{cases} t_{\perp} - (U + V) & (T^z = +1/2; \times 3) \\ -t_{\perp} - (U + V) & (T^z = -1/2; \times 3) \end{cases} \quad (\text{S6b})$$

$$E_{n=2,4}((\mathbf{6}, \bar{\mathbf{6}}), T = 0) = -2(U + V) \quad (\times 6) \quad (\text{S6c})$$

$$E_{n=2,4}((\bar{\mathbf{3}}, \mathbf{3}), T = 1) = \begin{cases} -\frac{3}{2}U - \frac{1}{2}V - \sqrt{4t_{\perp}^2 + \left(\frac{U-V}{2}\right)^2} & (\times 3) \\ -\frac{3}{2}U - \frac{1}{2}V + \sqrt{4t_{\perp}^2 + \left(\frac{U-V}{2}\right)^2} & (\times 3) \\ -U - 3V & (T^z = 0; \times 3) \end{cases} \quad (\text{S6d})$$

$$E_{n=3}(\mathbf{8}, T = 1/2) = \begin{cases} t_{\perp} - 2(U + V) & T^z = +1/2 \quad (\times 8) \\ -t_{\perp} - 2(U + V) & T^z = -1/2 \quad (\times 8) \end{cases} \quad (\text{S6e})$$

$$E_{n=3}(\bullet, T = 3/2) = \begin{cases} t_{\perp} - U - V - \sqrt{4t_{\perp}^2 - 2t_{\perp}U + U^2 + 10t_{\perp}V - 4UV + 7V^2} \\ t_{\perp} - U - V + \sqrt{4t_{\perp}^2 - 2t_{\perp}U + U^2 + 10t_{\perp}V - 4UV + 7V^2} \\ -t_{\perp} - U - V - \sqrt{4t_{\perp}^2 + 2t_{\perp}U + U^2 - 10t_{\perp}V - 4UV + 7V^2} \\ -t_{\perp} - U - V + \sqrt{4t_{\perp}^2 + 2t_{\perp}U + U^2 - 10t_{\perp}V - 4UV + 7V^2} \end{cases}, \quad (\text{S6f})$$

where the irreducible representations of the  $\text{SU}(3)$  group are labeled by their dimension:

$$\begin{aligned} \mathbf{3} &\leftrightarrow \square, \quad \bar{\mathbf{3}} \leftrightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}, \\ \mathbf{6} &\leftrightarrow \square \square, \quad \bar{\mathbf{6}} \leftrightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}, \\ \mathbf{8} &\leftrightarrow \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}. \end{aligned} \quad (\text{S7})$$

The lowest of these energies for different parameters ( $U, V$ ) are displayed in Fig. (S1).

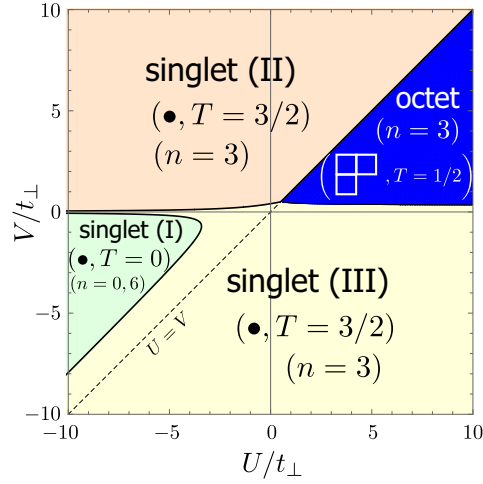


FIG. S1. Atomic-limit phase diagram of  $\mathcal{H}_{\text{on-site}}$  for  $N = 3$ . There are four phases: (i) SU(3) octet phase with  $n = 3$ ,  $\mathbf{8}$  (adjoint), and  $(T = 1/2, T^z = -1/2)$  [blue; second of Eq. (S6e)], (ii) SU(3)-singlet phase (I) with  $n = 0$  or  $6$ ,  $\bullet$ , and  $T = 0$  [green; Eq. (S6a)], (iii) SU(3)-singlet phase (II) with  $n = 3$ ,  $\bullet$ , and  $T = 3/2$  [pale orange; first of Eq. (S6f)], and (iv) SU(3)-singlet phase (III) with  $n = 3$ ,  $\bullet$ , and  $T = 3/2$  [pale yellow; third of Eq. (S6f)]. The SU(3)-singlet phase (I) suggests that a period-2 charge-density wave might be stabilized there. Chemical potential is fixed to  $\mu = 3(U + V)/2$ .

### Effective Hamiltonian for octet phase

Now let us consider the octet phase (shown by blue in Fig. S1) where an SU(3) “magnetic moment” in the  $\mathbf{8}$  (adjoint) representation is formed at each rung (i.e., double well) and the orbital pseudo-spin  $\mathbf{T}$  is quenched to  $T = 1/2, T^z = -1/2$ . In this phase, the low-energy effective Hamiltonian is expected to be SU(3)-invariant and written only in terms of the SU(3) “spins” in  $\mathbf{8}$ . First, we restrict the form of possible interactions by symmetry consideration. From the Clebsch-Gordan decomposition

$$\begin{aligned}
 \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} & \simeq \underbrace{\begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array}}_{\mathbf{27}} \oplus \underbrace{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}}_{\mathbf{10}} \oplus \underbrace{\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}}_{\overline{\mathbf{10}}} \oplus \underbrace{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}}_{\mathbf{8}_S} \oplus \underbrace{\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}}_{\mathbf{8}_A} \oplus \bullet \\
 (\mathbf{8} \times \mathbf{8} = \mathbf{27} \oplus \mathbf{10} \oplus \overline{\mathbf{10}} \oplus \mathbf{8}_S \oplus \mathbf{8}_A \oplus \mathbf{1}), & 
 \end{aligned} \tag{S8}$$

(the subscripts “S” and “A” label the two  $\mathbf{8}$  representations) one sees (by the Schur’s lemma) that any SU(3)-invariant (two-site) interactions can be completely parametrized by six independent coefficients corresponding to the six irreducible representations appearing on the right-hand side:

$$a_{27}P_{27} + a_{10}P_{10} + a_{\overline{10}}P_{\overline{10}} + a_{8_S}P_{8_S} + a_{8_A}P_{8_A} + a_1P_1 \tag{S9}$$

with  $P_R$  being the projection operator onto the irreducible representation  $R$  and  $a_R$  the corresponding real coefficient. In the case of SU(2), the projection operators are uniquely expressed in terms of polynomials of the quadratic Casimir  $\mathcal{C}_2$  (or,  $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ ). On the other hand, in SU( $N$ ) ( $N \geq 3$ ), higher-order Casimirs and other operators may also be necessary to recast the general form (S9) into the “spin” Hamiltonian. Specifically, for a pair of SU(3) spins  $\mathcal{S}_1^A, \mathcal{S}_2^B$  in  $\mathbf{8}$ , the most general SU(3)-invariant two-site interaction may be written as:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}^{(\text{octet})} = \alpha \mathbf{1} + J_1 \sum_A \mathcal{S}_1^A \mathcal{S}_2^A + J_2 \left( \sum_A \mathcal{S}_1^A \mathcal{S}_2^A \right)^2 + J_3 \left( \sum_A \mathcal{S}_1^A \mathcal{S}_2^A \right)^3 + J_4 \mathcal{C}_3(\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2) + p \mathcal{P}_{\mathbf{8}, \mathbf{8}}, \tag{S10}$$

where  $\mathcal{P}_{\mathbf{8}, \mathbf{8}}$  is the permutation operators of the neighboring sites 1 and 2, and  $\mathcal{C}_3$  is the cubic Casimir made of  $\mathcal{S}_{1,2}^A$ . The “exchange interaction”  $\sum_{A=1}^8 \mathcal{S}_1^A \mathcal{S}_2^A$  is directly related to the quadratic Casimir as:

$$\begin{aligned}
 \sum_{A=1}^8 \mathcal{S}_1^A \mathcal{S}_2^A &= \sum_A \frac{1}{2} \left\{ (\mathcal{S}_1^A + \mathcal{S}_2^A)^2 - (\mathcal{S}_1^A)^2 - (\mathcal{S}_2^A)^2 \right\} \\
 &= \frac{1}{2} \{ \mathcal{C}_2(R) - 2\mathcal{C}_2(\mathbf{8}) \}, 
 \end{aligned} \tag{S11}$$

which enables us to use  $\sum_{A=1}^8 S_1^A S_2^A$  instead of the full quadratic Casimir operator. The reason for the necessity of  $\mathcal{P}_{\mathbf{8},\mathbf{8}}$  is that the two adjoint representations  $\mathbf{8}$  share the same set of the Casimirs ( $\mathcal{C}_2, \mathcal{C}_3$ ) (see Table I) and are distinguished only by  $\mathcal{P}_{\mathbf{8},\mathbf{8}}$ . As  $\mathcal{C}_3$  is odd under the conjugation  $R \rightarrow \bar{R}$  (which, in the fermion language, translates to the particle-hole transformation),  $J_4 = 0$  at half-filling.

Second-order processes in  $t$  give an effective interaction between a pair of SU(3) spins in  $\mathbf{8}$ , whose coupling constants  $\{\alpha, J_1, J_2, J_3, p\}$  are given in terms of  $(t, t_\perp, U, V)$  as:

$$\alpha = \frac{1}{6} \left( \frac{A}{6} - \frac{B}{2} \right) \quad (\text{S12a})$$

$$J_1 = \frac{A}{9} + \frac{2B}{9}, \quad J_2 = -\frac{10}{27}(A - B), \quad J_3 = -\frac{2}{27}(A - B) \quad (\text{S12b})$$

$$p = \frac{1}{6}(A - B), \quad (\text{S12c})$$

where

$$A \equiv \frac{t^2(8t_\perp + 3U + V)}{U(U + V) + t_\perp(3U + V)} \quad (\text{S12d})$$

$$B \equiv \frac{3t^2(8t_\perp + U + 3V)}{V(U + V) + t_\perp(U + 3V)}.$$

The spectrum of the two-site effective Hamiltonian  $\mathcal{H}_{\text{eff}}$  (S10) reads as:

$$E_0 \quad (\times 27; \quad \mathbf{27}) \quad (\text{S13a})$$

$$E_0 - \frac{B}{3} \quad (\times 20; \quad \mathbf{10}, \bar{\mathbf{10}}) \quad (\text{S13b})$$

$$E_0 - \frac{4A}{3} \quad (\times 1; \quad \mathbf{1}) \quad (\text{S13c})$$

$$E_0 - \frac{5(A + B)}{12} \quad (\times 8; \quad \mathbf{8}_S), \quad E_0 - \frac{3A}{4} - \frac{B}{12} \quad (\times 8; \quad \mathbf{8}_A). \quad (\text{S13d})$$

with  $E_0 = 2E_{n=3}(\mathbf{8}, T = 1/2) = -2t_\perp - 4(U + V)$ . For values of parameters corresponding to the octet phase of Fig. S1, we have  $J_1 \sim J_2$  and we must retain the biquadratic term  $(\sum_A S_1^A S_2^A)^2$ , and hence nothing more can be said about the physics described without a direct numerical investigation of the effective Hamiltonian (S10). Furthermore a numerical derivation of the full two-site spectrum shows that the effective Hamiltonian description is valid for  $t_\perp \gtrsim t$  ( $t_\perp > 1.7t$  in the case of  $U = 100$ ,  $V = 10$  for unit  $t$  according to Fig. S2). Given the parameters dependences of  $J_1, J_2, J_3$  and  $p$ , their values stay qualitatively the same on all the octet region of Fig. S1. Hence Fig. S3 obtained by DMRG for  $t_\perp = 10$ ,  $t = 1$ ,  $U = 100$ , and  $V = 10$  provides also a valid depiction of the phase described by the effective Hamiltonian (S10) for realistic parameters. One thus concludes that for  $N = 3$  a featureless fully gapped phase is stabilized without any edge states. However, this description breaks down when  $t_\perp \lesssim t$ , the typical regime where a SPT phase can emerge, as shown below, where we have to use the other approach presented in the Letter.

irreps.						
dimensions	<b>27</b>	<b>10</b>	<b>10</b>	<b>8<sub>S</sub></b>	<b>8<sub>A</sub></b>	<b>1</b>
quadratic Casimir $\mathcal{C}_2$	8	6	6	3	3	0
cubic Casimir $\mathcal{C}_3$	0	9	-9	0	0	0
symmetry ( $\mathcal{P}_{\mathbf{8},\mathbf{8}}$ )	1	-1	-1	1	-1	1

TABLE I. Quadratic and cubic Casimirs for the six irreducible representations appearing in the decomposition of  $\mathbf{8} \otimes \mathbf{8}$  [eq.(S8)].

