



RÉSUMÉ DE LA THÈSE

présentée pour obtenir le grade de

Docteur en Sciences

Spécialité Physique Théorique

Phases isolantes de Mott des atomes froids fermioniques unidimensionnels à plusieurs composantes

par
Héloïse NONNE

Soutenue le 21 septembre 2011 devant la commission d'examen composée de :

M. Antoine GEORGES	CPHT, École polytechnique	Président
M. Thierry GIAMARCHI	DPMC, Genève	Rapporteur
M. Pierre PUJOL	LPT, Toulouse	Rapporteur
M. Patrick AZARIA	LPTMC, Jussieu	Examinateur
M. Thierry JOLICOEUR	LPTMS, Orsay	Examinateur
M. Philippe LECHEMINANT	LPTM, Cergy-Pontoise	Directeur de thèse

Phases isolantes de Mott des atomes froids fermioniques unidimensionnels à plusieurs composantes

Héloïse Nonne

Ce travail de thèse porte sur les systèmes unidimensionnels d'atomes froids fermioniques à plusieurs composantes, en interaction. Avant de détailler les résultats de notre travail, nous devons préciser sa problématique et expliquer ce sur quoi il porte. Il a pour cadre la physique de la matière condensée, dont l'objet est d'étudier les propriétés des diverses formes organisées que peut prendre la matière dans les conditions naturelles terrestres, ou dans les conditions que l'on peut créer artificiellement en laboratoire.

Qu'il soit naturel ou artificiel, la description précise d'un matériau permettant de comprendre sa structure et ses propriétés appelle l'établissement d'une théorie appropriée. Sous les conditions terrestres ou de laboratoire, la mécanique quantique, établie au début du siècle dernier, permet en principe la description complète et exacte d'un système donné de particules en interaction. Il est en effet possible d'écrire les équations décrivant le mouvement de chaque constituant élémentaire, en interaction avec tous les autres constituants. En pratique, le nombre gigantesque de ces constituants rend la résolution de ces équations impossible et inutile. Il s'agit alors de distinguer les phénomènes réellement importants de ceux que l'on peut négliger, en fonction des conditions dans lesquelles on étudie le système, définies par un certain nombre de paramètres physiques : température, pression, densité, etc. Ainsi, pour un domaine particulier de paramètres, on modélise le système par une théorie effective, qui décrit les phénomènes pertinents.

La théorie des électrons libres par exemple, suffit à décrire les phénomènes basiques de conduction électrique. Néanmoins, elle néglige complètement les interactions qui ont lieu entre les électrons et constitue une grossière approximation, valable pour un nombre limité de matériaux. Pour quantité de matériaux, il faut raffiner considérablement l'approche des électrons libres pour arriver à une description plus fidèle des phénomènes physiques observés. Heureusement, il existe des théories qui permettent de décrire une grande variété de matériaux dans un très vaste domaine de paramètres, c'est le phénomène d'universalité. De ce point de vue, le cas le plus exemplaire est celui de la théorie des liquides de Fermi [1, 2, 3], établie par Landau en 1957. Elle fournit une description excellente des propriétés

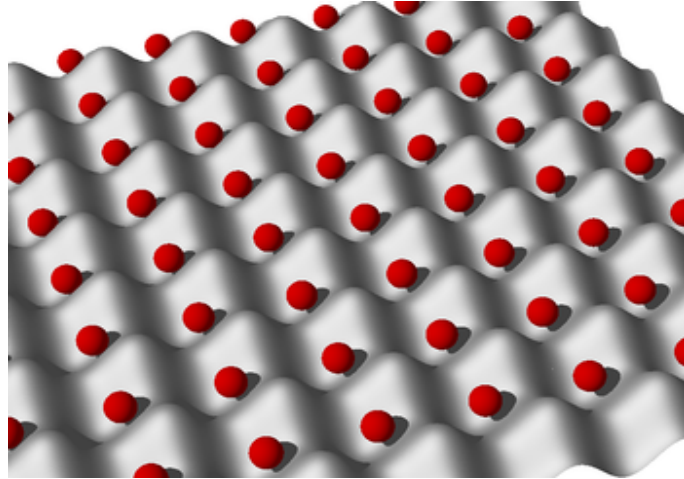


FIGURE 1 – Vue d’artiste d’un isolant de Mott : chacun des électrons se localise au fond du puits de potentiel créé par un des ions du réseau cristallin. Les électrons ne bougent plus : les degrés de liberté de charge sont gelés. (Image de Dennis Dickerscheid, Université d’Utrecht, Pays-Bas)

électroniques des métaux et semi-conducteurs simples tridimensionnels.

Cependant, il existe un grand nombre de phénomènes pour lesquels la théorie des liquides de Fermi s’effondre totalement ; c’est le cas dans beaucoup de matériaux dits « fortement corrélés » où les interactions jouent un rôle prépondérant. Ces trente dernières années, ils ont constitué l’un des axes principaux de la recherche en matière condensée car ils présentent des phénomènes exotiques jusqu’alors inconnus, comme par exemple la supraconductivité à haute température ou l’effet Hall quantique fractionnaire.

Un autre exemple qui nous intéresse tout particulièrement dans cette thèse est l’isolant de Mott [4], dont le premier exemple est l’oxyde de nickel (NiO), découvert en 1937 [5]. Les interactions entre électrons sont tellement fortes que ces derniers préfèrent se localiser sur les sites du réseau cristallin plutôt que de se déplacer, ce qui les obligerait à des collisions permanentes avec les autres électrons trop coûteuses en énergie (voir la figure 1).

C’est dans le cadre de la physique de ces systèmes fortement corrélés de matière condensée que se situe notre travail.

On qualifie très souvent les états exotiques de la matière qui ne sont pas décrits par des liquides de Fermi de « non-liquides de Fermi ». Le fait qu’on les décrive d’abord par ce qu’ils ne sont pas, montre à quel point il reste un long chemin à parcourir dans leur compréhension. L’enjeu consiste à entreprendre une classification méthodique de ces états, ou phases : pour un système donné, il faut déterminer précisément quelles phases exotiques il présente, dans quel domaine de paramètres, si elles sont critiques ou bien si elles possèdent un gap d’énergie, et caractériser les transitions entre les différentes phases (sont-elles classiques, quantiques, du premier ordre, continues?). Autrement dit, quelle théorie décrit fidèlement les phases et les transitions? On parle de « classe d’universalité » : une théorie définit une

classe, à laquelle appartiennent l'ensemble des phases de la matière qu'elle décrit. L'hélium 3 par exemple, et les phases métalliques des métaux « normaux », appartiennent à la classe d'universalité des liquides de Fermi, tandis que les phases métalliques des systèmes unidimensionnels appartiennent à la classe d'universalité des liquides de Luttinger, très différente de la classe des liquides de Fermi. Une fois que l'on a déterminé les phases et les transitions de phase selon le domaine de paramètres physique, on peut alors tracer un diagramme de phase, qui donne l'ensemble de ces phases et leurs limites dans l'espace des paramètres.

Dans cette optique, notre travail s'inscrit dans l'intention de classer les phases isolantes de Mott que peuvent présenter les systèmes fortement corrélés.

Dans notre travail, nous nous intéressons uniquement à ces systèmes unidimensionnels et nous nous plaçons à température nulle. Ces systèmes présentent des intérêts particuliers : d'un point de vue géométrique, leur basse dimensionnalité a tendance à augmenter les interactions. En effet, dans un système unidimensionnel, les collisions ont une très forte probabilité puisqu'il n'est pas possible pour un atome de contourner ses voisins. D'autre part, les fluctuations quantiques sont accrues. Cette combinaison de fortes interactions et de fortes fluctuations quantiques présage une physique exotique.

Ensuite, la simplicité des modèles qui décrivent les systèmes unidimensionnels permet leur résolution dans un certain cadre, résolution rendue souvent beaucoup plus difficile dès qu'on augmente la dimension. Nous disposons de méthodes très puissantes, qui sont propres aux systèmes unidimensionnels ou très difficilement adaptables aux plus hautes dimensionnalités. C'est le cas de la théorie conforme et de la bosonisation dont nous ferons largement usage dans cette thèse. En particulier, la théorie conforme a l'élégance de fournir une classification complète des systèmes unidimensionnels critiques ; elle permet en principe le calcul de toutes les quantités observables expérimentalement. Cet avantage remarquable est propre aux systèmes à une dimension ; dans les systèmes de plus haute dimensionnalité, l'outil perd de sa puissance.

Enfin, certaines méthodes numériques sont particulièrement adaptées aux systèmes unidimensionnels, comme l'algorithme du groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG) [6, 7, 8] qui appuie un grand nombre des résultats analytiques présentés dans cette thèse.

