



HAL
open science

Echelles de spins dopées sous champ magnétique

Guillaume Roux

► **To cite this version:**

Guillaume Roux. Echelles de spins dopées sous champ magnétique. Supraconductivité [cond-mat.supr-con]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2007. Français. NNT: . tel-00167129

HAL Id: tel-00167129

<https://theses.hal.science/tel-00167129>

Submitted on 15 Aug 2007

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

présentée pour obtenir le grade de

Docteur en Sciences
Spécialité Physique Théorique

Échelles de spins dopées sous champ magnétique

par
Guillaume ROUX

Soutenue le 12 Juillet 2007 devant la commission d'examen :

Mr. Denis JÉROME	<i>LPS, Orsay</i>	Président
Mr. Frédéric MILA	<i>EPFL, Lausanne</i>	Rapporteur
Mr. Ulrich SCHOLLWÖCK	<i>RWTH, Aachen</i>	Rapporteur
Mr. Pierre PUJOL	<i>LPT, Toulouse</i>	Examineur
Mr. Didier POILBLANC	<i>LPT, Toulouse</i>	Directeur de thèse
Mr. Sylvain CAPPONI	<i>LPT, Toulouse</i>	co-Directeur de thèse

« *Chapitre ennuyeux car il explique quatre ans de bonheur* »
Honoré de Balzac, “Splendeurs et misères des courtisanes”.

Remerciements

Mes premiers remerciements vont à Didier Poilblanc et Clément Sire qui ont successivement dirigé le laboratoire de physique théorique et m’y ont accueilli au cours de ces trois années. À travers eux, c’est l’ensemble des membres du laboratoire que je tiens à remercier, et en particulier Sylvia et Sandrine.

Encore merci Didier pour avoir encadré cette thèse. J’ai pu bénéficier de ta profonde connaissance du domaine, de tes conseils et commentaires toujours constructifs, et qui ont permis de faire avancer les résultats plus loin que je ne l’imaginais. Ta patience, ta disponibilité et ta gentillesse ont largement contribué à me laisser un excellent souvenir de mon passage à Toulouse.

Merci Sylvain de m’avoir mis le pied à l’étrier avec les méthodes numériques ainsi que pour toutes les discussions sur la physique lors desquelles j’ai pu profiter de tes vastes compétences. Merci également de m’avoir proposé de travailler sur les atomes froids et de m’avoir guidé dans ce domaine nouveau pour moi. Tout cela avec une gentillesse et un humour sans pareil !

Je suis très reconnaissant envers Denis Jérôme d’avoir accepté de présider le jury mais surtout d’avoir manifesté de l’intérêt pour nos résultats : il n’y a rien de plus gratifiant pour un théoricien. Frédéric Mila et Ulrich Schollwöck ont accepté la laborieuse tâche de rapporteur : je ne saurais que trop les remercier du temps et de l’attention qu’ils ont consacrés à la lecture de ce manuscrit. Je dois à Pierre Pujol de m’avoir enseigné les rudiments de la supraconductivité et des fermions fortement corrélés : ce fut un véritable plaisir que de l’avoir dans mon jury de thèse.

Rien de ce qui est présenté dans cette thèse n’aurait été possible sans l’aide de Steve White. C’est certainement en utilisant et en réfléchissant au DMRG que j’ai le plus appris pendant la thèse. Je lui suis infiniment reconnaissant pour ses précieux conseils et sa bienveillance qui ont rendu notre collaboration et mon séjour à Irvine si agréables.

J’ai également eu la chance de collaborer avec les « bosonisateurs » Edmond Orignac, Pierre Pujol, Patrick Azaria, Edouard Boulat et Philippe Lecheminant. Merci de m’avoir donné l’impression de comprendre certaines choses.

Au-delà des collaborations, j’ai énormément apprécié les nombreuses personnes rencontrées à Toulouse : Andreas, Andreas, Arnaud¹, Clément, Fabien, Fabien, Fabien, Fabien, Gaspard, Julien, Lino, Ludo, Manuela, Matthieu, Nicolas, Nicolas et Vianney. J’appréciais déjà mes familles, mes amis² et ma Muriel, je les apprécie toujours autant.

J’exprime enfin ma gratitude aux personnes qui assurent le fonctionnement des centres de calcul de l’IDRIS et de Calmip ainsi qu’au contribuable français.

¹En particulier pour la citation ci-dessus.

²Le manuscrit est redevable à Laurent G. de ses conseils T_EXpert.

*À ma mère et mon père,
À mes familles,
À Muriel.*

« La résignation est l'attitude la plus stérile qui soit. »
Françoise Giroud.