## NUMERICAL RESULTS

### Edge states in $N = 3$ model

As is well-known, the sharpest characterization of (bosonic) SPT phases is obtained by analyzing the projective representation appearing at the edges (whether physical or virtual). Nevertheless, for practical purposes, the observation of the *physical* edge

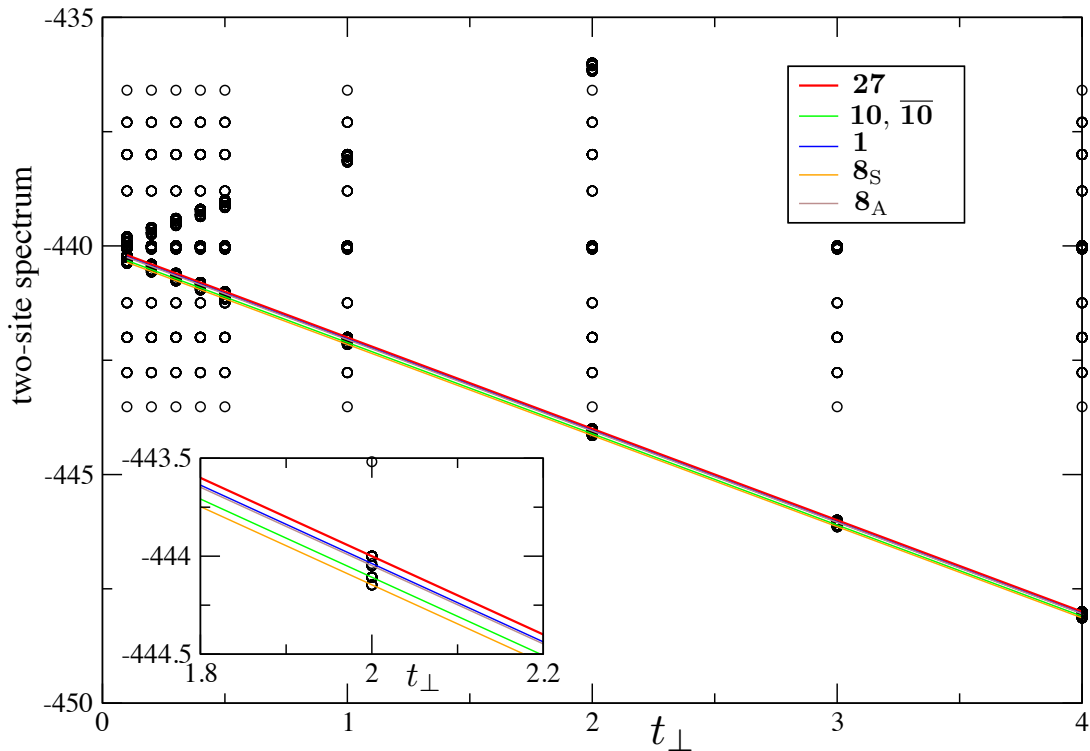


FIG. S2. Exact two-site spectrum for  $U = 100, V = 10$  and unit  $t$  versus  $t_{\perp}$ . The spectrum (S13) predicted by the effective Hamiltonian (S10) is drawn in color lines. A zoom on the ground states around  $t_{\perp} = 2$  is provided on the bottom left corner. The effective Hamiltonian description breaks down for  $t_{\perp} < 1.7t$ .

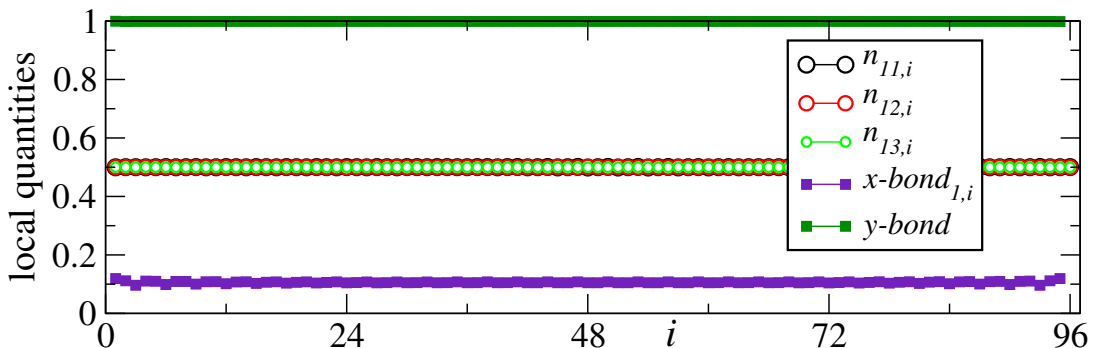


FIG. S3. Local quantities for the  $N = 3$  model obtained by DMRG simulations for  $L = 96, (U, V) = (100, 10)$  and  $t_{\perp}/t = 10$ .

states still provides us with a useful method of accessing the underlying topological properties (especially when we consider bosonic SPT phases realized in *fermionic* systems). To demonstrate how this strategy works, let us consider the two  $SU(3)$  valence-bond solid (VBS) states [S4] and calculate the expectation values of the two Cartan generators  $G_r^3$  and  $G_r^8$  in the 8-dimensional adjoint representation (8) at site  $r$  (the  $SU(3)$  generators are normalized as  $\text{Tr}G^A G^B = 6\delta^{AB}$ ). The two VBS states break the reflection symmetry spontaneously and are known [S5] to belong to the two different SPT phases predicted by group cohomology [S6] (see Fig. S4).

We begin with the  $(\mathbf{3}, \bar{\mathbf{3}})$  VBS state shown in Fig. S4(a). Using the matrix-product state formalism, it is straightforward to calculate the local expectation values of  $G_r^3$  and  $G_r^8$  for a semi-infinite system (we have chosen a semi-infinite system just to

suppress the effects from the other edge):

$$\langle\langle G_r^3, G_r^8 \rangle\rangle = \begin{cases} \left( -\frac{9}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{8}\right)^r, -\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{8}\right)^r \right) & \text{for L-edge state 1} \\ \left( +\frac{9}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{8}\right)^r, -\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \left(-\frac{1}{8}\right)^r \right) & \text{for L-edge state 2} \\ \left( 0, 3\sqrt{6} \left(-\frac{1}{8}\right)^r \right) & \text{for L-edge state 3.} \end{cases} \quad (\text{S14})$$

Summing up these values, we obtain the edge moment localized around the left edge:

$$\sum_{r=1}^{\infty} \langle\langle G_r^3, G_r^8 \rangle\rangle = \begin{cases} \left( \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) = \lambda_3(1) & \text{for L-edge state 1 (highest weight state (hws) of } \mathbf{3} \text{)} \\ \left( -\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{6}} \right) = \lambda_3(2) & \text{for L-edge state 2} \\ \left( 0, -\sqrt{\frac{2}{3}} \right) = \lambda_3(3) & \text{for L-edge state 3} \end{cases} \quad (\text{S15})$$

which is to be compared with the SU(3) weights of  $\mathbf{3}$  shown in Fig. S5 (a). A similar calculation leads us to the following set of weights at the right edge:

$$\sum_{r=\text{right edge}} \langle\langle G_r^3, G_r^8 \rangle\rangle = \begin{cases} \left( -\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{6}} \right) = \lambda_{\bar{\mathbf{3}}}(1) & \text{for R-edge state 1} \\ \left( \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{6}} \right) = \lambda_{\bar{\mathbf{3}}}(2) & \text{for R-edge state 2 (hws of } \bar{\mathbf{3}} \text{)} \\ \left( 0, \sqrt{\frac{2}{3}} \right) = \lambda_{\bar{\mathbf{3}}}(3) & \text{for R-edge state 3,} \end{cases} \quad (\text{S16})$$

which then implies that  $\bar{\mathbf{3}}$  appears at the right edge. (For the other topological VBS state  $(\bar{\mathbf{3}}, \mathbf{3})$ , we just obtain the weights with  $\mathbf{3}$  and  $\bar{\mathbf{3}}$  interchanged.)

In the Letter, we have shown that, in some region of the Mott-insulating phase, the above SU(3) SPT phases are stabilized. In the region, we may expect that the following fermion operators reduce to the SU(3) ‘‘spins’’  $G_r^A$  in  $\mathbf{8}$ :

$$\begin{aligned} \hat{G}_r^A &= \sum_{\alpha,\beta=1}^3 c_{1\alpha,r}^\dagger (G^A)_{\alpha\beta} c_{1\beta,r} + \sum_{\alpha,\beta=1}^3 c_{2\alpha,r}^\dagger (G^A)_{\alpha\beta} c_{2\beta,r} \\ &= \sum_{\alpha,\beta=1}^3 d_{1\alpha,r}^\dagger (G^A)_{\alpha\beta} d_{1\beta,r} + \sum_{\alpha,\beta=1}^3 d_{2\alpha,r}^\dagger (G^A)_{\alpha\beta} d_{2\beta,r} \quad (A = 3, 8) \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(n_r(1) - n_r(2)) & A = 3 \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(n_r(1) + n_r(2) - 2n_r(3)) & A = 8, \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{S17})$$

where  $n_r(\alpha) = \sum_{\ell=1,2} c_{\ell\alpha,r}^\dagger c_{\ell\alpha,r} = \sum_{\ell=1,2} d_{\ell\alpha,r}^\dagger d_{\ell\alpha,r}$ .

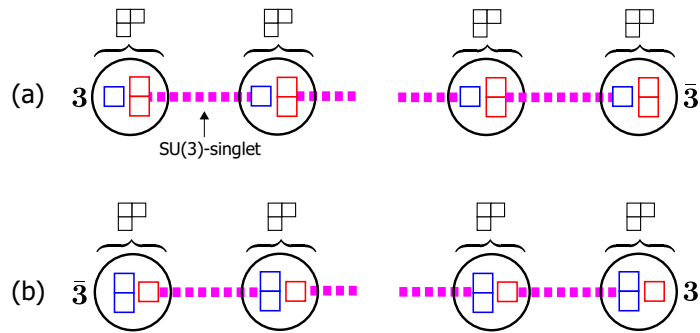


FIG. S4. Two SU(3) VBS states that break reflection symmetry spontaneously. They are distinguished by the edge states: in (a),  $\mathbf{3}$  and  $\bar{\mathbf{3}}$  respectively appear at the left and right edges, while, in (b),  $\mathbf{3}$  and  $\bar{\mathbf{3}}$  are interchanged. We call these VBS states  $(\mathbf{3}, \bar{\mathbf{3}})$  [(a)] and  $(\bar{\mathbf{3}}, \mathbf{3})$  [(b)].