Ces trente dernières années, la recherche de nouveaux états exotiques de la matière a ouvert un nouveau champ de recherche : les solides artificiels. Les boîtes quantiques, relevant des nanotechnologies en sont un bel exemple. Il est en effet possible de construire des architectures confinant les particules quantiques dans un nombre restreint de dimensions spatiales. Les puits quantiques confinent les particules sur une dimension et permettent leur propagation dans les deux dimensions restantes, les fils quantiques les confinent sur deux dimensions (voir la figure 2), et les points quantiques dans les trois dimensions. Ces derniers peuvent être assimilés à des atomes artificiels que l'on peut organiser en un réseau

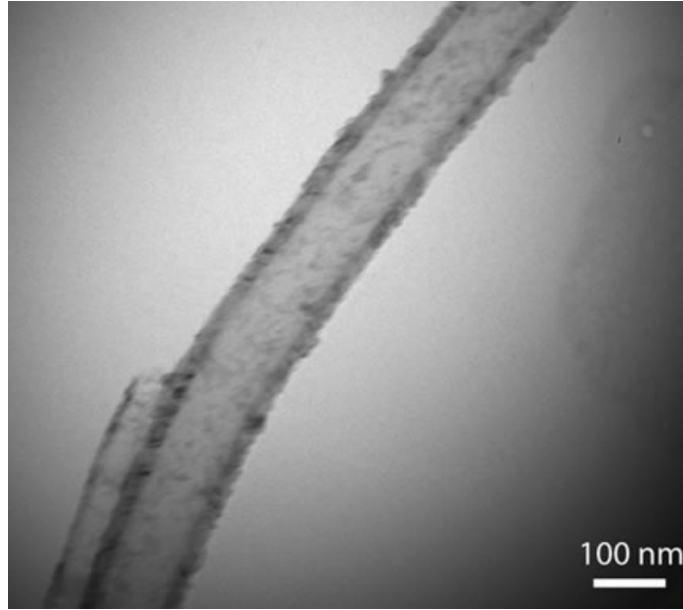


FIGURE 2 – Un exemple de fil quantique : vue d’un nanotube de carbone (à parois multiples) obtenue par microscopie électronique en transmission (Christopher M. Evans, Université de Rochester).

qui simule alors le réseau cristallin.

Ces solides artificiels permettent de reculer les frontières de la matière condensée et de sonder la matière à un niveau très fondamental. Ils renforcent la pertinence de notre travail car l’expérience a ainsi accès à l’unidimensionnalité, car si elle existe dans certains matériaux quasi-unidimensionnels comme les sels de Bechgaard [9], elle est néanmoins très rare naturellement et les paramètres expérimentaux sont plus difficilement contrôlables.

D’autre part, ces dernières années ont également vu l’émergence d’une nouvelle discipline de la physique : les atomes froids. L’intérêt considérable des gaz d’atomes froids consiste en ce que, aux très basses températures, les atomes peuplent les niveaux d’énergie les plus bas. Les statistiques quantiques de Bose-Einstein pour les bosons, et de Fermi-Dirac pour les fermions se manifestent alors au niveau macroscopique, ce qui fournit un terrain idéal pour l’étude des systèmes quantiques. L’équipe de Cornell et Wieman [10] et celle de Ketterle [11] ont réalisé les premiers condensats de Bose-Einstein en 1995, atteignant des températures de l’ordre de 170 nanokelvins (nK) [10]; Cornell, Wieman et Ketterle ont tous trois reçu le prix Nobel en 2001 pour cet exploit. On a également pu atteindre le régime de dégénérescence quantique pour la première fois en 1999 dans des gaz de fermions, avec des températures de l’ordre de 300 nK [12].

A ce stade, la physique des atomes froids ne concernait encore que les gaz en faible interaction. Néanmoins, il a fallu peu de temps aux physiciens de la matière condensée pour s’investir très fortement dans cette nouvelle discipline. En effet, à l’intérieur du piège optique ou magnéto-optique confinant le gaz d’atomes froids, il est possible de créer un réseau optique qui est aux atomes froids ce que le réseau cristallin est aux électrons dans

les systèmes habituels de la matière condensée [13]. Un tel réseau est obtenu par interférences de faisceaux lasers contra-propageants qui forment des ondes stationnaires. Comme le schématise la figure 3, il en résulte un réseau de sites constitués par des puits de potentiels qui tendent à piéger les atomes ; on obtient alors un solide artificiel.

Les atomes froids possèdent un avantage considérable sur la physique des matériaux et sur les solides artificiels mentionnés plus haut : les conditions expérimentales sont idéales car les paramètres du système sont hautement ajustables. En jouant sur les intensités et les longueurs d'onde des lasers, ou en faisant varier leurs orientations respectives, on peut créer des réseaux à une, deux ou trois dimensions, simples ou complexes [14, 15]. D'autre part, le régime des fortes corrélations est aujourd'hui tout à fait à la portée de l'expérience ; le moyen le plus direct de l'atteindre est d'utiliser les résonances de Feshbach [16] qui permettent de faire varier l'intensité des interactions entre atomes ; les interactions peuvent de plus être choisies comme attractives, ou répulsives. Ainsi, du fait de la très haute contrôlabilité du système, aussi bien du point de vue de la géométrie du réseau que des interactions, les atomes froids dans les réseaux optiques fournissent un terrain idéal pour étudier le régime des fortes interactions et explorer leurs comportements exotiques.

On peut donc considérer les atomes froids comme de véritables simulateurs quantiques qui offrent des possibilités inégalées dans la physique des matériaux où les paramètres du système sont par essence très contraints. En 2002, Anglin et Ketterle résumaient ainsi la situation [17] : « Notre discipline est maintenant à un tournant historique : nous passons de l'étude de la physique pour mieux comprendre le refroidissement des atomes, à l'étude des atomes froids afin de mieux comprendre la physique. » ¹

Nous avons expliqué plus haut comment à l'intérieur d'un système fortement corrélé, les interactions entre particules (atomes ou électrons, selon le système étudié) influent sur le mouvement de ces particules et peuvent conduire par exemple à une phase métallique ou bien à un isolant de Mott. Pour une particule, la position et le mouvement sont deux types de degrés de liberté. Les électrons sont des particules de spin-1/2 et leur composante de spin selon un axe peut prendre deux valeurs : 1/2 ou -1/2, up ou down. Le spin constitue donc un autre degré de liberté. Ainsi, selon les orientations des spins, up ou down, on peut observer différentes phases. Dans un isolant de Mott par exemple, le système peut être dans une configuration ferromagnétique, où tous les spins sont alignés et pointent tous dans la même direction, ou bien antiferromagnétique, où les spins sont tous selon un même axe, mais leurs orientations alternent ; on peut également observer le cas où les spins sont complètement désordonnés.

On conçoit alors aisément que l'introduction de degrés de liberté supplémentaires, par exemple des spins-3/2, dont la composante selon un axe peut prendre quatre valeurs : 3/2, 1/2, -1/2 et -3/2, peut conduire à de nouveaux types de phases.

C'est tout l'objet de ce travail de thèse que d'étudier les nouveaux types d'isolants de

1. Our field is now at a historic turning point, in which we are moving from studying physics in order to learn about atom cooling to studying cold atoms in order to learn about physics [17].

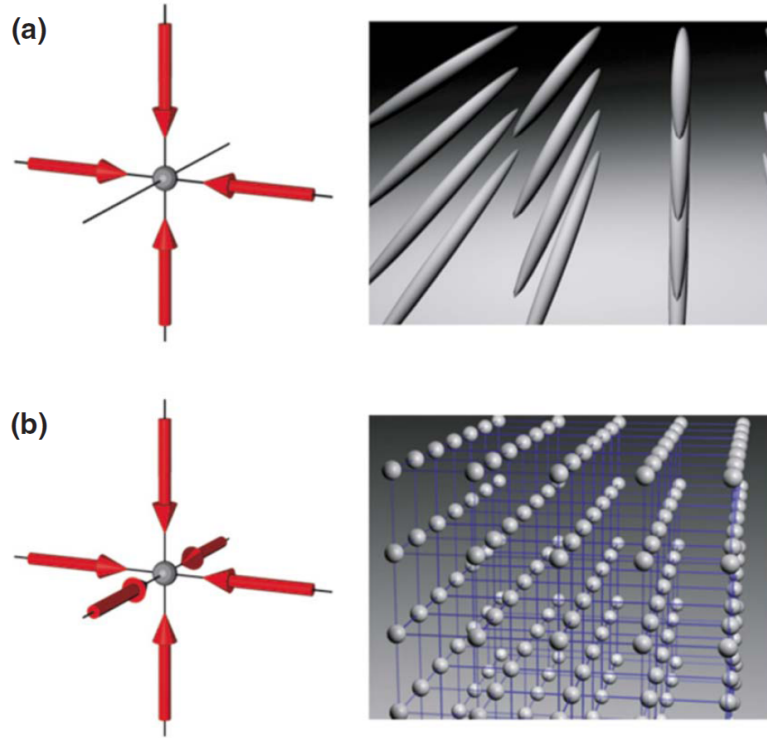


FIGURE 3 – Création d’un réseau optique [18] : a) avec deux paires de faisceaux contra-propageants et perpendiculaires agissant sur le gaz d’atomes froids, on crée un réseau de tubes où une dimension spatiale reste libre; b) avec trois paires de faisceaux perpendiculaires, on crée un réseau où toutes les dimensions spatiales sont contraintes. En chacun des sites (en gris) se trouve un puits de potentiel qui confine les atomes.