Préface

Les travaux présentés dans ce manuscrit de thèse s’inscrivent dans le cadre de la physique de la matière condensée et plus précisément de la problématique des fortes corrélations électroniques dans les systèmes unidimensionnels. L’objet du premier chapitre est d’expliquer certaines des motivations qui ont amené les physiciens de la physique du solide à étudier les composés à fortes corrélations électroniques et leurs propriétés remarquables. Malgré les difficultés expérimentales et théoriques, de nouveaux états de la matière ont été mis en évidence, en particulier dans les supraconducteurs à haute température critique et les conducteurs organiques unidimensionnels. Cousines de ces matériaux, les échelles de spins furent découvertes au début des années 1990 et ont suscité depuis lors un intérêt toujours renouvelé. Le terme « échelle » rappelle que l’élément constitutif de base de la structure cristalline comporte deux chaînes couplées fortement. Le champ magnétique est un ingrédient de choix pour caractériser la nature du liquide électronique car il se couple au degré de liberté de spin de l’électron par effet Zeeman et à sa charge par effet orbital. Quelques expériences sous champ magnétique sont ainsi évoquées à la fin de ce chapitre d’introduction.

La compréhension de la physique des échelles de spin bénéficie d’une description paradigmatique concrétisée au début des années 1980 par Haldane et connue sous le nom de liquide de Luttinger. Les principaux résultats de cette théorie utile pour les chapitres suivants sont présentés au chapitre II. Parce que devenues aujourd’hui incontournables en physique, les méthodes numériques ont joué un rôle central dans les résultats rapportés dans ce manuscrit. Il était donc naturel de leur consacrer le chapitre III. Bien que celui-ci puisse être court-circuité en première lecture, le lecteur curieux devrait pouvoir y trouver des algorithmes véritablement fondés sur des concepts physiques. C’est par exemple le cas du groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG) inventé par White et qui permet d’aborder quantitativement la physique quantique à une dimension. L’efficacité actuelle de cet algorithme toujours en développement depuis son avènement en 1992 a permis d’aborder des questions délicates durant cette thèse.

Viennent ensuite les résultats à proprement parler dans les chapitres IV, V, VI et VII. Initialement, l’intitulé de la thèse était « dynamique des trous dans divers liquides de spins » (la notion de liquide de spins est brièvement discutée au chapitre I). Le chapitre IV va dans ce sens en étudiant comment la prise en compte de l’échange cyclique dans la description du magnétisme montre le lien entre la nature de liquide de spin de l’échelle dopée et sa supraconductivité. Les propriétés d’une excitation magnétique résonnante y sont également discutées. La phénoménologie à l’origine de cette excitation nous a conduits à regarder ce qu’il se passerait si elle était sondée par un champ magnétique. C’est l’objet du chapitre V qui détaille les nombreuses phases observées lorsqu’on ne tient compte que de l’effet Zeeman. Au-delà des propriétés magnétiques, la nature de l’état supraconducteur va être grandement modifiée par la présence du champ magnétique. En considérant qu’un flux traverse les échelles, l’effet

orbital du champ va lui aussi permettre de sonder la nature des phases réalisées dans les échelles en caractérisant leur réponse à cette perturbation. Le chapitre VI se termine par des résultats préliminaires sur le modèle bosonique d'une échelle obtenus assez tôt et qui étaient motivés par des prédictions de la théorie du liquide de Luttinger. L'effort a finalement plutôt été porté sur les résultats concernant les échelles fermioniques par continuité avec ceux sur l'effet Zeeman. Enfin, une collaboration sur un sujet qu'on pourrait croire orthogonal à première vue nous a permis d'appliquer les méthodes rodées dans le cadre des échelles dopées. Plus qu'une simple transposition des méthodes, le modèle de Hubbard de spin 3/2 attractif partage des analogies évidentes avec les échelles dopées. C'est ce point de vue qui a été choisi pour rédiger le chapitre VII.

*Ce document au format pdf et sa source au format L^AT_EX
avec les figures devraient être disponibles à l'adresse :*
<http://www.guillaume.roux.free.fr/These>

Table des matières

Remerciements	i
Préface	v
I. Contexte expérimental et théorique	1
1. Les électrons fortement corrélés	1
1.1. Théorie de Landau du liquide de Fermi	1
1.2. Corrélations électroniques et modèle de Hubbard	2
1.3. Magnétisme quantique et modèle de Heisenberg	5
1.4. Isolant de Mott dopé : le modèle t-J	6
2. Composés typiques à fortes corrélations	7
2.1. Supraconducteurs à haute température critique	7
2.2. Composés organiques unidimensionnels	8
3. Expériences sur les composés à échelles de spins	12
3.1. Échelles isolantes	12
3.1.1. Parité du nombre de montants et gap de spin	12
3.1.2. Plateaux d'aimantation	14
3.2. Échelles dopées	14
3.2.1. Expériences à pression ambiante	18
3.2.2. Expériences dans la phase supraconductrice	19
3.2.3. Vers de nouveaux composés supraconducteurs ?	22
4. Conclusion partielle	24
II. Notions sur la physique des systèmes quantiques unidimensionnels	25
1. Vers un hamiltonien effectif : la bosonisation	25
1.1. Le Liquide de Luttinger	25
1.1.1. Introduction des champs $\phi(x)$ et $\theta(x)$	25
1.1.2. Hamiltonien	27
1.1.3. Propriétés physiques et détermination des paramètres de Luttinger u et K .	28
1.1.4. Effets de taille finie et théories conformes	30
1.2. Bosonisation	32
1.2.1. Fermions sans spins	33
1.2.2. spin 1/2 : transformation de Jordan-Wigner	36
1.2.3. Fermions avec spins : séparation spin-charge	36
1.3. Instabilités du liquide de Luttinger	38