In the SU(3) SPT phase, we thus expect an overall  $2 \times 3 \times 3 = 18$  degeneracy of the ground-state corresponding to all possible edge states as well as inversion symmetry. In a numerical DMRG simulation, it is well-known that the algorithm will converge to one of these ground-states randomly (i.e. convergence depends on the sweeping procedure and other details). Note also that

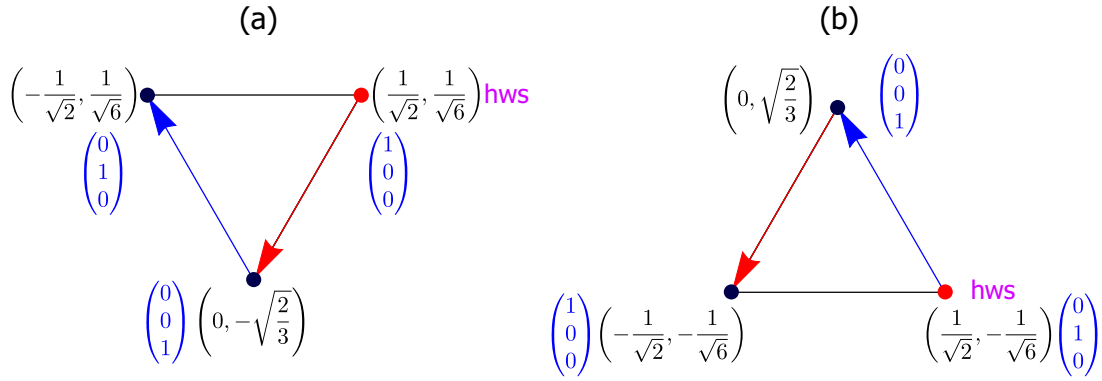


FIG. S5. Weights of 3 representation ( $\mathbf{3}$ ) and its conjugate ( $\bar{\mathbf{3}}$ ). Red (blue) arrows denote the action of simple root  $-\alpha_1$  ( $-\alpha_2$ ).

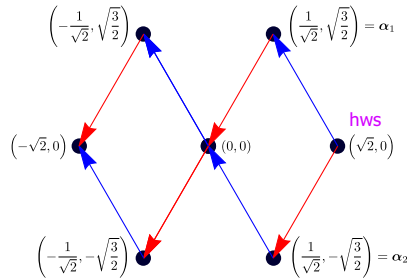


FIG. S6. Weights 8-dimensional (adjoint) representation. The weight  $(0, 0)$  is doubly degenerate [corresponding to the two Cartan generators of  $SU(3)$ ]. Red (blue) arrows denote the action of simple root  $-\alpha_1$  ( $-\alpha_2$ ).

since we are implementing  $U(1)$  quantum numbers corresponding to the color conservation, left- and right-edge states are related so that  $(G_{\text{tot}}^3, G_{\text{tot}}^8) = (0, 0)$ , which reduces the degeneracy to  $2 \times 3 = 6$ . In order to characterize a given edge states, we can simply use the local densities  $n_{\ell_{\alpha,i}}$  to compute quantities in Eqs. (S15)-(S16). For instance, the data presented in Fig. 2 of the main text for  $N = 3$  correspond to a left-edge having  $\lambda_{\bar{\mathbf{3}}}(1)$ .

In order to further reduce the degeneracy, we can also work in a “polarized” case (by analogy with the spin-1 case for instance) by fixing the total number of particles per color as  $(n_1, n_2, n_3) = (L + 1, L - 1, L)$  so that  $(G_{\text{tot}}^3, G_{\text{tot}}^8) = (\sqrt{2}, 0)$  for which there are only two candidates, namely left-edge having  $\lambda_{\mathbf{3}}(1)$  and right-edge  $\lambda_{\bar{\mathbf{3}}}(2)$ , or vice-versa. In Fig. S7, we provide two different of set of parameters corresponding to these two possible ground-states, hence showing explicitly the inversion symmetry breaking.

### Entanglement spectrum in finite-size systems

In the Letter, we have used the structure of the entanglement spectrum to identify the topological properties underlying the ground-state wave function. However, our calculations were done for finite-size systems and it is not obvious to what extent the theoretical predictions, that are made using the properties of infinite-size matrix-product states [S7–S9], are valid. To illustrate how finite-size calculations work in getting the information on the topological properties, we calculate the entanglement spectrum (i.e., the Schmidt eigenvalues) of the  $(\mathbf{3}, \bar{\mathbf{3}})$  VBS state [S4, S5] discussed above. Following the standard procedure [S10], we can obtain the entanglement spectrum for a finite-size ( $L$ ) system:

$$\frac{\sqrt{1 + 2(-1/8)^{\ell_L} \sqrt{1 + 2(-1/8)^{\ell_R}}}}{\sqrt{3} \sqrt{1 + 2(-1/8)^L}}, \quad \frac{\sqrt{1 - (-1/8)^{\ell_L} \sqrt{1 - (-1/8)^{\ell_R}}}}{\sqrt{3} \sqrt{1 + 2(-1/8)^L}} \quad (\times 2), \quad (\text{S18})$$

where  $\ell_L$  and  $\ell_R$  respectively are the sizes of the left and right subsystems ( $L = \ell_L + \ell_R$ ), and the edge states are fixed to  $\lambda_{\mathbf{3}}(1)$  (left) and  $\lambda_{\bar{\mathbf{3}}}(1)$  (right). For finite-size systems, the three-fold degeneracy, which is a clear signature of the topological property, is weakly broken (with an exponentially small splitting). Roughly, the fictitious  $SU(3)$  spins  $\mathbf{3}$  and  $\bar{\mathbf{3}}$  at the entanglement cut feel

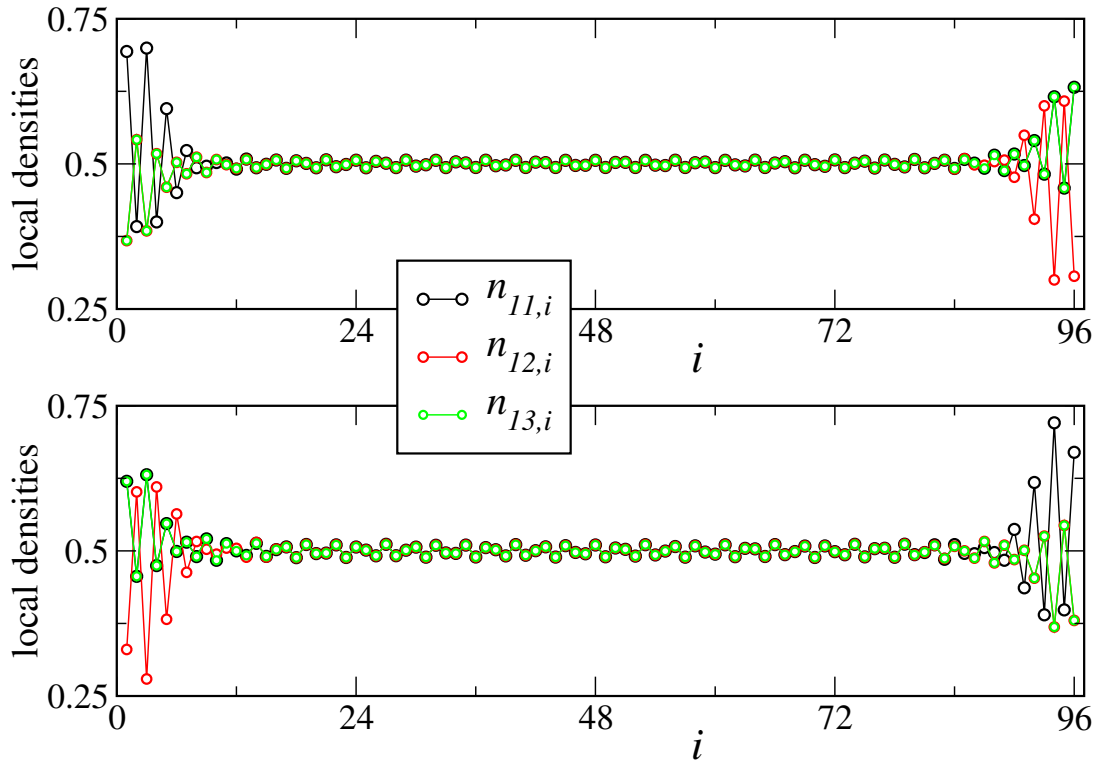


FIG. S7. Local densities for the  $N = 3$  model obtained by DMRG simulations for  $L = 96$ ,  $t = t_{\perp} = 1$  and  $(U, V) = (20, 2)$  (top) or  $(U, V) = (100, 10)$  (bottom) respectively. We fix the total number of particles per color as  $(n_1, n_2, n_3) = (L + 1, L - 1, L)$  and we do observe the two possible edge states (corresponding to the two ground-states in this sector, see text). Top: left-edge has  $\lambda_{\bar{3}}(1)$  and right-edge  $\lambda_{\bar{3}}(2)$ . Bottom: opposite situation showing the inversion symmetry breaking.

the (exponentially small) effects of the actual (emergent) edge spins on the boundaries thereby breaking the perfect degeneracy characteristic of free spins.

### Quantum phase transition induced by $t_{\perp}$ in the $N = 3$ model

As discussed in the strong coupling section above, the effective model is highly non-trivial for  $N = 3$  and in particular, there is a crucial role played by  $t_{\perp}$  which acts as an effective magnetic field for the  $d$  orbitals. In Fig. S3 and Fig. S8, we plot the local quantities (see main text) for large interactions and various  $t_{\perp}$ , so that we can identify several phases. At small  $t_{\perp}/t = 0.4$ , one clearly observes in-phase dimerization, corresponding to a uniform spin Peierls-like phase 0-SP. When  $t_{\perp} = t$ , we recover the  $N = 3$  chiral SPT phase, which in this particular simulation corresponds to a left-edge having  $\lambda_{\bar{3}}(2)$  (hence a right-edge corresponding to  $\lambda_{\bar{3}}(2)$ ). Finally, for large  $t_{\perp}/t = 10$ , there is a quantum phase transition to a featureless fully gapped phase. Note that in this case, the rung energy is very close to 1, as expected when orbital fluctuations are suppressed.

- 
- [S1] C. Itzykson and M. Nauenberg, *Rev. Mod. Phys.* **38**, 95 (1966).
  - [S2] H. Georgi, *Lie Algebras in Particle Physics* (Perseus Books, 1999).
  - [S3] V. Bois, S. Capponi, P. Lecheminant, M. Moliner, and K. Totsuka, *Phys. Rev. B* **91**, 075121 (2015).
  - [S4] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, *Comm. Math. Phys.* **115**, 477 (1988), 10.1007/BF01218021.
  - [S5] T. Morimoto, H. Ueda, T. Momoi, and A. Furusaki, *Phys. Rev. B* **90**, 235111 (2014).
  - [S6] K. Duivenvoorden and T. Quella, *Phys. Rev. B* **87**, 125145 (2013).
  - [S7] D. Pérez-García, M. M. Wolf, M. Sanz, F. Verstraete, and J. I. Cirac, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 167202 (2008).
  - [S8] F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. B* **81**, 064439 (2010).
  - [S9] K. Tanimoto and K. Totsuka, ArXiv:1508.07601.
  - [S10] Y.-Y. Shi, L.-M. Duan, and G. Vidal, *Phys. Rev. A* **74**, 022320 (2006).

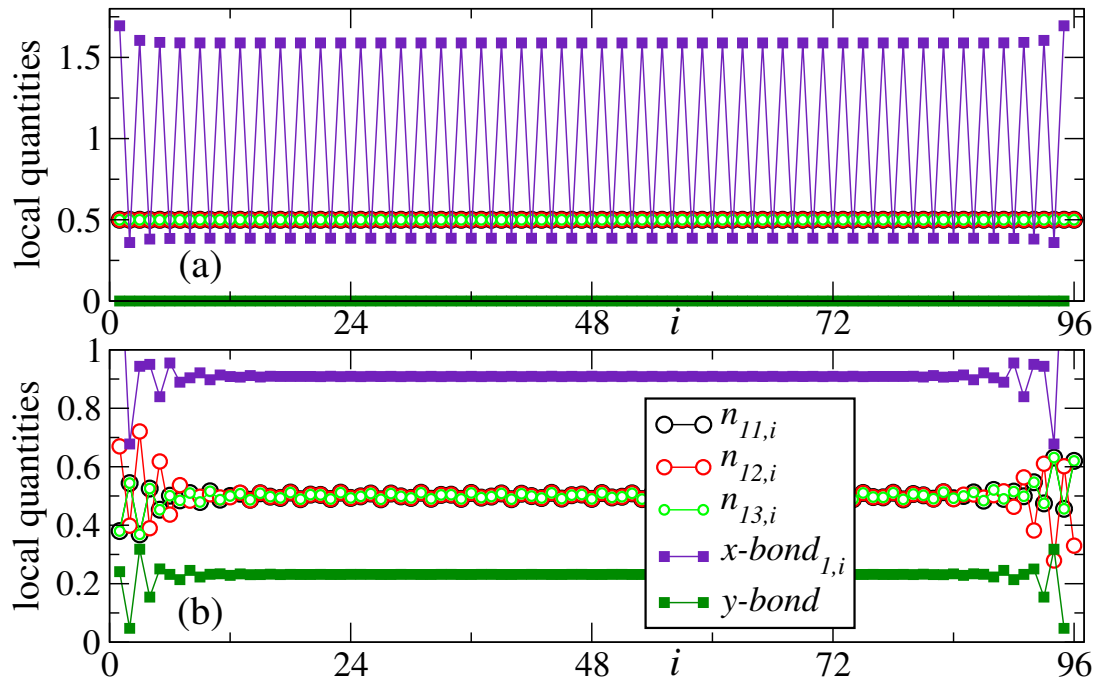


FIG. S8. Local quantities for the  $N = 3$  model obtained by DMRG simulations for  $L = 96$ ,  $(U, V) = (100, 10)$  and varying  $t_{\perp}/t = 0.4$  (a) and 1 (b) respectively.