Mott que peuvent présenter des systèmes de fermions à plusieurs composantes, ou degrés de liberté.

Une telle situation est peu réaliste dans les matériaux accessibles en matière condensée car les électrons ont un spin-1/2. Ainsi pendant très longtemps, la physique de la matière condensée s’est principalement intéressée au cas des spins-1/2. Néanmoins, avec l’apparition des solides artificiels, des systèmes avec un grand nombre de degrés de liberté sont aujourd’hui à la portée des expériences.

Dans le cadre des atomes froids qui nous intéresse ici, plusieurs groupes ont récemment pu refroidir des atomes de type alcalinoterreux, comme le strontium 87 ou l’ytterbium 173, jusqu’au régime de dégénérescence quantique. Ces atomes présentent comme caractéristique principale d’avoir un spin nucléaire assez élevé ($I = 9/2$ et $5/2$ respectivement pour le strontium 87 et l’ytterbium 173) et un moment angulaire électronique nul. Le spin total hyperfin de l’atome est donc entièrement constitué du spin nucléaire. D’autre part, ces atomes présentent un état métastable dont la durée de vie a été estimée être de l’ordre d’une centaine de secondes pour strontium 87 [19] : ils peuvent donc se trouver dans l’état fondamental, ou dans l’état métastable, ce qui fournit encore un degré de liberté

supplémentaire. Ces atomes font l'objet des premier et troisième chapitres de cette thèse.

Les atomes alcalins comme le lithium 6 et le potassium 40 sont également prometteurs : ils ont un seul électron de valence qui appartient à l'orbitale s . Le couplage spin-orbital avec le spin nucléaire (I) conduit donc à deux valeurs possibles du spin total hyperfin : $F = I \pm 1/2$. A condition de pouvoir refroidir tous les niveaux hyperfins, il est donc possible de réaliser des systèmes d'atomes froids avec $2F + 1$ composantes. Les atomes alcalins font l'objet des chapitres quatre et cinq de cette thèse.

L'introduction de la thèse motive et détaille son cadre, qui vient d'être brièvement exposé ici. Elle s'attache d'abord à introduire les problématiques actuelles de la matière condensée, de la physique quantique en une dimension et des atomes froids. D'autre part, pour justifier la pertinence de ce travail, elle expose les divers systèmes expérimentaux qui permettent d'obtenir des particules quantiques en interaction à une dimension. A la fin de l'introduction sont présentés les modèles qui sont étudiés en détail dans le manuscrit.

Le premier chapitre est consacré aux atomes alcalinoterreux. Il présente d'abord les caractéristiques particulières de ces atomes et discute de la possibilité d'obtenir un système expérimental de fermions alcalinoterreux à deux composantes de spin nucléaire, soit avec de l'ytterbium 171, de spin nucléaire $I = 1/2$, soit avec des atomes fermioniques de spin plus élevé, comme le strontium 87, dont on ne piège que deux composantes de spin. La caractéristique la plus importante des alcalinoterreux est l'existence d'un état excité métastable : les atomes peuvent indifféremment se trouver dans l'état fondamental g ou dans l'état excité e , ce qui fournit un degré de liberté orbital qui s'ajoute au degré de liberté de spin $I = \pm 1/2$. Les atomes possèdent donc en tout quatre « couleurs ». En partant du modèle général décrivant ces atomes à quatre composantes en interaction, et chargés dans un réseau optique, on montre ensuite comment et sous quelles conditions, on dérive le modèle microscopique sur réseau qui constitue le véritable point de départ de notre analyse. Il s'agit un modèle de type Hubbard, avec des interactions densité-densité, mais également des interactions supplémentaires :

$$\begin{aligned}
H = & -t \sum_{i, m\alpha} \left(c_{m\alpha, i}^\dagger c_{m\alpha, i+1} + \text{h.c.} \right) - \mu \sum_i n_i \\
& + \frac{U}{2} \sum_{i, m} n_{m, i} (n_{m, i} - 1) + V \sum_i n_{g, i} n_{e, i} + V_{\text{ex}} \sum_{i, \alpha\beta} c_{g\alpha, i}^\dagger c_{e\beta, i}^\dagger c_{g\beta, i} c_{e\alpha, i}
\end{aligned} \tag{1}$$

où $c_{m\alpha, i}^\dagger$ est l'opérateur qui crée au site i un atome dans l'état orbital $m = g, e$ et de spin nucléaire $\alpha = \uparrow, \downarrow$ et $n_{m, i} = \sum_\alpha n_{m\alpha, i} = \sum_\alpha c_{m\alpha, i}^\dagger c_{m\alpha, i}$ est l'opérateur mesurant la densité d'atomes dans l'état orbital m au site i ; $n_i = n_{g\alpha, i} + n_{e\alpha, i}$ est l'opérateur de densité totale. Le premier terme est le terme de saut, le second, un potentiel chimique ajustant le nombre total d'atomes dans le système. Le terme en U représente les interactions de densité entre atomes de même état orbital m , tandis que le terme en V représente les interactions de densité entre les atomes d'états orbitaux différents. Enfin, le dernier terme est un terme

d'échange : sur un même site, deux atomes d'états orbitaux différents peuvent échanger leur spin nucléaire au prix d'une énergie V_{ex} . Nous considérons l'ensemble des domaines d'interaction, attractifs et répulsifs.

Nous nous attachons ensuite à présenter les hypothèses sur lesquelles reposent notre travail et à détailler très précisément toutes les symétries du modèle sur réseau. Nous expliquons également les domaines de paramètres microscopiques pour lesquels les symétries sont élargies. Ces symétries sont particulièrement importantes à comprendre car notre analyse en fait une utilisation intensive pour déduire le diagramme de phase du système. Cela nous permet également d'introduire des modèles électroniques propres à la matière condensée auxquels notre modèle est équivalent (le modèle de Hund généralisé) ou dont il est une généralisation, comme le modèle de Hubbard de symétrie $SU(4)$. Nous faisons également la connexion avec d'autres modèles pertinents d'atomes froids, dont le modèle des atomes froids de spin hyperfin $F = 3/2$, pertinent pour les atomes alcalins, qui est examiné en détail dans le chapitre 4. Ensuite, nous nous concentrons sur le cas du demi-remplissage, et expliquons comment ce cas est relié au modèle de Scalapino-Zhang-Hanke rencontré dans le contexte des échelles électroniques en matière condensée.

Le modèle est ensuite analysé au moyen d'une technique de fort couplage effectuée dans les domaines des paramètres microscopiques présentant de plus hautes symétries que la symétrie originale. Le fort couplage est une approche atomique, ou microscopique, qui consiste à partir du spectre d'énergie du modèle sur un site du réseau et à traiter perturbativement les termes cinétiques couplant les sites entre eux. Il s'agit donc de la limite où les termes interactions en U, V, V_{ex} dominent devant le terme de saut en t : $|U, V, V_{\text{ex}}| \gg t$. Cela nous permet d'extraire la physique principale exhibée par notre modèle et d'obtenir un diagramme de phase schématique. L'approche de fort couplage est une approche standard, qui a largement été utilisée et a fait ses preuves pour un grand nombre de modèles. Dans un souci de pédagogie, nous avons estimé nécessaire de présenter les détails de cette approche dans l'annexe A du manuscrit. Un des avantages importants du fort couplage est qu'il permet d'avoir une vision intuitive et physique des différentes phases du système. Nous donnons les résultats de l'analyse au second ordre et nous précisons leur domaine de validité pour chacune des phases.