1.3.1. hamiltonien de sine-Gordon : comportement autour d'un point critique	38
1.3.2. Spectre d'excitation d'un système gappé	40
1.3.3. Transition commensurable-incommensurable	41
1.3.4. Approche topologique du rôle des commensurabilités	42
1.4. Diagrammes de phase	44
1.4.1. Fluctuations dominantes	44
1.4.2. Chaîne XXZ	45
1.4.3. Chaîne de Hubbard	46
1.4.4. Chaîne t-J	46
2. Application aux échelles de spins	49
2.1. Échelles isolantes	49
2.2. Échelles dopées	50
2.2.1. Approche de couplage faible	51
2.2.2. Résultats numériques	55
2.3. Une brève discussion sur le couplage entre chaînes ou entre échelles	55
3. Conclusion partielle	58
III. Méthodes numériques	59
1. La Diagonalisation Exacte	60
1.1. Algorithme de Lanczos	61
1.2. Algorithme de Davidson	62
1.3. Utilisation des symétries	63
1.4. Calculs d'observables	64
1.4.1. Observables tirées du calcul de l'énergie	64
1.4.2. Observables tirées du calcul du fondamental	66
1.5. Calcul des propriétés dynamiques	67
1.6. Évolution temporelle	69
1.7. Quelques précisions sur l'implémentation	72
1.7.1. Réseaux utilisés (clusters)	72
1.7.2. Codage des états	72
1.7.3. Construction d'un espace de Hilbert symétrisé	72
1.7.4. Symétrisation des observables	74
1.7.5. Récapitulatif	74
1.7.6. Ressources informatiques et optimisation	74
1.8. Convergence et pratique de la Diagonalisation Exacte	75
2. Le Groupe de Renormalisation de la Matrice Densité (DMRG)	78
2.1. Présentation de l'algorithme	78
2.1.1. Représentation de la fonction d'onde du système lors de la renormalisation	79
2.1.2. Critère de troncation des états	81
2.1.3. Notion de décomposition de Schmidt et lien avec l'entropie d'intrication	83
2.1.4. Algorithme DMRG de taille infinie (warm-up)	85
2.1.5. Algorithme de taille finie (sweeps)	86

2.2.	Quelques précisions sur l'implémentation	86
2.2.1.	Construction de l'hamiltonien du superbloc et calcul de $\mathcal{H}_S \psi_S\rangle$..	86
2.2.2.	Représentation des états et nombres quantiques	87
2.2.3.	Détermination et diagonalisation de la matrice densité réduite ..	87
2.2.4.	Calcul d'observables	88
2.2.5.	Évolution des opérateurs lors de la troncation	89
2.2.6.	Construction d'une fonction d'onde guess pour le Davidson	89
2.2.7.	Correction de la méthode avec un seul site au milieu	90
2.2.8.	hamiltoniens et fonctions d'onde complexes	92
2.3.	Convergence et pratique du DMRG	92
2.3.1.	Contrôle de l'erreur et convergence des observables	93
2.3.2.	Effets de taille finie et de conditions aux bords ouvertes	94
2.3.3.	Systèmes faciles et systèmes difficiles?	95
2.3.4.	Ressources informatiques et optimisation	95
3.	Conclusion partielle	96
IV.	Échange cyclique dans les échelles dopées	97
1.	L'échange cyclique	97
1.1.	Origine	97
1.2.	Diagramme de phase des échelles non dopées	98
1.3.	Pertinence expérimentale dans les cuprates	100
2.	Résultats dans les échelles dopées	101
2.1.	Excitations élémentaires	102
2.2.	Influence de l'échange cyclique et du dopage sur le mode magnétique résonnant	105
3.	Conclusion partielle	109
V.	Effet Zeeman dans les échelles dopées	111
1.	Warm-up : modélisation et cas limites	111
1.1.	hamiltonien	111
1.2.	Système sans interaction	113
1.3.	Interactions fortes dans la limite de grande anisotropie	115
2.	Propriétés magnétiques : plateau d'aimantation contrôlé par le dopage	118
2.1.	Courbes d'aimantation	118
2.2.	Origine du plateau	119
3.	Propriétés supraconductrices : phase FFLO et corrélations triplet émergentes ...	122
3.1.	Corrélations supraconductrices	122
3.2.	Interprétation par la bosonisation	124
3.3.	Évaluation des exposants triplet $S^z = 0$ et singulet à fort champ	127
3.4.	Évaluation du paramètre de Luttinger K_{s+} en fonction du champ	129
4.	Diagrammes de phases	131
4.1.	Énergie d'appariement et dépassement de la limite de Pauli	131
4.2.	Nature de la phase plateau $m = \delta$	134
4.3.	Diagramme de phase générique du modèle t-J	136
4.4.	Résultats sur le modèle de Hubbard	139