# Bibliographie

- [1] P. W. Anderson, “More Is Different,” *Science*, vol. 177, pp. 393–396, aug 1972.
- [2] L. Landau, “Theory of phase transformations. i,” *Phys. Z. Sowjetunion*, vol. 11, p. 26, 1937.
- [3] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, “On the Theory of superconductivity,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, vol. 20, pp. 1064–1082, 1950.
- [4] L. D. Landau and E. Lifchitz, *Physique Théorique : Physique Statistique*. MIR, 4 ed., mai 1998.
- [5] M. I. Aroyo, ed., *International Tables for Crystallography Volume A: Space-group symmetry*, ch. 3. Wiley, 2016.
- [6] N. D. Mermin and H. Wagner, “Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models,” *Physical Review Letters*, vol. 17, pp. 1133–1136, nov 1966.
- [7] N. D. Mermin and H. Wagner, “Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models - Erratum,” *Physical Review Letters*, vol. 17, pp. 1307–1307, dec 1966.
- [8] O. Bratteli and D. Robinson, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics II*. New York: Berlin, 1981.
- [9] J. G. Bednorz and K. A. Müller, “Possible High  $T_c$  Superconductivity in the Ba-La-Cu-O System,” in *Ten Years of Superconductivity: 1980–1990*, vol. 193, pp. 267–271, Springer, Dordrecht, 1986.
- [10] P. J. Ford and G. A. Saunders, *The rise of the superconductors*. CRC Press, 2005.
- [11] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard, “Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit,” *Physical Review Letters*, vol. 48, pp. 1559–1562, may 1982.
- [12] C. L. Kane and E. J. Mele, “Quantum Spin Hall Effect in Graphene,” *Physical Review Letters*, vol. 95, p. 226801, nov 2005.

- [13] X. G. Wen, “Colloquium: Zoo of quantum-topological phases of matter,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 89, no. 4, pp. 1–17, 2017.
- [14] V. Kalmeyer and R. B. Laughlin, “Equivalence of the resonating-valence-bond and fractional quantum Hall states,” *Physical Review Letters*, vol. 59, pp. 2095–2098, nov 1987.
- [15] X. G. Wen, F. Wilczek, and A. Zee, “Chiral spin states and superconductivity,” *Physical Review B*, vol. 39, pp. 11413–11423, jun 1989.
- [16] E. Witten, “Quantum field theory and the Jones polynomial,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 121, pp. 351–399, sep 1989.
- [17] H. L. Stormer, “Nobel Lecture: The fractional quantum Hall effect,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 71, pp. 875–889, jul 1999.
- [18] S. Sachdev, *Quantum phase transitions*. Cambridge University Press, 2011.
- [19] F. D. M. Haldane, “Ground State Properties of Antiferromagnetic Chains with Unrestricted Spin: Integer Spin Chains as Realisations of the O(3) Non-Linear Sigma Model,” pp. 1–4, nov 1981.
- [20] P. W. Anderson, “New Approach to the Theory of Superexchange Interactions,” *Physical Review*, vol. 115, pp. 2–13, jul 1959.
- [21] E. Ising, “Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 31, pp. 253–258, Feb. 1925.
- [22] H. A. Bethe, “On the theory of the infrared absorptivity of metals,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 71, pp. 205–226, 1931.
- [23] B. Sutherland, “Model for a multicomponent quantum system,” *Physical Review B*, vol. 12, pp. 3795–3805, nov 1975.
- [24] A. Meyer, A. Gleizes, J. J. Girerd, M. Verdaguer, and O. Kahn, “Crystal structures, magnetic anisotropy properties and orbital interactions in catena-( $\mu$ -nitrito)-bis(ethylenediamine)nickel(II) perchlorate and triiodide,” *Inorganic Chemistry*, vol. 21, pp. 1729–1739, may 1982.
- [25] F. D. M. Haldane, “Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State,” *Physical Review Letters*, vol. 50, pp. 1153–1156, apr 1983.
- [26] J. Boucher, L. Regnault, J. Renard, and M. Verdaguer, “Chaînes de spins antiferromagnétiques : la « Conjecture de Haldane »,” *Images de la Physique*, pp. 7–16, 1996.
- [27] J. Villain, “Quantum Theory of One- and Two-Dimensional Ferro- and Antiferromagnets with an Easy Magnetization Plane I. Ideal 1-D or 2-D Lattices Without In-Plane Anisotropy,” *LE JOURNAL DE PHYSIQUE*, vol. 35, pp. 27–47, 1974.

- 
- [28] J. Villain, "Theory of one- and two-dimensional magnets with an easy magnetization plane. II. The planar, classical, two-dimensional magnet," *Journal de Physique*, vol. 36, no. 6, pp. 581–590, 1975.
- [29] J. P. Boucher, G. Rius, and Y. Henry, "Soliton Magnetic Resonance (SMR) in the Magnetic Chains of CsCoCl<sub>3</sub>," *Europhysics Letters (EPL)*, vol. 4, pp. 1073–1078, nov 1987.
- [30] I. Affleck, "Dyon Analogs in Antiferromagnetic Chains," *Physical Review Letters*, vol. 57, pp. 1048–1051, aug 1986.
- [31] F. Devreux and J. Boucher, "Solitons in Ising-like quantum spin chains in a magnetic field : a second quantization approach," *Journal de Physique*, vol. 48, pp. 1663–1670, 1987.
- [32] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension*. Oxford: Oxford University Press, 2003.
- [33] P. Jordan and E. Wigner, "Über das Paulische Äquivalenzverbot," *Zeitschrift für Physik*, vol. 47, pp. 631–651, Sept. 1928.
- [34] S. Kimura, T. Takeuchi, K. Okunishi, M. Hagiwara, Z. He, K. Kindo, T. Taniyama, and M. Itoh, "Novel Ordering of an S=1/2 Quasi-1d Ising-Like Antiferromagnet in Magnetic Field," *Physical Review Letters*, vol. 100, p. 057202, feb 2008.
- [35] C. N. Yang and C. P. Yang, "One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. I. Proof of Bethe's Hypothesis for Ground State in a Finite System," *Physical Review*, vol. 150, pp. 321–327, oct 1966.
- [36] F. D. M. Haldane, "General Relation of Correlation Exponents and Spectral Properties of One-Dimensional Fermi Systems: Application to the Anisotropic S=1/2 Heisenberg Chain," *Physical Review Letters*, vol. 45, pp. 1358–1362, oct 1980.
- [37] N. Bogoliubov, A. Izergin, and V. Korepin, "Critical exponents for integrable models," *Nuclear Physics B*, vol. 275, pp. 687–705, dec 1986.
- [38] H.-J. Mikeska, "Phase Diagram and Excitation Spectrum of S = 1 Antiferromagnetic Heisenberg Chains.," *Europhysics Letters*, vol. 19, no. 1, pp. 39–44, 1992.
- [39] M. Takahashi, "Spin-correlation function of the S=1 antiferromagnetic Heisenberg chain at T=0," *Physical Review B*, vol. 38, pp. 5188–5191, sep 1988.
- [40] H. Tasaki, "Quantum liquid in antiferromagnetic chains: A stochastic geometric approach to the Haldane gap," *Physical Review Letters*, vol. 66, pp. 798–801, feb 1991.
- [41] H. Tasaki, "Haldane gap antiferromagnets in a transverse magnetic field," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 3, pp. 5875–5880, aug 1991.

- [42] O. Golinelli, T. Jolicoeur, and R. Lacaze, “The magnetic field behaviour of a Haldane-gap antiferromagnet,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 5, pp. 7847–7858, oct 1993.
- [43] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, “Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets,” *Physical Review Letters*, vol. 59, pp. 799–802, aug 1987.
- [44] I. Affleck, “Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 115, pp. 477–528, sep 1988.
- [45] C. K. Majumdar and D. K. Ghosh, “On Next-Nearest-Neighbor Interaction in Linear Chain. II,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 10, pp. 1399–1402, aug 1969.
- [46] T. Kennedy, “Exact diagonalisations of open spin-1 chains,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 2, no. 26, p. 5737, 1990.
- [47] K. Chang, I. Affleck, G. W. Hayden, and Z. G. Soos, “A study of the bilinear-biquadratic spin-1 antiferromagnetic chain using the valence-bond basis,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 1, no. 1, p. 153, 1989.
- [48] E. S. Sørensen and A. P. Young, “Correlation length of the biquadratic spin-1 chain,” *Physical Review B*, vol. 42, pp. 754–759, jul 1990.
- [49] J. Deisz, “Spin and dimer correlations for  $S=1$  bilinear-biquadratic antiferromagnetic Heisenberg chains,” *Physical Review B*, vol. 46, pp. 2885–2890, aug 1992.
- [50] S. M. Girvin and D. P. Arovas, “Hidden topological order in integer quantum spin chains,” *Physica Scripta*, vol. T27, pp. 156–159, jan 1989.
- [51] Y. Hatsugai and M. Kohmoto, “Numerical study of the hidden antiferromagnetic order in the Haldane phase,” *Physical Review B*, vol. 44, pp. 11789–11794, dec 1991.
- [52] K. Kubo, “Spin correlations in the  $S=1$  XXZ chain,” *Physical Review B*, vol. 46, pp. 866–873, jul 1992.
- [53] F. C. Alcaraz and Y. Hatsugai, “String correlation functions in the anisotropic spin-1 Heisenberg chain,” *Physical Review B*, vol. 46, pp. 13914–13918, dec 1992.
- [54] U. Schollwöck, T. Jolicoeur, and T. Garel, “Onset of incommensurability at the valence-bond-solid point in the  $S=1$  quantum spin chain,” *Physical Review B*, vol. 53, pp. 3304–3311, feb 1996.
- [55] E. Polizzi, F. Mila, and E. S. Sørensen, “ $S=1/2$  chain-boundary excitations in the Haldane phase of one-dimensional  $S=1$  systems,” *Physical Review B*, vol. 58, pp. 2407–2410, aug 1998.
- [56] S.-W. Tsai and J. B. Marston, “Density-matrix renormalization-group analysis of quantum critical points: Quantum spin chains,” *Physical Review B*, vol. 62, pp. 5546–5557, sep 2000.