Nous identifions ainsi sept phases isolantes de natures différentes, où tous les degrés de liberté sont gappés. Ces phases sont par la suite confirmées par une analyse complémentaire de basse énergie au troisième chapitre. Trois de ces phases sont dégénérées, c'est à dire qu'elles présentent deux états fondamentaux équivalents et brisent la symétrie de translation. Ces phases sont relativement conventionnelles car elles avaient déjà été remarquées dans plusieurs modèles ; ce sont les phases de Spin-Peierls présentant des atomes dimérisés sur deux sites voisins (voir la figure 4 (a)), d'onde de densité de charge où l'on observe une alternance portant sur le degré de liberté de charge, c'est-à-dire sur le nombre d'atomes occupant un site (figure 4 (b)), et enfin la phase d'onde de densité orbitale qui

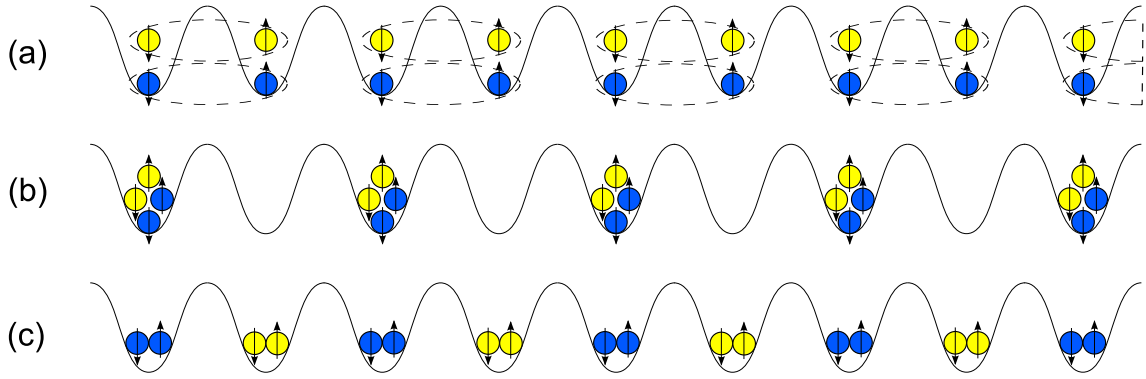


FIGURE 4 – Représentation schématique de l’un des deux états fondamentaux des trois phases dégénérées du modèle (1) révélées par l’analyse de fort couplage. Les atomes en bleu sont dans l’état fondamental g , la couleur jaune représente l’état excité métastable e . (a) La phase de Spin-Peierls contient des paires d’atomes dimérisées sur deux sites voisins dans l’état g et dans l’état e . (b) La phase d’onde de densité de charge où alternent des sites complètement occupés et des sites vides. (c) La phase d’onde de densité orbitale qui alterne des sites contenant deux atomes dans l’état g et des sites avec deux atomes dans l’état e . Pour ces trois phases, on passe d’un fondamental à l’autre par une translation d’un site du réseau.

porte sur le degré orbital (occupation de l’état fondamental g ou de l’état excité e) comme le montre la figure 4 (c).

Les quatre autres phases sont non-dégénérées, elles, n’ont qu’un seul état fondamental et par conséquent ne brisent pas de symétrie. La phase de singulets (voir la figure 5 (b)) est une phase triviale : dans cette phase, il y a deux atomes sur chaque site du réseau qui forment un singulet. Les trois autres phases présentent la physique de Haldane. La première de ces phases est la phase de Haldane de spin, qui fait intervenir le degré de liberté du spin total (la somme des spins de chaque état orbital, g et e). Son modèle effectif révélé par l’analyse de fort couplage est la chaîne de Heisenberg $SU(2)$ antiferromagnétique de spin-1. La physique de cette chaîne est bien connue et nous la décrivons à la fin du chapitre. Elle possède des propriétés absolument remarquables : en plus de posséder un gap, elle présente un ordre de Néel (antiferromagnétique) caché à longue portée. Il y a une alternance d’états de composante de spin total $S^z = \pm 1$ mais un nombre arbitraire d’états triplets avec $S^z = 0$ s’y intercalent, en diluant l’ordre antiferromagnétique (voir la figure 5 (a)). De plus, lorsque les conditions de bord sont ouvertes, elle libère des états de spin-1/2 aux bords [20]. Ces états de bord fractionnaires de spin-1/2 sont une signature d’un ordre topologique. Cette physique de Haldane se retrouve dans les deux dernières phases non dégénérées : la phase de Haldane de charge et la phase de Haldane orbitale. Dans ces deux cas, le modèle effectif est aussi une chaîne de Heisenberg $SU(2)$ antiferromagnétique, mais cette fois, l’opérateur qui intervient n’est pas le spin, mais un pseudo-spin de charge ou un pseudo-spin orbital. Ces opérateurs possèdent les mêmes propriétés que l’opérateur de spin, mais font respectivement intervenir les degrés de liberté de charge et les degrés orbitaux.

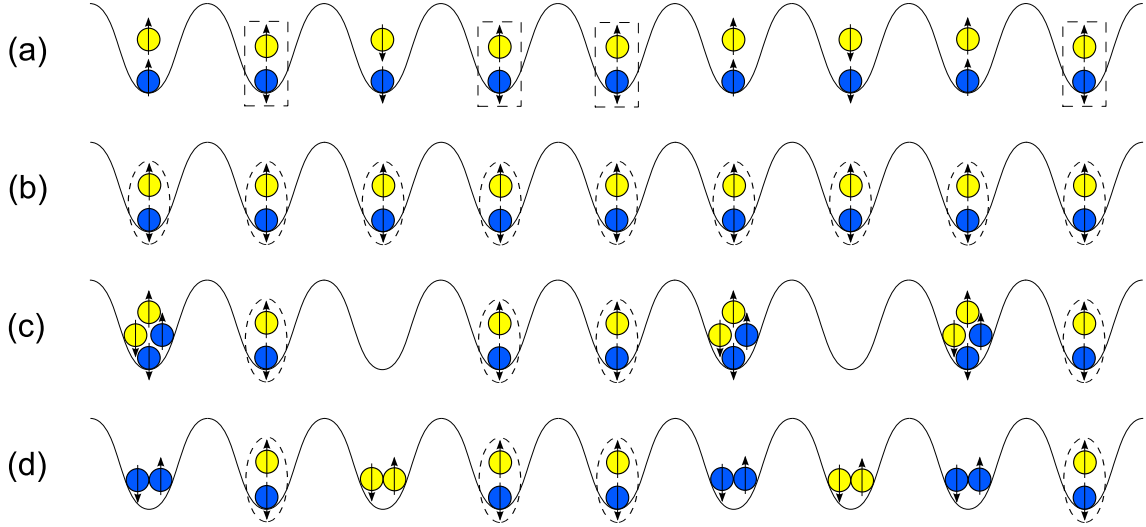


FIGURE 5 – Représentation schématique de l'état fondamental des quatre phases non dégénérées du modèle (1) révélées par l'analyse de fort couplage. Le code des couleurs est le même que celui de la figure 4. (a) La phase de Haldane de spin montre une alternance d'états de composante de spin $S^z = \pm 1$ avec un nombre arbitraire d'états triplets avec $S^z = 0$ (représentés avec un rectangle en pointillés) qui s'intercalent en diluant l'ordre antiferromagnétique. (b) La phase de singulets consiste en des singulets de spin $S^z = 0$ (représentés avec une ellipse en pointillés). (c) La phase de Haldane en charge, où alternent des sites complètement occupés avec des sites vides, avec un nombre arbitraire de singulets s'intercalant dans cette alternance. (d) La phase de Haldane orbitale qui montre une alternance de sites avec deux atomes, soit dans l'état g , soit dans l'état e , et un nombre arbitraire de singulets s'intercalent entre ces sites.

La physique de Haldane se traduit alors dans ces degrés de liberté et l'on peut déduire les propriétés des deux dernières phases de notre connaissance de la phase de Haldane de spin (voir les figures 5 (c) et (d)). Ces deux phases possèdent un ordre antiferromagnétique caché et des états de bord fractionnaires de pseudo-spin-1/2 et sont donc des phases topologiques non triviales, comme la phase de Haldane de spin. La mise en évidence et la caractérisation de ces deux phases exotiques constitue l'un des apports principaux de notre travail.

L'approche de fort couplage présentée au premier chapitre doit être accompagnée d'une approche de basse énergie, complémentaire. Cette fois, ce sont les termes d'interaction qui sont traités perturbativement, en partant de la théorie libre des quatre couleurs d'atomes ; il s'agit donc de la limite $|U, V, V_{\text{ex}}| \ll t$, à l'opposé de la limite de fort couplage. Les aspects microscopiques du modèle sont négligés et le modèle est soumis à la limite continue, qui permet d'arriver à une théorie de champs continue. Cette théorie de champ sert de point de départ à toute l'analyse de basse énergie et fournit le cadre dans lequel nous utilisons les méthodes spécifiques à la théorie des champs et aux systèmes unidimensionnels comme la bosonisation abélienne et non-abélienne, la refermionisation, et la théorie conforme. L'objet du deuxième chapitre est d'introduire les techniques de théorie des champs utilisées

dans les trois chapitres suivants. Nous décrivons également le groupe de renormalisation qui permet d'étudier les interactions comme des perturbations au voisinage de la théorie libre. Ce chapitre nous donne l'occasion de discuter des spécificités du demi-remplissage où l'on doit prendre en compte des termes supplémentaires d'umklapp.