5. Conclusion partielle	139
VI. Effet orbital et diamagnétisme dans les échelles dopées à deux montants	143
1. Warm-up : modèle et cas sans interaction	144
1.1. hamiltonien et quantification du flux	144
1.2. Système sans interaction	145
1.2.1. Structure de bande	145
1.2.2. Remplissage des bandes : trouver les points de Fermi	148
1.2.3. Susceptibilité orbitale	149
1.3. Limite de couplage faible	151
2. Résultats sur le modèle t-J	152
2.1. Susceptibilité et diagramme de phase	152
2.2. Excitations élémentaires	155
2.3. Courants locaux et corrélations de courant transverse	158
2.4. Susceptibilité magnétique à champ nul	162
2.5. Nature des phases commensurables à $\delta = 1/4$ et $\delta = 1/2$	166
3. Résultats préliminaires sur les échelles bosoniques avec flux	167
3.1. Modèle et prédictions de bosonisation	167
3.2. Résultats de diagonalisation exacte sur les bosons de cœur dur	169
4. Conclusion partielle	173
VII. Modèle de Hubbard de spin 3/2 attractif	175
1. hamiltoniens et motivations expérimentales	175
1.1. Modèle de Hubbard $SU(N)$: le cas répulsif	175
1.2. Modèle de Hubbard spin 3/2 et atomes froids piégés dans les réseaux optiques	176
2. Diagramme de phase au quart-remplissage	178
2.1. Ordres en compétition : déconfinement des paires de Cooper	178
2.2. Diagramme de phase numérique	179
2.2.1. Phase confinée	180
2.2.2. Phase déconfinée	182
2.2.3. Transition d'Ising	182
2.2.4. Transition de Mott à $U > 0$	184
3. Émergence des quartets à basse densité	184
3.1. Arguments pour chercher les quartets à basse densité	184
3.2. Calculs numériques et diagramme de phase $SU(4)$	185
3.3. Analogies et différences avec les modèles $SU(2)$ et $SU(3)$	189
4. Conclusion partielle	189
Conclusion générale	191
Publications	193
Bibliographie	195

Chapitre I

Contexte expérimental et théorique

Ce chapitre introduit le contexte expérimental et théorique qui motive l'étude des systèmes à échelles de spin dopées. On présentera en premier la notion de fortes corrélations électroniques et les modèles généraux qui servent à décrire le comportement du liquide électronique en leur présence. Quelques résultats utiles pour la suite y sont résumés. On présente ensuite brièvement les composés à fortes corrélations électroniques que sont les supraconducteurs à haute température critique et les conducteurs quasi-unidimensionnels. Ce sont en effet des composés qui partagent beaucoup de similitudes avec les échelles de spins et qui ont été abondamment étudiés. Les expériences sur les échelles isolantes et dopées seront enfin présentées avec un accent mis sur les propriétés sous champ magnétique.

1 Les électrons fortement corrélés

1.1 Théorie de Landau du liquide de Fermi

Landau développa dans les années 50 la notion de liquide Fermi [1–5] décrivant les liquides électroniques, comme dans les métaux, et plus généralement fermioniques comme l'Hélium 3. Elle établit que les propriétés physiques d'un grand nombre d'électrons en interaction sont essentiellement celles d'électrons libres dont les paramètres sont renormalisés par les interactions. C'est le cas de la masse effective m^* qui est généralement plus grande que celle d'un électron libre. De façon remarquable, cette théorie fonctionne pour des situations où les interactions sont fortes et ne peuvent être traitées perturbativement [5] et permet d'expliquer de nombreuses observations expérimentales. Cependant, elle ne recouvre bien entendu que les phases métalliques dans lesquelles le système a les mêmes symétries que le liquide sans interactions. En effet, celui-ci peut avoir des instabilités vers d'autres phases brisant des symétries comme la supraconductivité, les phases magnétiques... Ces transitions de phases sont généralement observées en dessous d'une température critique. Dans la théorie du liquide de Fermi, les excitations élémentaires sont des quasi-particules qui correspondent à des électrons habillés par les interactions. Elles ont un vecteur d'onde k et une énergie $E(k) = k^2/(2m^*)$ bien définis. Leur fonction spectrale $A(k, \omega)$ n'est cependant pas un pic delta mais une lorentzienne centrée sur $\omega = E(k)$ et dont la largeur est proportionnelle à $(E - E_F)^2$ où E_F l'énergie de Fermi. Elles sont donc d'autant mieux définies qu'elles sont proches du niveau de Fermi. Dans les solides, comme la température de Fermi est

d'environ 12000 Kelvins¹, l'essentiel des propriétés thermodynamiques et de transport vont être gouvernées par ces excitations de basse énergie autour du niveau de Fermi. Ce qui se passe à plus haute énergie va beaucoup plus dépendre des détails des interactions. Un avantage de la description de Landau est qu'elle permet d'aborder les instabilités du gaz fermionique non pas à partir des fermions libres mais à partir des quasi-particules, intégrant de fait une partie de l'effet des interactions.