- 
- [57] A. Läuchli, G. Schmid, and S. Trebst, “Spin nematics correlations in bilinear-biquadratic  $S=1$  spin chains,” *Physical Review B*, vol. 74, p. 144426, oct 2006.
- [58] F. D. M. Haldane, “Topological Quantum Matter,” *Nobel Lecture*, 2016.
- [59] F. Haldane, “Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the  $O(3)$  nonlinear sigma model,” *Physics Letters A*, vol. 93, pp. 464–468, feb 1983.
- [60] M. Greiter and S. Rachel, “Valence bond solids for  $SU(n)$  spin chains: Exact models, spinon confinement, and the Haldane gap,” *Physical Review B*, vol. 75, p. 184441, may 2007.
- [61] E. Fradkin and M. Stone, “Topological terms in one- and two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets,” *Physical Review B*, vol. 38, pp. 7215–7218, oct 1988.
- [62] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Physics*, vol. 23. Cambridge: Cambridge University Press, 2013.
- [63] D. C. Cabra and P. Pujol, “Field-theoretical methods in quantum magnetism,” in *Quantum Magnetism*, pp. 253–305, Springer, Berlin, Heidelberg, 2004.
- [64] T. Einarsson and H. Johannesson, “Effective-action approach to the frustrated Heisenberg antiferromagnet in two dimensions,” *Physical Review B*, vol. 43, pp. 5867–5882, mar 1991.
- [65] J. N. Schulman and J. D. Dow, “On the theory of the KVV auger spectrum of Li,” *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 20, no. S15, pp. 437–443, 1981.
- [66] A. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*. Texts and Monographs in Physics, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 ed., 1986.
- [67] P. B. Wiegmann, “Superconductivity in strongly correlated electronic systems and confinement versus deconfinement phenomenon,” *Physical Review Letters*, vol. 60, pp. 821–824, feb 1988.
- [68] P. Wiegmann, “Multivalued functionals and geometrical approach for quantization of relativistic particles and strings,” *Nuclear Physics B*, vol. 323, pp. 311–329, sep 1989.
- [69] J. R. Klauder, “Path integrals and stationary-phase approximations,” *Physical Review D*, vol. 19, pp. 2349–2356, apr 1979.
- [70] R. Shankar, “Holes in a quantum antiferromagnet: New approach and exact results,” *Physical Review Letters*, vol. 63, pp. 203–206, jul 1989.
- [71] R. Shankar, “Holes in a Quantum Antiferromagnet: New Approach and Exact Results—Erratum,” *Physical Review Letters*, vol. 63, pp. 1029–1029, aug 1989.

## Bibliographie

---

- [72] J. Wess and B. Zumino, "Consequences of anomalous ward identities," *Physics Letters B*, vol. 37, pp. 95–97, nov 1971.
- [73] E. Witten, "Global aspects of current algebra," *Nuclear Physics B*, vol. 223, pp. 422–432, aug 1983.
- [74] M. Stone, "Born-Oppenheimer approximation and the origin of Wess-Zumino terms: Some quantum-mechanical examples," *Physical Review D*, vol. 33, pp. 1191–1194, feb 1986.
- [75] J. E. Avron, R. Seiler, and B. Simon, "Homotopy and Quantization in Condensed Matter Physics," *Physical Review Letters*, vol. 51, pp. 51–53, jul 1983.
- [76] B. Simon, "Holonomy, the Quantum Adiabatic Theorem, and Berry's Phase," *Physical Review Letters*, vol. 51, pp. 2167–2170, dec 1983.
- [77] M. V. Berry, "Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes," *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 392, pp. 45–57, mar 1984.
- [78] A. Polyakov, "Interaction of goldstone particles in two dimensions. Applications to ferromagnets and massive Yang-Mills fields," *Physics Letters B*, vol. 59, pp. 79–81, oct 1975.
- [79] I. Affleck, "Field theory methods and quantum critical phenomena," in *Fields, Strings and Critical Phenomena* (E. Brézin and J. Zinn-Justin, eds.), vol. Proceedings of the Les Houches Summer School 1988 of *Session XLIX*, p. 563, Amsterdam: North-Holland, 1990.
- [80] R. Shankar and N. Read, "The  $\theta = \pi$  nonlinear sigma model is massless," *Nuclear Physics B*, vol. 336, pp. 457–474, jun 1990.
- [81] A. Moreo, "Conformal anomaly and critical exponents of Heisenberg spin models with half-integer spin," *Physical Review B*, vol. 36, pp. 8582–8586, dec 1987.
- [82] T. Ziman and H. J. Schulz, "Are antiferromagnetic spin chains representations of the higher Wess-Zumino-Witten models?," *Physical Review Letters*, vol. 59, pp. 140–143, jul 1987.
- [83] S. Liang, "Monte Carlo calculations of the correlation functions for Heisenberg spin chains at  $T = 0$ ," *Physical Review Letters*, vol. 64, pp. 1597–1600, mar 1990.
- [84] S. R. White and D. A. Huse, "Numerical renormalization-group study of low-lying eigenstates of the antiferromagnetic  $S = 1$  Heisenberg chain," *Physical Review B*, vol. 48, pp. 3844–3852, aug 1993.
- [85] I. Affleck and F. D. M. Haldane, "Critical theory of quantum spin chains," *Physical Review B*, vol. 36, pp. 5291–5300, oct 1987.

- 
- [86] E. Witten, “Non-abelian bosonization in two dimensions,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 92, pp. 455–472, dec 1984.
- [87] M. P. Nightingale and H. W. J. Blöte, “Gap of the linear spin-1 Heisenberg antiferromagnet: A Monte Carlo calculation,” *Physical Review B*, vol. 33, pp. 659–661, jan 1986.
- [88] T. Sakai and M. Takahashi, “Effect of the Haldane gap on quasi-one-dimensional systems,” *Physical Review B*, vol. 42, pp. 4537–4543, sep 1990.
- [89] E. S. Sørensen and I. Affleck, “Large-scale numerical evidence for Bose condensation in the  $S = 1$  antiferromagnetic chain in a strong field,” *Physical Review Letters*, vol. 71, pp. 1633–1636, sep 1993.
- [90] U. Schollwöck and T. Jolicoeur, “Haldane gap and hidden order in the  $s = 2$  antiferromagnetic quantum spin chain,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 30, no. 8, p. 493, 1995.
- [91] F. Pollmann, E. Berg, A. M. Turner, and M. Oshikawa, “Symmetry protection of topological phases in one-dimensional quantum spin systems,” *Physical Review B*, vol. 85, p. 075125, feb 2012.
- [92] T. Kennedy and H. Tasaki, “Hidden  $Z_2 \times Z_2$  symmetry breaking in Haldane-gap antiferromagnets,” *Physical Review B*, vol. 45, pp. 304–307, jan 1992.
- [93] T. Kennedy and H. Tasaki, “Hidden symmetry breaking and the Haldane phase in  $S = 1$  quantum spin chains,” *Communications in Mathematical Physics*, vol. 147, pp. 431–484, 1992.
- [94] M. Oshikawa, “Hidden  $Z_2 \times Z_2$  symmetry in quantum spin chains with arbitrary integer spin,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 4, pp. 7469–7488, sep 1992.
- [95] F. Anfuso and A. Rosch, “Fragility of string orders,” *Physical Review B*, vol. 76, p. 085124, aug 2007.
- [96] X. Zhou, J.-S. Pan, Z.-X. Liu, W. Zhang, W. Yi, G. Chen, and S. Jia, “Symmetry-Protected Topological States for Interacting Fermions in Alkaline-Earth-Like Atoms,” *Physical Review Letters*, vol. 119, p. 185701, nov 2017.
- [97] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, “Two soluble models of an antiferromagnetic chain,” *Annals of Physics*, vol. 16, no. 3, pp. 407–466, 1961.
- [98] I. Affleck and E. H. Lieb, “A proof of part of Haldane’s conjecture on spin chains,” *Letters in Mathematical Physics*, vol. 12, pp. 57–69, jul 1986.
- [99] M. Oshikawa, M. Yamanaka, and I. Affleck, “Magnetization Plateaus in Spin Chains: “Haldane Gap” for Half-Integer Spins,” *Physical Review Letters*, vol. 78, pp. 1984–1987, mar 1997.



## Bibliographie

---

- [100] M. Oshikawa, “Commensurability, Excitation Gap, and Topology in Quantum Many-Particle Systems on a Periodic Lattice,” *Physical Review Letters*, vol. 84, pp. 1535–1538, feb 2000.
- [101] M. B. Hastings, “Lieb-Schultz-Mattis in higher dimensions,” *Physical Review B*, vol. 69, p. 104431, mar 2004.
- [102] C. M. Jian, Z. Bi, and C. Xu, “Lieb-Schultz-Mattis theorem and its generalizations from the perspective of the symmetry-protected topological phase,” *Physical Review B*, vol. 97, no. 5, pp. 1–13, 2018.
- [103] M. Lajkó, K. Wamer, F. Mila, and I. Affleck, “Generalization of the Haldane conjecture to SU(3) chains,” *Nuclear Physics B*, vol. 924, pp. 508–577, nov 2017.
- [104] M. Greiter, S. Rachel, and D. Schuricht, “Exact results for SU(3) spin chains: Trimer states, valence bond solids, and their parent Hamiltonians,” *Physical Review B*, vol. 75, p. 060401, feb 2007.
- [105] T. D. Stanescu, *Introduction to Topological Quantum Matter & Quantum Computation*. Boca Raton, FL: Taylor & Francis Group, CRC Press ed., 2016.
- [106] B. A. Bernevig, *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, 2013.
- [107] S.-Q. Shen, *Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters*. Springer Series in Solid-State Sciences 174, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 ed., 2012.
- [108] M. Franz and L. Molenkamp, *Topological Insulators*. Elsevier, 2013.
- [109] K. C. Hassan M.Z., “Colloquium: Topological insulators,” *Rev.Mod.Prentice Hallys.*, vol. 82, p. 3045, 2010.
- [110] M. Z. Hasan and J. E. Moore, “Three-dimensional topological insulators,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 2, no. 1, pp. 55–78, 2011.
- [111] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, “Topological insulators and superconductors,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 83, pp. 1057–1110, oct 2011.
- [112] Y. Ando, “Topological Insulator Materials,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 82, p. 102001, oct 2013.
- [113] R. A. Römer and M. Schreiber, *Anderson Localization and Its Ramifications: Disorder, Phase Coherence and Electron Correlations*. Lecture Notes in Physics 630, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2004.
- [114] M. R. Zirnbauer, “Riemannian symmetric superspaces and their origin in random-matrix theory,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 37, pp. 4986–5018, oct 1996.

- [115] A. Altland and M. R. Zirnbauer, “Nonstandard symmetry classes in mesoscopic normal-superconducting hybrid structures,” *Physical Review B*, vol. 55, pp. 1142–1161, jan 1997.
- [116] F. J. Dyson, “The Threefold Way. Algebraic Structure of Symmetry Groups and Ensembles in Quantum Mechanics,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 3, pp. 1199–1215, nov 1962.
- [117] A. W. W. Ludwig, “Topological phases: classification of topological insulators and superconductors of non-interacting fermions, and beyond,” *Physica Scripta*, vol. T168, p. 014001, dec 2016.
- [118] A. Kitaev, “Periodic table for topological insulators and superconductors,” in *AIP Conference Proceedings*, vol. 1134, pp. 22–30, AIP, 2009.
- [119] S. Ryu, A. P. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, “Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy,” *New Journal of Physics*, vol. 12, no. 6, p. 065010, 2010.
- [120] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, A. W. W. Ludwig, V. Lebedev, and M. Feigel’man, “Classification of Topological Insulators and Superconductors,” in *AIP Conference Proceedings*, vol. 1134, pp. 10–21, AIP, 2009.
- [121] R. Bott, “The periodicity theorem for the classical groups and some of its applications,” *Advances in Mathematics*, vol. 4, pp. 353–411, jun 1970.
- [122] P. Fendley, “Critical Points in Two-Dimensional Replica Sigma Models,” in *New Theoretical Approaches to Strongly Correlated Systems*, pp. 141–161, Dordrecht: Springer Netherlands, 2001.
- [123] Z.-C. Gu and X.-G. Wen, “Tensor-entanglement-filtering renormalization approach and symmetry-protected topological order,” *Physical Review B*, vol. 80, p. 155131, oct 2009.
- [124] L. Fidkowski and A. Kitaev, “Effects of interactions on the topological classification of free fermion systems,” *Physical Review B*, vol. 81, p. 134509, apr 2010.
- [125] L. Fidkowski and A. Kitaev, “Topological phases of fermions in one dimension,” *Physical Review B*, vol. 83, p. 075103, feb 2011.
- [126] A. Y. Kitaev, “Unpaired Majorana fermions in quantum wires,” *Physics-Uspekhi*, vol. 44, pp. 131–136, oct 2001.
- [127] S. Ryu, “Interacting topological phases and quantum anomalies,” *Physica Scripta*, vol. T164, p. 014009, dec 2015.
- [128] T. Senthil, “Symmetry-Protected Topological Phases of Quantum Matter,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 6, pp. 299–324, mar 2015.