Au chapitre trois, nous utilisons les diverses techniques exposées au chapitre deux pour réanalyser de façon détaillée le modèle des alcalinoterreux (1) dans la limite de basse énergie. Les termes d'interaction du modèle des alcalinoterreux brisent l'invariance conforme et la symétrie de la théorie libre. Comme l'analyse de fort couplage du premier chapitre permet de l'anticiper, cela conduit à l'ouverture d'un gap spectral qui s'accompagne par la stabilisation de l'un des ordres (ordre en charge, en spin ou magnétique, ordre orbital, etc.) permis par les symétries du système et mis en compétition par les différents types d'interaction. A basse énergie, sept phases isolantes de Mott sont stabilisées et tout le diagramme de phase est gappé. Le chapitre trois s'attache à révéler, identifier et caractériser ces phases et les transitions de phase, dans le formalisme de la théorie des champs.

Nous commençons par la dérivation de la limite continue du modèle et discutons brièvement le type de termes apparaissant dans la théorie des champs qui en résulte. Telle quelle, la limite continue n'est pas éclairante car elle ne permet pas d'identifier facilement les degrés de liberté de charge, de spin, et orbitaux. Nous procédons alors à la bosonisation du modèle qui présente l'avantage de séparer explicitement les degrés de liberté du système ; néanmoins, la description bosonique manque à mettre en évidence les symétries du modèle. Il faut alors refermioniser l'hamiltonien, afin d'arriver à une description fermionique, en terme de fermions de Majorana, et qui fait apparaître très clairement toutes les symétries continues.

En plus de mettre en évidence la symétrie interne globale du modèle sur réseau, la description en terme des fermions de Majorana dévoile la présence d'autres symétries cachées. Ce sont des symétries de dualité, qui sont des symétries discrètes, émergentes et exactes à basse énergie. Nous décrivons précisément ces symétries et expliquons en quoi elles sont importantes : elles permettent de déterminer les différents ordres en compétition du modèle et donc de déterminer les phases associées à ces ordres. Ce sont les homologues de la dualité de Kramers-Wannier, qui se manifeste dans le modèle d'Ising quantique unidimensionnel. La première partie de l'annexe B est consacrée à ce modèle où nous explicitons la dualité de Kramers-Wannier reliant sa phase ordonnée à sa phase désordonnée.

Avant de caractériser l'ensemble des phases à l'aide des symétries de dualité, nous consacrons une section à l'analyse du groupe de renormalisation. Nous donnons explicitement les équations bêta à une boucle, dont la dérivation a été présentée au chapitre deux, et nous nous attachons à justifier leur validité. Leur résolution permet de tracer le diagramme de phase et à donner quantitativement les limites des différentes phases. Les équations du groupe de renormalisation sont des équations non linéaires du second ordre qui ne sont pas solubles analytiquement. En revanche, une simple résolution numérique, à l'aide de

l'algorithme du Runge-Kutta d'ordre cinq, suffit à donner le diagramme de phase.

D'autre part, il existe un certain nombre de solutions spéciales : les « rayons symétriques » des fonctions bêta ; ces rayons sont obtenus par un ansatz, proposé par Lin, Balents et Fisher dans le contexte des échelles électroniques à deux montants [21, 22]. Ces rayons correspondent précisément aux symétries de dualités du modèle continu et chacun correspond à une phase différente. Néanmoins, dans le diagramme de phase, ils ne correspondent qu'à des régions très restreintes. Il convient donc d'analyser la stabilité de ces rayons : s'ils sont stables, alors les solutions particulières des fonctions bêta que constituent les rayons symétriques sont les solutions vers lesquelles vont tendre toutes autres solutions, modulo une éventuelle (mais faible) anisotropie. Konik, Saleur et Ludwig [23] ont montré dans le régime de basse énergie qui nous intéresse ici, les propriétés physiques à longue distance ne dépendent que très peu de cette anisotropie. Ainsi, si les rayons sont stables, il suffit de caractériser les propriétés des phases correspondantes pour déterminer l'ensemble du diagramme de phase. L'analyse de stabilité que nous avons effectuée montre que ces rayons sont tous stables.

Pour chacun de ces rayons, les symétries de dualité permettent d'écrire un modèle effectif, qui se trouve être à chaque fois une version différente du modèle de Gross-Neveu $SO(8)$ [24, 25]. Il est intégrable et génère un gap spectral [26]. A l'aide d'une approche semi-classique, combinée avec l'utilisation des dualités, nous pouvons alors caractériser précisément l'ensemble des phases du modèle, en donnant la configuration du ou des états fondamentaux de chacune d'entre elles, ainsi que leurs paramètres d'ordre.

L'analyse de fort couplage faite préalablement au premier chapitre aide à cette caractérisation, en particulier pour les trois phases de Haldane, moins conventionnelles que les quatre autres phases. Les phases de Haldane possèdent des états de bords fractionnaires lorsque les conditions de bord sont ouvertes. Pour achever de se convaincre que les trois phases sont bien des phases de Haldane, il faut avérer la présence de ces états de bord. La géométrie particulière de la chaîne ouverte appelle un traitement minutieux et une adaptation de l'approche de bosonisation. L'annexe C du manuscrit présente les détails techniques spécifiques aux conditions de bord ouvertes. La révision de l'approche de bosonisation permet d'obtenir un modèle effectif, qui révèle alors la présence de trois fermions de Majorana localisés aux bords du système, et qui forment un opérateur de spin-1/2, ou de pseudo-spin-1/2 de charge ou orbital, selon la phase considérée.

Nous consacrons une section à l'analyse des transitions de phase qui apparaissent dans le diagramme de phase, puis nous donnons explicitement deux coupes de ce diagramme de phase qui révèlent l'ensemble des sept phases. Des calculs numériques utilisant l'algorithme de DMRG ont été menés par notre collaborateur, Sylvain Capponi (Laboratoire de Physique Théorique, Université Paul Sabatier, Toulouse). Ces simulations numériques permettent de sonder le régime des couplages intermédiaires ($|U|, |V|, |V_{\text{ex}}| \sim t$) et montrent une très bonne adéquation avec l'approche de basse-énergie. Ainsi, l'accord entre l'analyse de basse énergie, ces simulations et l'analyse de fort couplage permet de conclure qu'il existe une continuité adiabatique entre les domaines de faibles et forts couplages, dans

tout le diagramme de phase.

Par souci de rendre notre travail le plus complet possible, nous consacrons l'avant dernière section du chapitre trois à l'étude du modèle des alcalinoterreux dans le cas d'un remplissage incommensurable. Cette section ne consiste pas une nouveauté car les résultats qui y sont présentés avaient déjà été publiés pour le modèle de Hund généralisé [27], qui est totalement équivalent en modèle des alcalinoterreux. Nous avons néanmoins estimé que cette section constituait un apport important au manuscrit d'un point de vue pédagogique, car nous y expliquons comment à partir de l'analyse du demi-remplissage, on peut déduire le diagramme de phase du cas incommensurable et caractériser l'ensemble des phases qui apparaissent. L'approche est donc un peu différente de celle de la référence [27] et permet de mieux comprendre le formalisme et les techniques utilisés dans ce chapitre.

Enfin, la dernière partie du chapitre traite du modèle des alcalinoterreux avec des « sauts » interorbitaux qui constitue un dernier aspect intéressant et amusant de l'étude. Dans ce cas, on autorise les particules à sauter d'un état orbital à l'autre (de l'état fondamental g à l'état excité métastable e), sans changer leur spin. L'ensemble de l'analyse qui précède est entièrement réadaptée à ce nouveau cas et l'on révèle l'existence de huit phases de Mott complètement gappées dans le diagramme de phase, dont des phases dégénérées avec des courants orbitaux et qui brisent l'invariance par renversement du temps. Des modèles d'échelles électroniques avec des symétries internes identiques à celles de notre modèle et avec des sauts transverses ont déjà été étudiés et les huit phases qui en résultent sont connues. Outre l'importance pédagogique de cette partie du chapitre, l'aspect nouveau que nous présentons ici consiste à être capable, par une simple transformation de dualité, d'identifier ces huit phases à partir de celles que nous avons caractérisées pour le modèle originel sans sauts. D'autre part, les études antérieures n'ont pu mettre en évidence les huit phases qu'en incluant des termes supplémentaires d'interaction, comme des interactions entre sites plus proches voisins. Notre analyse montre que le diagramme de phase du modèle des alcalinoterreux avec des sauts interorbitaux contient déjà ces huit phases alors qu'il ne comprend que des termes d'interactions locales et constitue ainsi un modèle minimal.