En dehors de ces excitations à une particule peuvent exister des excitations collectives de charge ou de spin. Ces modes collectifs vont également contribuer aux propriétés physiques. À une dimension, de part le confinement des particules, on ne peut pas faire d'excitations individuelles sans faire d'excitations collectives [6]. On ne pourra donc pas se ramener simplement à une description de basse énergie en termes de quasi-particules. La prise en compte des interactions se fait pourtant de manière générique dans ce cas et recouvre la théorie du liquide de Luttinger qui sera plus précisément discutée au chapitre II. Les systèmes unidimensionnels sont donc un cas général où la théorie du liquide de Fermi est mise en défaut et où l'on s'attend donc à des propriétés physiques nouvelles, motivant naturellement les recherches dans cette direction.

Un autre point important qui a suscité l'intérêt des systèmes de basse dimension (1D et 2D) est le rôle grandissant des fluctuations quantiques à mesure que l'on réduit la dimensionnalité du système. En effet, le théorème de Mermin-Wagner [7, 8] stipule qu'un système quantique unidimensionnel avec interactions à courte portée ne peut briser de symétrie continue. Cela interdit donc la possibilité de vrai ordre associé à des brisures de symétries continues comme la supraconductivité (symétrie de charge $U(1)$) ou un état de Néel (symétrie de rotation de spin $SU(2)$). D'une certaine manière, ces fluctuations vont favoriser la compétition entre différents états possibles conduisant à une grande richesse des phases observées expérimentalement et théoriquement. Ainsi, de nouvelles phases non conventionnelles ou exotiques peuvent alors être stabilisées comme on le verra par la suite.

1.2 Corrélations électroniques et modèle de Hubbard

On présente ici le modèle le plus élémentaire [7, 9–13] pour décrire des électrons en interaction sur un réseau. Malgré la simplicité de sa formulation, il n'a de solution exacte qu'en une dimension [14] ou en dimension infinie pour certaines équations de champ moyen [15, 16]. Les diagrammes de phase à deux ou trois dimensions ne sont pas établis précisément. Le modèle de Hubbard permet de mettre en évidence le rôle des corrélations entre électrons. Dans toute la suite, on ne considérera que le modèle à une orbitale. On a donc quatre états possibles par site d'après le principe de Pauli $|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ et $|\uparrow\downarrow\rangle$. Les électrons peuvent sauter d'un site à l'autre (entre plus proches voisins seulement en première approximation) avec une intégrale de transfert t . L'interaction coulombienne est écrantée dans les solides et décroît avec la distance : le modèle ne conserve que l'interaction lorsque les électrons sur un même site $U \geq 0$ et néglige les autres. La prise en compte d'interactions à plus longue portée correspond au modèle de Hubbard étendu. Ainsi, l'hamiltonien du modèle de Hubbard à une bande s'écrit

¹Les échelles d'énergie accessibles expérimentalement en physique du solide varient de quelques μeV à quelques l'électron-Volt suivant les sondes expérimentales. Elles sont souvent exprimées dans les unités meV, K, T ou cm^{-1} suivant les mesures avec la correspondance $10 \text{ meV} \simeq 120 \text{ K} \simeq 90 \text{ T} \simeq 80 \text{ cm}^{-1}$.

simplement

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} [c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}] + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (\text{I.1})$$

avec $c_{i\sigma}^{\dagger}$ l'opérateur qui crée un électron de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ au site i et $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$ est l'opérateur de densité électronique dans l'état σ . Le seul paramètre libre du modèle est U/t qui est le rapport entre l'interaction et la largeur de bande. La généralisation à plusieurs bandes ou la prise en compte des interactions à plus longue portée est immédiate.

On remarque tout de suite que le terme cinétique \mathcal{H}_t est diagonal dans l'espace réciproque tandis que le second est diagonal dans l'espace réel. Lorsque $U = 0$, on retrouve simplement les résultats d'un modèle de bande :

$$\mathcal{H}_t = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \mathcal{E}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad \text{avec } c_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} c_{i\sigma} \quad \text{et } \mathcal{E}(\mathbf{k}) = -2t \sum_{\mu=1}^d \cos(k_{\mu}a).$$