## Bibliographie

---

- [129] A. M. Turner and A. Vishwanath, “Beyond Band Insulators: Topology of Semi-metals and Interacting Phases,” *ArXiv e-prints*, Jan. 2013.
- [130] X. Chen, Z.-C. Gu, and X.-G. Wen, “Local unitary transformation, long-range quantum entanglement, wave function renormalization, and topological order,” *Physical Review B*, vol. 82, p. 155138, oct 2010.
- [131] F. Verstraete, J. I. Cirac, J. I. Latorre, E. Rico, and M. M. Wolf, “Renormalization-Group Transformations on Quantum States,” *Physical Review Letters*, vol. 94, p. 140601, apr 2005.
- [132] A. Kitaev and J. Preskill, “Topological Entanglement Entropy,” *Physical Review Letters*, vol. 96, p. 110404, mar 2006.
- [133] M. Levin and X.-G. Wen, “Detecting Topological Order in a Ground State Wave Function,” *Physical Review Letters*, vol. 96, p. 110405, mar 2006.
- [134] X. Chen, Z.-C. Gu, Z.-X. Liu, and X.-G. Wen, “Symmetry protected topological orders and the group cohomology of their symmetry group,” *Physical Review B*, vol. 87, p. 155114, apr 2013.
- [135] K. Duivenvoorden and T. Quella, “Topological phases of spin chains,” *Physical Review B*, vol. 87, p. 125145, mar 2013.
- [136] P. Fromholz, S. Capponi, P. Lecheminant, D. J. Papoular, and K. Totsuka, ““Haldane” phases with ultracold fermionic atoms in double-well optical lattices -supplemental material -,” *ArXiv e-prints*, Sept. 2017.
- [137] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. a. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven, “Signatures of Majorana Fermions in Hybrid Superconductor-Semiconductor Nanowire Devices,” *Science*, vol. 336, pp. 1003–1007, may 2012.
- [138] J. R. Williams, A. J. Bestwick, P. Gallagher, S. S. Hong, Y. Cui, A. S. Bleich, J. G. Analytis, I. R. Fisher, and D. Goldhaber-Gordon, “Unconventional Josephson effect in hybrid superconductor-topological insulator devices,” *Physical Review Letters*, vol. 109, no. 5, pp. 1–5, 2012.
- [139] L. P. Rokhinson, X. Liu, and J. K. Furdyna, “The fractional a.c. Josephson effect in a semiconductor-superconductor nanowire as a signature of Majorana particles,” *Nature Physics*, vol. 8, no. 11, pp. 795–799, 2012.
- [140] J. P. Renard, M. Verdagner, L. P. Regnault, W. A. C. Erkelens, J. Rossat-Mignod, and W. G. Stirling, “Presumption for a Quantum Energy Gap in the Quasi-One-Dimensional  $S=1$  Heisenberg Antiferromagnet  $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$ ,” *Europhysics Letters (EPL)*, vol. 3, pp. 945–952, 1987.

- [141] P. Gaveau, J. P. Boucher, L. P. Regnault, and J. P. Renard, “Low-frequency fluctuations in  $S = 1$  Heisenberg antiferromagnetic chains: nuclear spin relaxation in high field in nickel ethylenediamine nitrite perchlorate  $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$  (NENP).,” *Europhysics Letters*, vol. 12, no. 7, pp. 647–652, 1990.
- [142] L. C. Brunel, T. Brill, I. Zaliznyak, J. P. Boucher, and J. P. Renard, “Magnon spin resonance in the Haldane spin chains of  $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2(\text{ClO}_4)$ ,” *Physical Review Letters*, vol. 69, pp. 1699–1702, sep 1992.
- [143] L. P. Regnault, I. Zaliznyak, J. P. Renard, and C. Vettier, “Inelastic-neutron-scattering study of the spin dynamics in the Haldane-gap system  $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2\text{ClO}_4$ ,” *Physical Review B*, vol. 50, no. 13, pp. 9174–9187, 1994.
- [144] J. P. Renard, M. Verdaguer, L. P. Regnault, W. A. Erkelens, J. Rossat-Mignod, J. Ribas, W. G. Stirling, and C. Vettier, “Quantum energy gap in two quasi-one-dimensional  $S=1$  Heisenberg antiferromagnets,” *Journal of Applied Physics*, vol. 63, no. 8, pp. 3538–3542, 1988.
- [145] T. Takeuchi, H. Hori, M. Date, T. Yosida, K. Katsumata, J. Renard, V. Gadet, and M. Verdaguer, “High field magnetization of Haldane materials TMNIN and NINAZ,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 104-107, pp. 813–814, feb 1992.
- [146] J. Darriet and L. P. Regnault, “The compound  $\text{Y}_2\text{BaNiO}_5$ : A new example of a haldane gap in a  $S = 1$  magnetic chain,” *Solid State Communications*, vol. 86, no. 7, pp. 409–412, 1993.
- [147] W. J. Buyers, R. M. Morra, R. L. Armstrong, M. J. Hogan, P. Gerlach, and K. Hirakawa, “Experimental evidence for the Haldane gap in a spin-1 nearly isotropic, antiferromagnetic chain,” *Physical Review Letters*, vol. 56, no. 4, pp. 371–374, 1986.
- [148] G. E. Granroth, M. W. Meisel, M. Chaparala, T. Jolicœur, B. H. Ward, and D. R. Talham, “Experimental evidence of a haldane gap in an  $S = 2$  quasi-linear-chain antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, pp. 1616–1619, Aug 1996.
- [149] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, “Many-body physics with ultracold gases,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 80, no. 3, pp. 885–964, 2008.
- [150] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbène, “Quantum simulations with ultracold quantum gases,” *Nature Physics*, vol. 8, no. 4, pp. 267–276, 2012.
- [151] M. Lewenstein, A. Sanpera, and V. Ahufinger, *Ultracold Atoms in Optical Lattices*. Oxford Scholarship Online, 2012.
- [152] J. Söding, D. Guéry-Odelin, P. Desbiolles, G. Ferrari, and J. Dalibard, “Giant Spin Relaxation of an Ultracold Cesium Gas,” *Physical Review Letters*, vol. 80, pp. 1869–1872, mar 1998.

## Bibliographie

---

- [153] H. Feshbach, “Unified theory of nuclear reactions,” *Annals of Physics*, vol. 5, pp. 357–390, dec 1958.
- [154] U. Fano, “Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts,” *Physical Review*, vol. 124, pp. 1866–1878, dec 1961.
- [155] R. Grimm, M. Weidemüller, and Y. B. Ovchinnikov, “Optical Dipole Traps for Neutral Atoms,” in *Adv. At., Mol., Opt. Phys.*, vol. 42, pp. 95–170, Elsevier Inc., 2000.
- [156] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, “Observation of Feshbach resonances in a Bose–Einstein condensate,” *Nature*, vol. 392, pp. 151–154, mar 1998.
- [157] K. Enomoto, K. Kasa, M. Kitagawa, and Y. Takahashi, “Optical Feshbach Resonance Using the Intercombination Transition,” *Physical Review Letters*, vol. 101, p. 203201, nov 2008.
- [158] I. Bergstrom, C. Carlberg, and R. Schuch, “Trapped charged particles and fundamental applications,” in *Proceedings of the Nobel Symposium 91*, Singapore : World Scientific, 1995.
- [159] P. K. Ghosh, *Ions traps*. Clarendon Press, 1995.
- [160] D. E. Pritchard, E. L. Raab, V. Bagnato, C. E. Wieman, and R. N. Watts, “Light Traps Using Spontaneous Forces,” *Physical Review Letters*, vol. 57, pp. 310–313, jul 1986.
- [161] E. L. Raab, M. Prentiss, A. Cable, S. Chu, and D. E. Pritchard, “Trapping of Neutral Sodium Atoms with Radiation Pressure,” *Physical Review Letters*, vol. 59, pp. 2631–2634, dec 1987.
- [162] A. L. Migdall, J. V. Prodan, W. D. Phillips, T. H. Bergeman, and H. J. Metcalf, “First Observation of Magnetically Trapped Neutral Atoms,” *Physical Review Letters*, vol. 54, pp. 2596–2599, jun 1985.
- [163] T. Bergeman, G. Erez, and H. J. Metcalf, “Magnetostatic trapping fields for neutral atoms,” *Physical Review A*, vol. 35, pp. 1535–1546, feb 1987.
- [164] L. Chomaz, L. Corman, T. Bienaimé, R. Desbuquois, C. Weitenberg, S. Nascimbène, J. Beugnon, and J. Dalibard, “Emergence of coherence via transverse condensation in a uniform quasi-two-dimensional Bose gas,” *Nature Communications*, vol. 6, p. 6162, dec 2015.
- [165] S. Peil, J. V. Porto, B. L. Tolra, J. M. Obrecht, B. E. King, M. Subbotin, S. L. Rolston, and W. D. Phillips, “Patterned loading of a Bose-Einstein condensate into an optical lattice,” *Physical Review A*, vol. 67, p. 051603, may 2003.

- 
- [166] Z. Hadzibabic, S. Stock, B. Battelier, V. Bretin, and J. Dalibard, "Interference of an Array of Independent Bose-Einstein Condensates," *Physical Review Letters*, vol. 93, p. 180403, oct 2004.
- [167] P. Jessen and I. Deutsch, "Optical Lattices," in *Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 37, pp. 95–138, Academic Press Inc., 1996.
- [168] G. K. Brennen, C. M. Caves, P. S. Jessen, and I. H. Deutsch, "Quantum Logic Gates in Optical Lattices," *Physical Review Letters*, vol. 82, pp. 1060–1063, feb 1999.
- [169] D. Jaksch, H.-J. Briegel, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, "Entanglement of Atoms via Cold Controlled Collisions," *Physical Review Letters*, vol. 82, pp. 1975–1978, mar 1999.
- [170] O. Mandel, M. Greiner, A. Widera, T. Rom, T. W. Hänsch, and I. Bloch, "Coherent Transport of Neutral Atoms in Spin-Dependent Optical Lattice Potentials," *Physical Review Letters*, vol. 91, p. 010407, jul 2003.
- [171] E. G. Dalla Torre, E. Berg, and E. Altman, "Hidden Order in 1D Bose Insulators," *Physical Review Letters*, vol. 97, p. 260401, dec 2006.
- [172] E. Berg, E. G. Dalla Torre, T. Giamarchi, and E. Altman, "Rise and fall of hidden string order of lattice bosons," *Physical Review B*, vol. 77, p. 245119, jun 2008.
- [173] G. G. Batrouni, R. T. Scalettar, V. G. Rousseau, and B. Grémaud, "Competing Supersolid and Haldane Insulator Phases in the Extended One-Dimensional Bosonic Hubbard Model," *Physical Review Letters*, vol. 110, p. 265303, jun 2013.
- [174] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, "Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms," *Nature*, vol. 415, pp. 39–44, jan 2002.
- [175] A. G. Volosniev, D. V. Fedorov, A. S. Jensen, M. Valiente, and N. T. Zinner, "Strongly interacting confined quantum systems in one dimension," *Nature Communications*, vol. 5, pp. 1–7, 2015.
- [176] J. Decamp, P. Armagnat, B. Fang, M. Albert, A. Minguzzi, and P. Vignolo, "Exact density profiles and symmetry classification for strongly interacting multi-component Fermi gases in tight waveguides," *New Journal of Physics*, vol. 18, p. 055011, may 2016.
- [177] K. W. Madison, Y. Wang, A. M. Rey, and K. Bongs, *Annual Review of Cold Atoms and Molecules*. WORLD SCIENTIFIC, Oct 2012.
- [178] A. K. Kerman, *Theory of nuclear magnetic moments*. Chalk River, Ontario, 1952.
- [179] D. Das and V. Natarajan, "Absolute frequency measurement of the lithium D lines: Precise determination of isotope shifts and fine-structure intervals," *Physical Review A*, vol. 75, p. 052508, may 2007.