L'ensemble des résultats, présentés au chapitre un et trois pour le modèle des alcalinoterreux ont été publiés dans *Modern Physics Letters B*, pour un compte rendu de conférences [28], et dans *Physical Review B* [29], pour un modèle équivalent au modèle des alcalinoterreux : le modèle de Hund généralisé.

Le chapitre quatre de la thèse est consacré au modèle des atomes froids de spin hyperfin $F = 3/2$ qui peut être réalisé avec des atomes alcalins comme le potassium 40, ou bien avec l'ytterbium 173, une terre rare. Dans le modèle que nous étudions, les interactions sont locales et décrites par deux paramètres correspondant aux deux canaux de diffusion permis par le principe de Pauli. A partir du modèle continu décrivant des atomes de spin-

3/2 chargés dans un réseau optique unidimensionnel, nous dérivons le modèle discret sur réseau suivant :

$$H = -t \sum_{i,\alpha} \left[c_{\alpha,i}^\dagger c_{\alpha,i+1} + \text{h.c.} \right] - \mu \sum_i n_i + \frac{U}{2} \sum_i n_i^2 + V \sum_i P_{00,i}^\dagger P_{00,i} \quad (2)$$

où $\alpha = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ est l'indice de spin, et l'opérateur $P_{00,i}^\dagger = c_{3/2,i}^\dagger c_{-3/2,i}^\dagger - c_{1/2,i}^\dagger c_{-1/2,i}^\dagger$ crée une paire d'atomes qui forme un singulet de spin. Ce modèle est le point de départ de notre étude. Notre modèle inclut donc des interactions densité-densité de type Hubbard et un terme d'appariement en V .

En premier lieu, nous nous attachons à exposer les symétries internes du modèle : $U(1)_c \times SO(5)$, qui sont très importantes à comprendre, puis nous analysons le cas du demi-remplissage en utilisant les mêmes méthodes qu'aux trois premiers chapitres.

Tout d'abord, nous effectuons une analyse de fort couplage, qui met en évidence l'élargissement de la symétrie du modèle à $SU(2)_c \times SO(5)$ [30, 31], pour l'ajustement des paramètres : $V = 2U$. Ceci nous permet d'introduire, dans le langage des spin-3/2, l'opérateur de pseudo-spin de charge déjà rencontré dans l'étude du modèle des alcalinoterreux. On montre alors que sur cette ligne et au second ordre de la théorie des perturbations, l'hamiltonien effectif est une chaîne de pseudo-spin-1 de Heisenberg antiferromagnétique. Les propriétés de cette chaîne ont été décrites au chapitre un et la phase qui lui correspond est la phase de Haldane en charge. Nous poursuivons l'analyse en nous écartant de la ligne de haute symétrie $V = 2U$ et montrons qu'il existe également une phase d'onde densité de charge, ainsi qu'une phase de singulets, situées de part et d'autre de la ligne. D'autre part, comme lorsque $V = 0$, le modèle des spin-3/2 (2) se réduit au modèle de Hubbard $SU(4)$, déjà étudié, et dont nous savons qu'il présente une phase dimérisée de spin-Peierls (SP) [32, 33, 34], sur la ligne $U > 0$ et $V = 0$. Cette phase s'élargit à la région voisine où $V \neq 0$, et elle s'étend en particulier dans toute la région où $V > 0$, où le modèle effectif est le modèle d'Heisenberg $SO(5)$.

Nous passons ensuite à l'analyse de basse énergie, qui repose ici encore sur une description en terme de fermions de Majorana, description permettant l'exploitation de quatre symétries de dualité, combinées avec l'étude du groupe de renormalisation et de ses rayons symétriques, dont on montre la stabilité pour justifier la validité de l'analyse dans tous les diagrammes de phase. L'approche de basse énergie confirme bien la présence des quatre phases gappées mises en évidence par le fort couplage, dont nous donnons les paramètres d'ordre.

Nous confrontons ensuite de façon très détaillée les résultats de notre analyse et le diagramme de phase obtenu par résolution numérique des équations du groupe de renormalisation, avec des simulations numériques de DMRG effectuées par nos collaborateurs, Sylvain Capponi et Guillaume Roux (Laboratoire de Physique Théorique et Modèles Statistiques, Orsay). Cette confrontation montre un très bon accord des différentes approches et permet de conclure à une continuité adiabatique entre les différents régimes du modèle. Nous portons une attention particulière aux lignes de haute symétrie du modèle et à leur

connexion avec le diagramme de phase. Nous expliquons aussi comment mettre en évidence l'ordre caché et les états de bords de pseudo-spin-1/2 de la phase de Haldane en charge et présentons les résultats des simulations correspondantes. Les simulations de DMRG permettent aussi d'estimer la charge centrale qui caractérise les transitions de phase, en calculant l'entropie d'intrication du système. Cela nous permet de confirmer nos résultats analytiques : les transitions entre une phase dégénérée et une phase non dégénérée sont de type Ising, de charge centrale $c = 1/2$, tandis que les transitions entre deux phases de même nature sont des transitions Berezenskii-Kosterlitz-Thouless avec une charge centrale $c = 1$.

Nous nous orientons enfin vers la limite où les deux paramètres d'interaction U et V sont grands et positifs. Pour $U, V \gg t > 0$, dans le régime des forts couplages, nous avons établi que le modèle effectif décrivant les spins-3/2 est la chaîne d'Heisenberg $SO(5)$. D'autre part, l'analyse de basse énergie montre que dans le régime $t \gg U, V > 0$, les degrés de liberté de charge sont les plus hauts en énergie. On peut alors intégrer ces degrés de liberté, pour parvenir à un modèle continu effectif en terme de cinq fermions de Majorana massifs et possédant la symétrie $SO(5)$. La continuité adiabatique entre les deux régimes de fort couplage et de basse énergie permet d'en conclure que ce modèle continu $SO(5)$ constitue le modèle effectif de basse-énergie de la chaîne de Heisenberg $SO(5)$. Ce modèle est la généralisation naturelle à la symétrie $SO(5)$ de la description de la chaîne d'Heisenberg bilinéaire et biquadratique de spin-1, à l'aide de trois fermions de Majorana massifs, proposée par Tsvelik [35]. Il est alors très tentant de tracer l'analogie en considérant la chaîne $SO(5)$ de Heisenberg, bilinéaire et biquadratique. Nous montrons alors que cette chaîne présente une phase dimérisée et une phase de type Haldane dans laquelle nous dévoilons l'existence d'états de bord représentés par cinq fermions de Majorana exponentiellement localisés aux bords de la chaîne. Nous établissons enfin que ces deux phases sont séparées par un point critique correspondant à un modèle de Wess-Zumino-Novikov-Witten $SO(5)_1$, de charge centrale $c = 5/2$. Nous présentons aussi les simulations numériques de DMRG et de diagonalisation exacte, effectuées par Fabien Alet (Laboratoire de Physique Théorique, Université Paul Sabatier, Toulouse). Ces simulations corroborent nos résultats analytiques, en identifiant les deux phases et confirmant la valeur de la charge centrale caractérisant la transition de phase critique.

Le travail présenté dans ce chapitre a fait l'objet de deux Rapid Communications dans Physical Review B [31, 36].

Le dernier chapitre est consacré à la généralisation du modèle des spins-3/2 aux spins hyperfins F demi-entiers dans le cas du demi-remplissage. Nous traitons donc du cas d'atomes fermioniques possédant un nombre pair de composantes ($2N = 2F + 1$). Le modèle que nous considérons est le suivant :

$$H = -t \sum_{i,\alpha} \left(c_{\alpha,i}^\dagger c_{\alpha,i+1} + \text{h.c.} \right) - \mu \sum_i n_i + \frac{U}{2} \sum_i n_i^2 + V \sum_i P_{00,i}^\dagger P_{00,i} \quad (3)$$

où $\alpha = 1, \dots, 2N$ est l'indice de spin, et l'opérateur d'appariement de singulet BCS, $P_{00,i}^\dagger$, peut s'écrire comme :

$$P_{00,i}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\alpha} (-1)^{2N+1+\alpha} c_{\alpha,i}^\dagger c_{2N+1-\alpha,i}^\dagger \quad (4)$$

et crée une paire d'atomes qui forme un singulet de spin.