Le fondamental (mer de Fermi)

$$|FS\rangle = \prod_{\mathbf{k}, \mathcal{E}(\mathbf{k}) \leq E_F} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} |\text{vide}\rangle$$

est un produit d'états décorrélés² au sens où l'occupation d'une orbitale par un électron \uparrow est indépendante de l'occupation par un électron \downarrow . Pour voir comment le terme d'interaction génère des corrélations entre degrés de liberté de spin des électrons, on considère seulement deux sites voisins et on se place dans la limite d'interaction forte $U \gg t$. Un électron \uparrow peut sauter sur le site voisin avec une énergie t . Si ce site est occupé par un autre électron, ce processus n'est permis que si ce dernier a un spin \downarrow en raison du principe de Pauli. Le système gagne donc de l'énergie cinétique si les spins des électrons voisins sont anti-parallèles et la théorie des perturbations permet de montrer qu'on a une interaction effective entre les deux électrons de type Heisenberg $J\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ avec un couplage antiferromagnétique

$$J = 4t^2/U > 0.$$

Les états propres de l'interaction de Heisenberg à deux corps sont les états singulet $(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ et triplets $\{(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}, |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$. Ainsi, les électrons sont fortement corrélés dans ce modèle et cela rend très difficiles les approches analytiques.

L'hamiltonien (I.1) a des symétries qui permettent de classer ses états propres. La première est la symétrie $U(1)$ associée à la conservation du nombre total de particules $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$. La seconde est la symétrie $SU(2)$ associée à la rotation du spin si bien que le spin total \mathbf{S} est conservé. En particulier, le spin selon z , donc $N_{\uparrow} - N_{\downarrow}$, est conservé. On a ensuite l'invariance par les translations du réseau associées à la conservation du moment total. Dans le cas particulier de réseau bipartite³, il y a une symétrie particule-trou [10] et l'énergie du

²La fonction d'onde doit quand même être anti-symétrique dans l'échange de deux fermions, contrainte de Pauli qui induit une corrélation.

³Réseau que l'on sépare en deux sous-réseaux A et B tels que les sites de A ne soient couplés qu'à ceux de B. Typiquement le réseau carré mais pas le réseau triangulaire.

fondamental ne dépend donc pas du signe de t (ou de U). Par contre, le secteur de charge se transforme en spin et réciproquement. À $U > 0$, un seul électron par site est préférable tandis qu'à $U < 0$, les états de spin nul $|0\rangle$ et $|\uparrow\downarrow\rangle$ sont favorisés si bien que la physique n'est pas la même.

Les nombres quantiques font apparaître le rôle important du remplissage électronique dans le modèle de Hubbard. Ce remplissage est le nombre moyen d'électron par site $n = N^e/N^{\text{sites}}$ et varie entre 0 et 2. Lorsque la symétrie particule-trou est présente, on peut se limiter à $0 \leq n \leq 1$. Au demi-remplissage ($n = 1$), les interactions vont induire une transition de phase métal-isolant appelée transition de Mott [17–20]. En effet, pour $U = 0$ le système est métallique puisqu'on a alors une bande à moitié remplie (voir figure I.1). Pour $U \gg t$, les sites doublement occupés vont être très défavorisés énergétiquement et les électrons vont se localiser, gelant le degré de liberté de charge. Il y a un gap qui s'ouvre au niveau de Fermi séparant deux sous-bandes autour de $\omega = \pm U/2$: le système est alors un isolant de Mott (voir figure I.1). Restent les degrés de liberté de spin qui interagissent par l'hamiltonien de Heisenberg discuté ci-dessus. En pratique, il n'y a pas de paramètre d'ordre associé à la transition de Mott mais celle-ci est souvent accompagnée d'un ordre antiferromagnétique en dimension $D > 1$, avec par exemple un état de Néel. À une dimension, le système est isolant dès que $U > 0$ ce qui fait dire qu'il n'y a pas à proprement parler de transition de Mott puisque $U_c = 0$ (voir aussi le chapitre II). À deux dimensions, il faut un terme t' de saut aux seconds voisins sur les diagonales pour qu'il y ait une transition à une valeur finie de U/t dans le cas du réseau carré [16].