## Bibliographie

---

- [180] C. Wu, J.-p. Hu, and S.-c. Zhang, “Exact  $so(5)$  symmetry in the spin-3/2 fermionic system,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 91, p. 186402, Oct 2003.
- [181] C. WU, “Hidden Symmetry and Quantum Phases in Spin-3/2 Cold Atomic Systems,” *Modern Physics Letters B*, vol. 20, pp. 1707–1738, nov 2006.
- [182] P. Azaria, S. Capponi, and P. Lecheminant, “Three-component Fermi gas in a one-dimensional optical lattice,” *Physical Review A*, vol. 80, no. 4, p. 041604, 2009.
- [183] T. B. Ottenstein, T. Lompe, M. Kohnen, A. N. Wenz, and S. Jochim, “Collisional stability of a three-component degenerate fermi gas,” *Physical Review Letters*, vol. 101, no. 20, pp. 1–4, 2008.
- [184] J. H. Huckans, J. R. Williams, E. L. Hazlett, R. W. Stites, and K. M. O’Hara, “Three-Body Recombination in a Three-State Fermi Gas with Widely Tunable Interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 102, p. 165302, apr 2009.
- [185] M. M. Boyd, T. Zelevinsky, A. D. Ludlow, S. M. Foreman, S. Blatt, T. Ido, and J. Ye, “Optical Atomic Coherence at the 1-Second Time Scale,” *Science*, vol. 314, pp. 1430–1433, dec 2006.
- [186] M. A. Cazalilla, A. F. Ho, and M. Ueda, “Ultracold gases of ytterbium: ferromagnetism and Mott states in an  $SU(6)$  Fermi system,” *New Journal of Physics*, vol. 11, p. 103033, oct 2009.
- [187] A. V. Gorshkov, M. Hermele, V. Gurarie, C. Xu, P. S. Julienne, J. Ye, P. Zoller, E. Demler, M. D. Lukin, and A. M. Rey, “Two-orbital  $SU(N)$  magnetism with ultracold alkaline-earth atoms,” *Nature Physics*, vol. 6, pp. 289–295, apr 2010.
- [188] A. V. Gorshkov, M. Hermele, V. Gurarie, C. Xu, P. S. Julienne, J. Ye, P. Zoller, E. Demler, M. D. Lukin, and A. M. Rey, “Two-orbital  $SU(N)$  magnetism with ultracold alkaline-earth atoms, **Supplementary Information**,” *Nature Physics*, vol. 6, no. 4, pp. 289–295, 2010.
- [189] M. A. Cazalilla and A. M. Rey, “Ultracold Fermi gases with emergent  $SU(N)$  symmetry,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 77, p. 124401, dec 2014.
- [190] S. Taie, R. Yamazaki, S. Sugawa, and Y. Takahashi, “An  $SU(6)$  Mott insulator of an atomic Fermi gas realized by large-spin Pomeranchuk cooling,” *Nature Physics*, vol. 8, pp. 825–830, nov 2012.
- [191] G. Pagano, M. Mancini, G. Cappellini, P. Lombardi, F. Schäfer, H. Hu, X. J. Liu, J. Catani, C. Sias, M. Inguscio, and L. Fallani, “A one-dimensional liquid of fermions with tunable spin,” *Nature Physics*, vol. 10, no. 3, pp. 198–201, 2014.
- [192] X. Zhang, M. Bishof, S. L. Bromley, C. V. Kraus, M. S. Safronova, P. Zoller, a. M. Rey, and J. Ye, “Spectroscopic observation of  $SU(N)$ -symmetric interactions in Sr orbital magnetism,” *Science*, vol. 345, pp. 1467–1473, sep 2014.

- 
- [193] F. Scazza, C. Hofrichter, M. Höfer, P. C. De Groot, I. Bloch, and S. Fölling, “Observation of two-orbital spin-exchange interactions with ultracold SU(N)-symmetric fermions,” *Nature Physics*, vol. 10, no. 10, pp. 779–784, 2014.
- [194] M. Kitagawa, K. Enomoto, K. Kasa, Y. Takahashi, R. Ciuryło, P. Naidon, and P. S. Julienne, “Two-color photoassociation spectroscopy of ytterbium atoms and the precise determinations of s -wave scattering lengths,” *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*, vol. 77, no. 1, pp. 1–8, 2008.
- [195] Y. N. Martinez de Escobar, P. G. Mickelson, P. Pellegrini, S. B. Nagel, A. Traverso, M. Yan, R. Côté, and T. C. Killian, “Two-photon photoassociative spectroscopy of ultracold Sr88,” *Physical Review A*, vol. 78, p. 062708, dec 2008.
- [196] A. Traverso, R. Chakraborty, Y. N. Martinez de Escobar, P. G. Mickelson, S. B. Nagel, M. Yan, and T. C. Killian, “Inelastic and elastic collision rates for triplet states of ultracold strontium,” *Physical Review A*, vol. 79, p. 060702, jun 2009.
- [197] G. K. Campbell, M. M. Boyd, J. W. Thomsen, M. J. Martin, S. Blatt, M. D. Swallows, T. L. Nicholson, T. Fortier, C. W. Oates, S. A. Diddams, N. D. Lemke, P. Naidon, P. Julienne, J. Ye, and A. D. Ludlow, “Probing Interactions Between Ultracold Fermions,” *Science*, vol. 324, pp. 360–363, apr 2009.
- [198] P. Fromholz, S. Capponi, P. Lecheminant, D. J. Papoular, and K. Totsuka, ““Haldane” phases with ultracold fermionic atoms in double-well optical lattices,” *ArXiv e-prints*, Sept. 2017.
- [199] M. Atala, M. Aidelsburger, M. Lohse, J. T. Barreiro, B. Paredes, and I. Bloch, “Observation of chiral currents with ultracold atoms in bosonic ladders,” *Nature Physics*, vol. 10, pp. 588–593, aug 2014.
- [200] J. Sebby-Strabley, M. Anderlini, P. S. Jessen, and J. V. Porto, “Lattice of double wells for manipulating pairs of cold atoms,” *Physical Review A*, vol. 73, p. 033605, mar 2006.
- [201] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid stat physics*. Brooks Cole, 1976.
- [202] J. Basdevant, J. Dalibard, and M. Joffre, *Mécanique quantique*. Les Editions de l’Ecole polytechnique, 2002.
- [203] F. Bloch, “Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern,” *Zeitschrift für Physik*, vol. 52, pp. 555–600, jul 1929.
- [204] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons, Inc, eighth ed., 2004.
- [205] J. C. Slater and G. F. Koster, “Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem,” *Physical Review*, vol. 94, pp. 1498–1524, jun 1954.



## Bibliographie

---

- [206] I. Bloch and M. Greiner, “Exploring Quantum Matter with Ultracold Atoms in Optical Lattices,” in *Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 52, pp. 1–47, Elsevier, 2005.
- [207] F. Werner, O. Parcollet, A. Georges, and S. R. Hassan, “Interaction-Induced Adiabatic Cooling and Antiferromagnetism of Cold Fermions in Optical Lattices,” *Physical Review Letters*, vol. 95, p. 056401, jul 2005.
- [208] V. Bois, P. Fromholz, and P. Lecheminant, “One-dimensional two-orbital SU(N) ultracold fermionic quantum gases at incommensurate filling: A low-energy approach,” *Physical Review B*, vol. 93, no. 13, pp. 1–11, 2016.
- [209] J. Hubbard, “Electron Correlations in Narrow Energy Bands,” *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 276, pp. 238–257, nov 1963.
- [210] K. Kobayashi, M. Okumura, Y. Ota, S. Yamada, and M. Machida, “Nontrivial Haldane Phase of an Atomic Two-Component Fermi Gas Trapped in a 1D Optical Lattice,” *Physical Review Letters*, vol. 109, p. 235302, dec 2012.
- [211] K. Kobayashi, Y. Ota, M. Okumura, S. Yamada, and M. Machida, “Quantum phases in degenerate- $p$ -orbital attractive one-dimensional fermionic optical lattices,” *Physical Review A*, vol. 89, p. 023625, feb 2014.
- [212] V. Bois, S. Capponi, P. Lecheminant, M. Moliner, and K. Totsuka, “Phase diagrams of one-dimensional half-filled two-orbital SU(N) cold fermion systems,” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 91, no. 7, pp. 1–38, 2015.
- [213] M. M. Boyd, T. Zelevinsky, A. D. Ludlow, S. Blatt, T. Zanon-Willette, S. M. Foreman, and J. Ye, “Nuclear spin effects in optical lattice clocks,” *Physical Review A*, vol. 76, p. 022510, aug 2007.
- [214] A. Altland and B. D. Simons, *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge University Press, 2 ed., 2010.
- [215] K. G. Wilson, “The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 47, pp. 773–840, oct 1975.
- [216] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups,” *Physical Review Letters*, vol. 69, pp. 2863–2866, nov 1992.
- [217] P. DiFrancesco, P. Mathieu, and D. Senechal, *Conformal Field Theory*. Graduate texts in contemporary physics, Springer-Verlag New York, 1997.
- [218] H. Nonne, *Phases isolantes de Mott des atomes froids fermioniques unidimensionnels à plusieurs composantes*. PhD thesis, LPTM, Université de Cergy-Pontoise, 2011.

- 
- [219] V. Bois, *Effets de la deuxième orbitale dans les systèmes unidimensionnel de fermions alcalino-terreux ultrafroids*. PhD thesis, LPTM, Université de Cergy-Pontoise, 2017.
- [220] P. Fromholz, S. Capponi, P. Lecheminant, D. Papoular, and K. Totsuka, “Global phase diagram of one-dimensional  $su(n)$  fermions in double-well optical lattice.” En préparation.
- [221] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, and A. Tsvelik, *Bosonization and Strongly Correlated Systems*. Cambridge university press, UK, 1998.
- [222] I. Affleck, “Conformal Field Theory Approach to the Kondo Effect,” *Acta Physica Polonica B*, vol. 26, pp. 1869–1932, dec 1995.
- [223] L. Balents and M. P. A. Fisher, “Weak-coupling phase diagram of the two-chain Hubbard model,” *Physical Review B*, vol. 53, pp. 12133–12141, may 1996.
- [224] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 1996.
- [225] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 3 ed., 2007.
- [226] M.-S. Chang, W. Chen, and H.-H. Lin, “Renormalization Group Potential for Quasi-One-Dimensional Correlated Systems,” *Progress of Theoretical Physics Supplement*, vol. 160, no. 160, pp. 79–113, 2005.
- [227] A. Polyakov and P. Wiegmann, “Goldstone fields in two dimensions with multivalued actions,” *Physics Letters B*, vol. 141, pp. 223–228, jun 1984.
- [228] V. Knizhnik and A. Zamolodchikov, “Current algebra and Wess-Zumino model in two dimensions,” *Nuclear Physics B*, vol. 247, pp. 83–103, dec 1984.
- [229] D. J. Gross and A. Neveu, “Dynamical symmetry breaking in asymptotically free field theories,” *Physical Review D*, vol. 10, pp. 3235–3253, nov 1974.
- [230] H. Nonne, E. Boulat, S. Capponi, and P. Lecheminant, “Competing orders in the generalized Hund chain model at half filling,” *Physical Review B*, vol. 82, p. 155134, oct 2010.
- [231] H.-H. Lin, L. Balents, and M. P. A. Fisher, “Exact  $SO(8)$  symmetry in the weakly-interacting two-leg ladder,” *Physical Review B*, vol. 58, pp. 1794–1825, jul 1998.
- [232] A. B. Zamolodchikov and A. B. Zamolodchikov, “Factorized S-matrices in two dimensions as the exact solutions of certain relativistic quantum field theory models,” *Annals of Physics*, vol. 120, pp. 253–291, aug 1979.
- [233] M. Karowski and H. Thun, “Complete S-matrix of the  $O(2N)$  Gross-Neveu model,” *Nuclear Physics B*, vol. 190, pp. 61–92, jul 1981.