La première partie du chapitre est une approche de fort couplage, qui donne l'occasion de détailler les symétries du modèles : $U(1)_c \times Sp(2N)$, de dériver le spectre général du modèle à un site, et d'en déduire les modèles effectives aux alentours des lignes de haute symétrie du diagramme de phase. Sur la ligne $V = 0$, on retrouve le modèle de Hubbard $U(2N)$ et l'on s'attend à une phase dimérisée de Spin-Peierls. Nous procédons alors à l'analyse de l'effet du terme d'appariement : celui-ci favorise la formation de singulets sur chaque site du réseau dès qu'il devient dominant. Lorsque N est pair, le demi-remplissage imposant un nombre moyen de N particules par site, l'état fondamental est donc organisé en $N/2$ singulets $Sp(2N)$ sur chaque site du réseau demi-remplissage. C'est la phase de singulet que nous avons déjà rencontrée dans l'étude des modèles précédents. En revanche, lorsque N est impair, il n'est pas possible de former des singulets (qui ont deux particules) avec N particules sur chaque site. Le système aura tendance à former des singulets, mais ceux-ci ne pourront pas se localiser. Par cette simple analyse intuitive, on anticipe déjà une dichotomie fondamentale entre les cas N pair et N impair. Toute la suite de l'analyse confirme cette dichotomie qui est un résultat extrêmement important révélé par notre travail.

Nous poursuivons ensuite par la généralisation de l'analyse de fort couplage du cas des spin-3/2, révélant la phase de Haldane en charge. Après avoir mis en évidence la présence d'une ligne de symétrie élargie : $SU(2)_c \times Sp(2N)$, nous montrons que le modèle effectif sur cette ligne est la chaîne de Heisenberg antiferromagnétique de pseudo-spin- $N/2$, où l'opérateur de pseudo-spin- $N/2$ fait intervenir les degrés de liberté de charge. Nous avons déjà rencontré le cas de la chaîne de spin-1 dans le cas des alcalinoterreux et dans le cas des spins-3/2. Ici, nous nous appuyons sur les études antérieures effectuées sur la chaîne de spin- S pour en déduire les propriétés de notre modèle.

En 1983, Haldane [37] a émis la conjecture que les chaînes de Heisenberg de spin- S ont des propriétés intrinsèquement différentes selon la parité de $2S$. Les chaînes de spin demi-entier ont un comportement critique, tandis que les chaînes de spin entier possèdent un gap fini (le gap de Haldane) et présentent un ordre caché, similaire à l'ordre caché de la chaîne de spin-1. Cette conjecture est à présent bien connue et étayée par de nombreuses études théoriques et a été confirmée expérimentalement et numériquement (voir la revue [38]). La conjecture de Haldane sur les chaînes de spins nous fournit une solide base pour établir une conjecture de Haldane en charge pour le modèle (3), le long de la ligne $SU(2)_c$. On devrait observer un effet pair/impair, selon la parité de N : pour les N pairs, une phase de Haldane en charge (HC) doit se stabiliser, tandis que pour les N impairs, le système doit se trouver dans une phase critique.

Lorsqu'on s'écarte de la ligne $V = NU$, nous montrons que d'une part de la ligne, une phase d'onde de densité de charge se stabilise pour N quelconque ; de l'autre part de la

ligne, se stabilisent une phase de singulet pour les N pairs, ou une phase critique d'appariement en singulet BCS dans le cas des N impairs.

Nous passons ensuite à l'approche de basse-énergie qui, confrontée aux résultats des simulations numériques de DMRG effectuées par Sylvain Capponi et Guillaume Roux, finit d'étayer notre conjecture de Haldane en charge. Nous consacrons une partie de ce chapitre à dériver la limite continue du modèle des fermions libres puis du modèle en interaction, car il faut généraliser le cas des fermions à quatre composantes exposé au chapitre trois, au cas général des fermions à $2N$ composantes. Dans le cas général, il n'est plus possible d'utiliser le formalisme des fermions de Majorana et nous définissons donc les courants conformes qui permettent l'écriture du modèle continu de basse énergie. Pour ce faire, nous avons jugé nécessaire de définir les conventions de théorie des groupes que nous adoptons dans l'annexe D du manuscrit. Nous avons porté un soin particulier à expliquer le plus physiquement possible les techniques de plongement conforme utilisées dans notre analyse, et à décrire chacun des termes apparaissant dans le modèle effectif de basse énergie.

Nous dérivons ensuite les équations du groupe de renormalisation qui révèlent un fait remarquable dans le cas où $N > 2$: la perte d'une symétrie de dualité par rapport au cas $N = 2$, qui rend plus complexe la caractérisation des phases du diagramme de phase. La résolution numérique des équations du groupe de renormalisation montre trois régions différentes dans le diagramme. Il est relativement aisé d'identifier les deux premières avec la phase d'onde de densité de charge et la phase de Spin-Peierls, présentes quel que soit la parité de N . La troisième région est très différente et requiert une analyse poussée qui dépend de la parité de N , et l'introduction de la théorie conforme des parafermions. Les parafermions sont une généralisation des fermions de Majorana du modèle d'Ising présenté à l'annexe B.

Dans notre analyse de la troisième région, nous intégrons d'abord les degrés de liberté $\text{Sp}(2N)$, qui sont gappés et les plus hauts en énergie, afin de parvenir à un nouveau modèle effectif. Ce modèle révèle ensuite que les degrés de liberté parafermioniques sont gappés. Une seconde intégration sur ces degrés de liberté nous amènent enfin à un dernier modèle effectif impliquant les degrés de liberté de charge qui sont les seuls restants. Dans le cas des N impairs, la région correspond à une phase critique d'appariement de singulet BCS. Dans le cas des N pairs, la région comprend deux phases gappées : la phase de Haldane en charge et une phase de singulets. Notre analyse de basse énergie confirme ainsi toutes les prédictions du fort couplage. En revanche, pour les N impairs elle révèle l'existence d'une phase critique BCS qui s'intercalent entre les deux phases gappées, que le fort couplage n'avait pas anticipée et qui n'existait pas dans le cas ($N = 2$) des spins-3/2. Cela souligne la complémentarité de ces deux approches et l'importance de les confronter.

D'autre part, dans le cas des N pairs, nous révélons un second effet pair/impair, selon la parité de $N/2$. Lorsque $N/2$ est pair, la symétrie de dualité du modèle montre que la phase de Haldane de charge est décrite par le même modèle et caractérisée par le même paramètre d'ordre que la phase triviale de singulets ; dans ce cas, la phase de Haldane est une phase gappée qui n'est plus caractérisée par un ordre caché et elle perd son caractère

topologique. Dans le cas où $N/2$ est impair en revanche, la phase de Haldane n'est pas équivalente à la phase de singulets et elle présente bien un ordre caché à longue portée.

Notre analyse du cas des spins hyperfins F demi-entiers dans le cas du demi-remplissage a fait l'objet d'une publication dans *Physical Review B* [39], quelques jours avant la complétion de notre manuscrit. Comme elle détaille l'analyse de basse énergie et présente des simulations numériques de DMRG dans le cas $N = 3$ et 4 , nous l'avons incluse à la suite du dernier chapitre.

La recherche de systèmes physiques présentant de nouvelles phases exotiques de la matière, et requérant d'aller au-delà du paradigme des liquides de Fermi en développant de nouvelles théories, nous conduit à considérer des systèmes possédant un grand nombre de degrés de liberté. Au cours de ces dernières années, de nombreux travaux ont pu confirmer la richesse de tels systèmes. Cette thèse s'inscrit dans cette démarche et s'attache à l'étude de systèmes unidimensionnels fermioniques à plusieurs composantes, en choisissant de se placer dans le contexte des atomes froids qui offrent des possibilités de réalisation expérimentale, inaccessibles à la physique de la matière condensée.

Le modèle des atomes froids alcalinoterreux à quatre composantes ne présente pas moins de sept phases isolantes de Mott. Ceci montre à quel point les systèmes fermioniques possédant un grand nombre de degrés de liberté peuvent être riches. Nous avons vu que la présence de symétries de dualité, émergentes à basse énergie, très importantes, fournit une classification de ces phases de Mott. La mise en évidence et la caractérisation de trois phases de Haldane différentes constitue l'un des apports principaux de notre travail. Ces trois phases présentent des caractéristiques topologiques très intéressantes : un ordre caché non local de longue portée, ainsi que la présence d'états de bord lorsque la géométrie du système est ouverte. Elles diffèrent entre elles par le type des degrés de liberté qui interviennent pour former un spin-1 effectif.