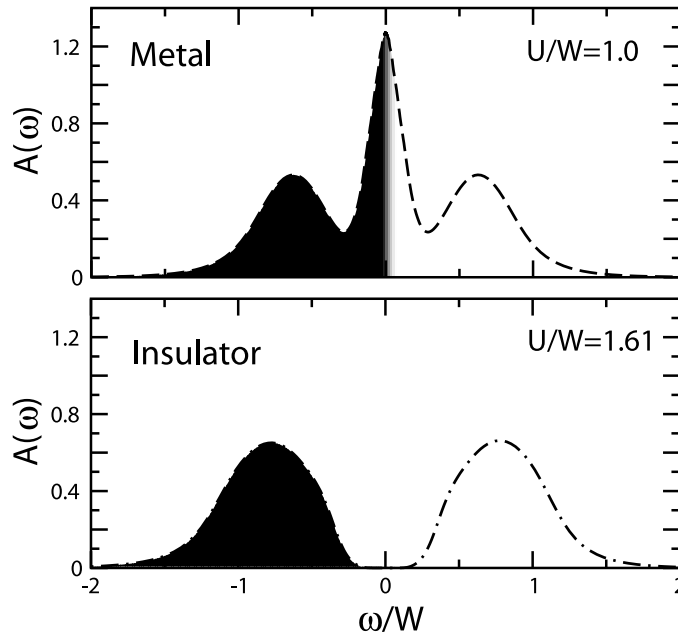


FIG. I.1: Fonction spectrale $A(\omega)$ calculée pour le modèle de Hubbard à température nulle par le groupe de renormalisation numérique. Le système est au demi-remplissage et $W \sim t$ est la largeur de bande. À faible U/W , le pic de quasi-particules à $\omega = 0$ est caractéristique d'un état métallique. Au-delà d'une valeur critique de l'interaction U , un gap s'ouvre au niveau de Fermi ne laissant que les sous-bandes de Hubbard $\omega = \pm U/2$: on a alors un isolant de Mott. Figure adaptée de Bulla et al. [21].

1.3 Magnétisme quantique et modèle de Heisenberg

L'isolant de Mott est donc décrit par l'hamiltonien de Heisenberg⁴ antiferromagnétique

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = J \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{2} [S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+] + S_i^z S_j^z \quad \text{avec } J > 0 \quad (\text{I.2})$$

avec les opérateurs de spins $\mathbf{S} = c_{i,s}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{s's} c_{is}$ et $\boldsymbol{\sigma}$ les matrices de Pauli. Comme pour le modèle de Hubbard, il n'existe de solution exacte qu'à une dimension [23, 24]. Le deuxième membre met en évidence les contributions diagonales d'Ising $S_i^z S_j^z$ qui tendent à aligner les spins dans des directions opposées, et celles de spin-flip $S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+$ qui renversent le spin selon l'axe z . L'état de Néel $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \cdots \uparrow\downarrow\rangle$ n'est pas un état propre de (I.2) à cause de ces fluctuations quantiques. De plus, on se rend compte que, dans l'énergie du singulet, la contribution du terme Ising est $-J/4$ alors que celle du spin-flip est $-J/2$. Les fluctuations quantiques abaissant l'énergie, on a intérêt à former des dimères (autre nom pour les singulets) entre deux sites. Cette approche de l'antiferromagnétisme en considérant la fonction d'onde du fondamental comme une superposition de pavages de dimères a été développée initialement par Anderson [9, 25, 26]. Ces pavages sont appelés états de lien de valence (voir figure I.2). Ils ont la particularité d'être une base surcomplète et de ne pas être linéairement indépendants. L'action des termes de l'hamiltonien de Heisenberg est, dans ce langage, de faire « résonner » les dimères. Sur une plaquette, le fondamental est ainsi l'état résonnant $[|00\rangle + |\Xi\rangle]/\sqrt{3}$. Un état de Néel est la superposition avec un poids égal de tous les pavages bipartites⁵ [22]. Certains fondamentaux n'auront un poids important que sur les pavages avec dimères à courte portée, comme c'est le cas pour la chaîne $J_1 - J_2$ au point Majumdar-Ghosh. Un fondamental pour lequel les résonances locales dominent l'énergie et qui est à les plus gros poids sur les pavages

⁴L'hamiltonien de Heisenberg est en fait beaucoup plus général que la dérivation qui en a été faite ici [9, 22].

Il décrit le magnétisme dans des systèmes de spin- S quelconque et d'interactions J_{ij} de tous signes et de portée quelconque. Il ne prend cependant pas en compte des processus à plus de deux qui peuvent avoir une contribution significative comme on le verra au chapitre IV.

⁵C'est-à-dire les pavages tels que les dimères ont un spin dans le sous-réseau A et l'autre spin dans le sous-réseau B.

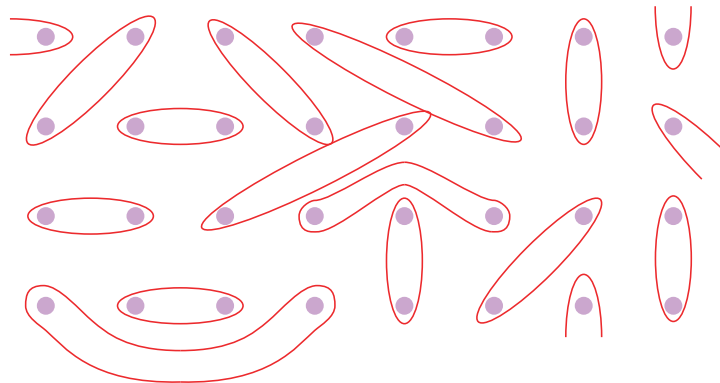


FIG. I.2: Les pavages de dimères constituent une base particulièrement adaptée à la description des états singulets de basse dimensionnalité où les fluctuations quantiques sont importantes.