## Bibliographie

---

- [234] E. Boulat, P. Azaria, and P. Lecheminant, “Duality approach to one-dimensional degenerate electronic systems,” *Nuclear Physics B*, vol. 822, pp. 367–407, dec 2009.
- [235] E. Szirmai and J. Sólyom, “Possible phases of two coupled  $n$ -component fermionic chains determined using an analytic renormalization group method,” *Physical Review B*, vol. 74, p. 155110, oct 2006.
- [236] N. Andrei and J. H. Lowenstein, “Derivation of the chiral Gross-Neveu spectrum for arbitrary  $SU(N)$  symmetry,” *Physics Letters B*, vol. 90, no. 1-2, pp. 106–110, 1980.
- [237] S. Capponi, P. Lecheminant, and K. Totsuka, “Phases of one-dimensional  $SU(N)$  cold atomic Fermi gases-From molecular Luttinger liquids to topological phases,” *Annals of Physics*, vol. 367, pp. 50–95, 2016.
- [238] I. Affleck, “Exact critical exponents for quantum spin chains, non-linear  $\sigma$ -models at  $\theta=\pi$  and the quantum hall effect,” *Nuclear Physics B*, vol. 265, pp. 409–447, mar 1986.
- [239] J. M. Luttinger, “An Exactly Soluble Model of a Many-Fermion System,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 4, pp. 1154–1162, sep 1963.
- [240] S. Tomonaga, “Remarks on Bloch’s Method of Sound Waves applied to Many-Fermion Problems,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 5, pp. 544–569, jul 1950.
- [241] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 77, pp. 259–315, apr 2005.
- [242] S. R. White and D. J. Scalapino, “Ground-state properties of the doped three-leg t-J ladder,” *Physical Review B*, vol. 57, pp. 3031–3037, feb 1998.
- [243] S. R. White, “Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups,” *Physical Review B*, vol. 48, pp. 10345–10356, oct 1993.
- [244] J. Gaiete, “Angular Quantization and the Density Matrix Renormalization Group,” *Modern Physics Letters A*, vol. 16, pp. 1109–1116, jun 2001.
- [245] J. Gaiete, “Entanglement Entropy and The Density Matrix Renormalization Group,” *eprint arXiv:quant-ph/0301120*, Jan. 2003.
- [246] A. Galindo and M. A. Martín-Delgado, “Information and computation: Classical and quantum aspects,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 74, pp. 347–423, may 2002.
- [247] T. J. Osborne and M. a. Nielsen, “Entanglement, Quantum Phase Transitions, and Density Matrix Renormalization,” *Quantum Information Processing*, vol. 1, no. 1/2, pp. 45–53, 2002.
- [248] J. I. Latorre, E. Rico, and G. Vidal, “Ground state entanglement in quantum spin chains,” *Quantum Info. Comput.*, vol. 4, pp. 48–92, jan 2004.

- 
- [249] G. Sierra and T. Nishino, “The density matrix renormalization group method applied to interaction round a face Hamiltonians,” *Nuclear Physics B*, vol. 495, pp. 505–532, jun 1997.
- [250] I. P. McCulloch and M. Gulácsi, “Density Matrix Renormalization Group Method and Symmetries of the Hamiltonian,” *Australian Journal of Physics*, vol. 53, pp. 597–612, 2000.
- [251] I. P. McCulloch and M. Gulácsi, “Total spin in the density matrix renormalization group algorithm,” *Philosophical Magazine Letters*, vol. 81, pp. 447–453, jun 2001.
- [252] I. P. McCulloch and M. Gulácsi, “The non-abelian density matrix renormalization group algorithm,” *Europhysics Letters (EPL)*, vol. 57, pp. 852–858, mar 2002.
- [253] T. Wada, “Interaction-round-a-face density-matrix renormalization-group method applied to rotational-invariant quantum spin chains,” *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, vol. 61, no. 3, pp. 3199–3206, 2000.
- [254] T. Xiang, J. Lou, and Z. Su, “Two-dimensional algorithm of the density-matrix renormalization group,” *Physical Review B*, vol. 64, p. 104414, aug 2001.
- [255] A. Weichselbaum, S. Capponi, P. Lecheminant, A. M. Tsvelik, and A. M. Läuchli, “Unified phase diagram of antiferromagnetic SU(N) spin ladders,” *Physical Review B*, vol. 98, p. 085104, aug 2018.
- [256] P. Nataf and F. Mila, “Density matrix renormalization group simulations of SU(N) Heisenberg chains using standard Young tableau: Fundamental representation and comparison with a finite-size Bethe ansatz,” *Physical Review B*, vol. 97, p. 134420, apr 2018.
- [257] Ö. Legeza and G. Fáth, “Accuracy of the density-matrix renormalization-group method,” *Physical Review B*, vol. 53, pp. 14349–14358, jun 1996.
- [258] T. Morimoto, H. Ueda, T. Momoi, and A. Furusaki, “ $\mathbb{Z}_3$  symmetry-protected topological phases in the SU(3) AKLT model,” *Physical Review B*, vol. 90, pp. 1–23, sep 2014.
- [259] F. Pollmann, A. M. Turner, E. Berg, and M. Oshikawa, “Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension,” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 81, no. 6, pp. 1–10, 2010.
- [260] D. Pérez-García, M. M. Wolf, M. Sanz, F. Verstraete, and J. I. Cirac, “String Order and Symmetries in Quantum Spin Lattices,” *Physical Review Letters*, vol. 100, p. 167202, apr 2008.
- [261] K. Tanimoto and K. Totsuka, “Symmetry-protected topological order in SU(N) Heisenberg magnets –quantum entanglement and non-local order parameters,” *ArXiv e-prints*, Aug. 2015.

## Bibliographie

---

- [262] Y.-Y. Shi, L.-M. Duan, and G. Vidal, “Classical simulation of quantum many-body systems with a tree tensor network,” *Physical Review A*, vol. 74, p. 022320, aug 2006.
- [263] E. Schmidt, “Zur theorie der linearen und nichtlinearen integralgleichungen. i. teil: Entwicklung willkürlicher funktionen nach systemen vorgeschriebener,” *Mathematische Annalen*, vol. 63, pp. 433–476, 1907.
- [264] A. Ekert and P. L. Knight, “Entangled quantum systems and the Schmidt decomposition,” *American Journal of Physics*, vol. 63, pp. 415–423, may 1995.
- [265] H. Katsura, T. Hirano, and V. E. Korepin, “Entanglement in an SU ( n ) valence-bond-solid state,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 41, p. 135304, apr 2008.
- [266] H. Georgi, *Lie Algebras in Particle Physics*. Westview Press, 2nd ed., 1999.
- [267] D. Knuth, “Permutations, matrices, and generalized Young tableaux,” *Pacific Journal of Mathematics*, vol. 34, pp. 709–727, sep 1970.
- [268] C. Itzykson and M. Nauenberg, “Unitary Groups: Representations and Decompositions,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 38, pp. 95–120, jan 1966.
- [269] A. Alex, M. Kalus, A. Huckleberry, and J. von Delft, “A numerical algorithm for the explicit calculation of SU(N) and  $\{SL\}(N, \{C\})$  Clebsch-Gordan coefficients,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 52, pp. 023507–023507, Feb. 2011.
- [270] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Graduate Texts in Contemporary Physics, New York, NY: Springer New York, 1994.
- [271] H. Nonne, M. Moliner, S. Capponi, P. Lecheminant, and K. Totsuka, “Symmetry-protected topological phases of alkaline-earth cold fermionic atoms in one dimension,” *EPL (Europhysics Letters)*, vol. 102, no. 3, p. 37008, 2013.
- [272] K. Wan, P. Nataf, and F. Mila, “Exact diagonalization of SU(N) Heisenberg and Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki chains using the full SU(N) symmetry,” *Physical Review B*, vol. 96, p. 115159, sep 2017.
- [273] A. Bolens, K. Totsuka, F. Mila, and (*supervisors*), “Su(n)-orbital-coupled effective hamiltonian of ultra-cold fermions in one dimension,” Master’s thesis, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2014.
- [274] D. Poilblanc and F. Mila, “*Private communication*,” 2018.
- [275] P. Fromholz, S. Capponi, P. Lecheminant, and K. Totsuka, “33bar.” En préparation.
- [276] D.-S. Wang, I. Affleck, and R. Raussendorf, “Topological Qubits from Valence Bond Solids,” *Physical Review Letters*, vol. 120, p. 200503, may 2018.
- [277] Z. K. Tang, “Superconductivity in 4 Angstrom Single-Walled Carbon Nanotubes,” *Science*, vol. 292, pp. 2462–2465, jun 2001.

- [278] L. F. Livi, G. Cappellini, M. Diem, L. Franchi, C. Clivati, M. Frittelli, F. Levi, D. Calonico, J. Catani, M. Inguscio, and L. Fallani, “Synthetic Dimensions and Spin-Orbit Coupling with an Optical Clock Transition,” *Physical Review Letters*, vol. 117, p. 220401, nov 2016.
- [279] E. Dagotto and T. M. Rice, “Surprises on the Way from One- to Two-Dimensional Quantum Magnets: The Ladder Materials,” *Science*, vol. 271, pp. 618–623, feb 1996.

# Abstract

Topological phases exist beyond the standard Ginzburg-Landau paradigm that dominated the understanding of phases and phase transitions in condensed matter systems. Paradigmatic examples have been derived to establish a new theoretical basis that takes into consideration these topological aspects. The spin 1 Haldane phase is one of them for the unidimensional case. The present thesis aims to study this phase as well as its suggested generalizations by focusing on a way to implement them experimentally using ultracold fermionic alkaline-earth atoms, that involve an internal  $SU(N)$  symmetry. The model describing the experiment is called the double-well model and depicts a lattice of two interacting chains. The model is analysed at weak coupling, strong coupling and using a numerical tool. At half-filling and in the regime of strong repulsions between particles in the same well as well as two facing wells, a Haldane-like symmetry-protected topological phase is systematically expected for all  $N$ , including the "chiral" Haldane phase. The effective model obtained when  $N = 3$  is the  $\mathbf{3} - \bar{\mathbf{3}}$  ladder model (describing two spin chains, one in the fundamental representation of  $SU(N)$ , and the other in its conjugate) and is particularly explored.

## Résumé

Les phases topologiques sont des phases qui existent au delà du paradigme de Ginzburg-Landau qui dominait jusqu'à présent la compréhension des phases et transitions de phases qui apparaissent dans les systèmes de matière condensée. Des exemples paradigmatiques ont été créés pour établir un nouveau socle théorique qui rend compte de cet aspect topologique. La phase de Haldane de spin 1 est l'exemple souvent retenu pour les systèmes unidimensionnels. La présente thèse propose d'étudier cette phase et de lui trouver des généralisations en se concentrant sur l'étude d'un moyen de l'implémenter expérimentalement à l'aide d'atomes alcalino-terreux fermioniques ultra-froids qui présentent la symétrie  $SU(N)$ . Le modèle qui explique cette expérience, dit de double-puits car il décrit un réseau de deux chaînes en interactions, est analysé dans son régime de couplage faible, de couplage fort et par l'outil numérique. Au demi-remplissage, et dans le régime où les répulsions entre particules au sein d'un même puits, et entre puits qui se font face, sont importantes, une phase topologique protégée par la symétrie de type Haldane est systématiquement attendue pour tout  $N$ , dont la phase "chirale" Haldane. Le modèle effectif obtenu lorsque  $N = 3$ , l'échelle de spin  $\mathbf{3} - \bar{\mathbf{3}}$  (à deux chaînes de spins, l'une dans la représentation fondamentale de  $SU(3)$ , l'autre dans sa représentation conjuguée), y est détaillée.