L'autre contribution importante de cette thèse est l'établissement d'une conjecture de Haldane portant sur le secteur des degrés de liberté de charge, dans les systèmes d'atomes froids de spin hyperfin demi-entier à $2N$ composantes au demi-remplissage. Pour des N impairs, le modèle est critique et pour des N pairs, il stabilise une phase de Haldane en charge, gappée. Notre analyse de basse énergie confirme cette conjecture et des simulations numériques l'étayent pour $N = 2, 3$ et 4 : la phase critique présente pour des N impairs est une phase BCS. Quant à la phase de Haldane, l'analyse de basse énergie y révèle un autre effet pair/impair, selon la parité de $N/2$: lorsque $N/2$ est pair, la phase de Haldane est une phase non dégénérée de caractère topologique trivial, adiabatiquement connectée à une phase gappée de singulets ; lorsque $N/2$ est impair, c'est une phase non dégénérée qui possède un ordre caché non local à longue portée, possédant une structure topologique intéressante.

A la lumière des récents progrès expérimentaux, où des systèmes fermioniques à plu-

sieurs composantes de symétries très hautes ont pu être réalisés [40, 41], on peut espérer qu'il sera bientôt possible de mettre en évidence la physique très riche que nous avons étudiée dans cette thèse. Les techniques d'imagerie progressent à grands pas : en particulier, l'observation atome par atome sera accessible dans un futur proche. Avec la réalisation expérimentale de systèmes fermioniques unidimensionnels à plusieurs composantes, elle pourrait permettre de rechercher la présence de certaines des phases que nous avons pu identifier ici. Les atomes froids peuvent ainsi permettre de révéler une physique très exotique, dont l'observation était jusqu'à présent inaccessible dans les systèmes plus classiques de matière condensée.

Bibliographie

- [1] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, et I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Mechanics*. Dover Publications (1975).
- [2] P. Nozières, *Theory of Interacting Fermi Systems*. New York : Benjamin, W. A. (1964).
- [3] D. Pines et P. Nozières, *The Theory of Quantum Liquids*. New York : Benjamin, W. A. (1966).
- [4] N. Mott et R. Peierls, « Discussion of the paper by de Boer and Verwey », *Proceedings of the Physical Society* **49**, 72 (1937).
- [5] J. H. De Boer et E. J. W. Verwey, « Semi-conductors with partially and with completely filled 3d-lattice bands », *Proceedings of the Physical Society* **49**, 59 (1937).
- [6] S. White, « Density matrix formulation for quantum renormalization groups », *Physical Review Letters* **69**, 2863 (1992).
- [7] S. White, « Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups », *Physical Review B* **48**, 10345 (1993).
- [8] U. Schollwöck, « The density-matrix renormalization group », *Reviews of Modern Physics* **77**, 259 (2005).
- [9] D. Jérôme, A. Mazaud, M. Ribault, et K. Bechgaard, « Superconductivity in a synthetic organic conductor (TMTSF)₂PF₆ », *Journal De Physique Lettres* **41**, 95 (1980).
- [10] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, et E. A. Cornell, « Observation of bose-einstein condensation in a dilute atomic vapor. », *Science* **269**, 198 (1995).
- [11] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. Van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, et W. Ketterle, « Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms », *Physical Review Letters* **75**, 3969 (1995).
- [12] B. DeMarco et D. S. Jin, « Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas », *Science* **285**, 1703 (1999).
- [13] D. Jaksch, C. Bruder, J. Cirac, C. Gardiner, et P. Zoller, « Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices », *Physical Review Letters* **81**, 3108 (1998).
- [14] K. Petsas, A. Coates, et G. Grynberg, « Crystallography of optical lattices », *Physical Review A* **50**, 5173 (1994).
- [15] L. Santos, M. A. Baranov, J. I. Cirac, H. U. Everts, H. Fehrmann, et M. Lewenstein, « Atomic quantum gases in Kagomé lattices », *Physical Review Letters* **93**, 4 (2004).

- [16] H. Feshbach, « Unified theory of nuclear reactions », *Annals of Physics* **5**, 357 (1958).
- [17] J. Anglin et W. Ketterle, « Bose-Einstein condensation of atomic gases », *Nature* **416**, 211 (2002).
- [18] I. Bloch, « Ultracold quantum gases in optical lattices », *Nature Physics* **1**, 23 (2005).
- [19] M. M. Boyd, T. Zelevinsky, A. D. Ludlow, S. Blatt, T. Zanon-Willette, S. M. Foreman, et J. Ye, « Nuclear spin effects in optical lattice clocks », *Physical Review A* **76**, 022510 (2007).
- [20] T. Kennedy, « Exact diagonalisations of open spin-1 chains », *Journal of Physics : Condensed Matter* **2**, 5737 (1990).
- [21] H.-H. Lin, L. Balents, et M. Fisher, « Exact SO(8) symmetry in the weakly-interacting two-leg ladder », *Physical Review B* **58**, 1794 (1998).
- [22] H.-H. Lin, « Anomalous Scaling of the SO(8) Symmetric Phases in the Two-Leg Ladder », *cond-mat/0010011* (2000).
- [23] R. M. Konik, H. Saleur, et A. W. W. Ludwig, « Interplay of the scaling limit and the renormalization group : Implications for symmetry restoration », *Physical Review B* **66**, 075105 (2002).
- [24] D. J. Gross et A. Neveu, « Dynamical symmetry breaking in asymptotically free field theories », *Physical Review D* **10**, 3235 (1974).
- [25] R. F. Dashen, B. Hasslacher, et A. Neveu, « Semiclassical bound states in an asymptotically free theory », *Physical Review D* **12**, 2443 (1975).
- [26] A. B. Zamolodchikov et A. B. Zamolodchikov, « Factorized S-matrices in two dimensions as the exact solutions of certain relativistic quantum field theory models », *Annals of Physics* **120**, 253 (1979).
- [27] E. Boulat, P. Azaria, et P. Lecheminant, « Duality approach to one-dimensional degenerate electronic systems », *Nuclear Physics B* **822**, 367 (2009).
- [28] H. Nonne, E. Boulat, S. Capponi, et P. Lecheminant, « Phase Diagram of One-Dimensional Alkaline-Earth Cold Fermionic Atoms », *Modern Physics Letters B* **25**, 955 (2011).
- [29] H. Nonne, E. Boulat, S. Capponi, et P. Lecheminant, « Competing orders in the generalized Hund chain model at half filling », *Physical Review B* **82**, 155134 (2010).
- [30] C. Wu, J.-p. Hu, et S.-c. Zhang, « Exact SO(5) Symmetry in the Spin-3/2 Fermionic System », *Physical Review Letters* **91**, 186402 (2003).
- [31] H. Nonne, P. Lecheminant, S. Capponi, G. Roux, et E. Boulat, « Haldane charge conjecture in one-dimensional multicomponent fermionic cold atoms », *Physical Review B* **81**, 020408(R) (2010).
- [32] J. B. Marston et I. Affleck, « Large-n limit of the Hubbard-Heisenberg model », *Physical Review B* **39**, 11538 (1989).
- [33] I. Affleck, D. P. Arovas, J. B. Marston, et D. A. Rabson, « SU(2n) quantum antiferromagnets with exact C-breaking ground states », *Nuclear Physics B* **366**, 467 (1991).

- [34] A. Onufriev et J. B. Marston, « Enlarged symmetry and coherence in arrays of quantum dots », *Physical Review B* **59**, 12573 (1999).
- [35] A. M. Tsvelik, « Field-Theory treatment of the Heisenberg spin-1 chain », *Physical Review B* **42**, 10499 (1990).
- [36] F. Alet, S. Capponi, H. Nonne, P. Lecheminant, et I. McCulloch, « Quantum criticality in the SO (5) bilinear-biquadratic Heisenberg chain », *Physical Review B* **83**, 060407(R) (2011).
- [37] 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* **50**, 1153 (1983).
- [38] P. Lecheminant, « One-Dimensional Quantum Spin Liquids », *cond-mat/0306520* (2003).
- [39] H. Nonne, P. Lecheminant, S. Capponi, G. Roux, et E. Boulat, « Competing orders in one-dimensional half-filled multicomponent fermionic cold atoms : The Haldane-charge conjecture », *Physical Review B* **84**, no. 12 (2011).
- [40] A. V. Gorshkov, M. Hermele, V. Gurarie, C. Xu, P. S. Julienne, J. Ye, P. Zoller, E. Demler, M. D. Lukin, et A. M. Rey, « Two-orbital SU(N) magnetism with ultracold alkaline-earth atoms », *Nature Physics* **6**, 289 (2009).
- [41] S. Taie, Y. Takasu, S. Sugawa, R. Yamazaki, T. Tsujimoto, R. Murakami, et Y. Takahashi, « Realization of a SU(2) x SU(6) System of Fermions in a Cold Atomic Gas », *Physical Review Letters* **105**, 190401 (2010).