de dimères à courte portée est appelé état RVB (Resonating Valence Bond). De nouveaux états magnétiques ont été trouvés dans les systèmes de basse dimensionnalité et frustrés qui favorisent le rôle des fluctuations de spins et partant, la possibilité de réaliser des états RVB [27]. Les échelles de spin en sont une réalisation et présentent par exemple des corrélations de spins avec une décroissance exponentielle même à température nulle

$$\langle \mathbf{S}(x) \cdot \mathbf{S}(0) \rangle \propto (-1)^x e^{-x/\xi}. \quad (\text{I.3})$$

On parle de liquide de spins⁶ par analogie avec les corrélations de densité dans un liquide. Cependant, le réseau carré a pour fondamental un état de Néel [28]. L'effet des fluctuations est alors de renormaliser les quantités physiques comme l'énergie par site, les corrélations antiferromagnétiques... Il peut sembler surprenant d'avoir un fondamental comme l'état de Néel pour le modèle de Heisenberg. Celui-ci brise en effet la symétrie SU(2) de l'hamiltonien et Marshall [29] a démontré que le fondamental de tout système antiferromagnétique *de taille finie* que l'on pouvait séparer en deux sous-réseaux A et B était un état singulet⁷. On s'attend donc à ce que le fondamental dans la limite thermodynamique soit aussi un singulet qui ne brise pas SU(2) et non un état de Néel. En fait, l'état de Néel de l'hamiltonien de Heisenberg doit être vu comme un paquet d'ondes des états de spin total $S^{\text{tot}} = 0, 1, 2, \dots$ qui est dégénéré avec le fondamental singulet à la limite thermodynamique [30]. La brisure spontanée de la symétrie SU(2) ne se fait donc qu'à la limite thermodynamique⁸

Le cas du modèle de Heisenberg à une dimension est intéressant car en vertu du théorème de Mermin-Wagner on ne pourra avoir d'état de Néel. Le théorème de Lieb-Schultz-Mattis [31] (voir aussi le chapitre II) stipule que les chaînes de spin demi-entiers ont soit un fondamental non dégénéré avec un continuum d'excitations, soit une dégénérescence mais nécessairement associée à un gap et une brisure spontanée de la symétrie de translation. Pour la chaîne de spin 1/2, les corrélations décroissent en loi de puissance (voir chapitre II). En revanche, pour les chaînes de spin entier, on peut avoir un gap et un fondamental non dégénéré [32–34]. C'est le cas de la chaîne de spin-1 dont le gap vaut environ $0.41J$ [35] et entraîne une décroissance exponentielle des corrélations de spin.

1.4 Isolant de Mott dopé : le modèle t-J

En dopant en trous un isolant de Mott, les électrons vont pouvoir se déplacer dans les places vacantes ainsi libérées. On note généralement $\delta = 1 - n$ le dopage en trous. En se plaçant dans la limite $U \gg t$, les sites doublement occupés sont très défavorisés et on peut les interdire explicitement en utilisant le projecteur de Gutzwiller

$$\mathcal{P}_G = \prod_i (1 - n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}) \quad (\text{I.4})$$

sur la partie cinétique. Le terme d'interaction se ramène à l'hamiltonien de Heisenberg modifié par le fait que tous les sites ne sont pas nécessairement occupés. On obtient ainsi à

⁶Cette dénomination est en toute rigueur un peu abusive : un vrai liquide de spin étant considéré comme un état n'ayant aucun paramètre d'ordre [27]. On peut avoir des corrélations de spin exponentielles mais un paramètre d'ordre, tel que la modulation des liens de valence, qui ait une valeur moyenne non nulle.

⁷Un résultat important pour les simulations numériques.

⁸Cela peut être étudié numériquement en traçant les spectres d'énergie dans un secteur de spin total S en fonction de la valeur propre $S(S + 1)$: on les appelle tours d'états d'Anderson.

l'ordre t^2/U l'hamiltonien t-J [7, 9]

$$\mathcal{H} = \mathcal{P}_G \mathcal{H}_t \mathcal{P}_G + J \sum_{\langle i,j \rangle} [\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j] + \text{Termes à trois sites} \quad (\text{I.5})$$

qui met en évidence la compétition entre énergie cinétique et énergie magnétique. Les termes à trois sites sont des termes avec un coefficient en t^2/U comme J mais qui ne frustrent pas le terme de Heisenberg comme le terme cinétique. Tout comme la partie cinétique, ils sont absents au demi-remplissage et habituellement oubliés à faible dopage dans la littérature [7, 9]. Ce modèle a un avantage par rapport au modèle de Hubbard initial. En intégrant les processus de haute énergie, il est mieux adapté à la description de la physique de basse énergie, notamment du magnétisme des composés dopés. L'espace de Hilbert est lui aussi restreint et croît comme $3^{N_{\text{sites}}}$ au lieu de $4^{N_{\text{sites}}}$ pour le modèle de Hubbard ce qui est un atout pour les simulations numériques (voir le chapitre III). Cependant, son domaine de validité est difficile à déterminer précisément : on s'attend à ce qu'il soit correct dans la limite $J/t \sim t/U \ll 1$ et pour des faibles dopages en trous. Bien qu'on puisse considérer le modèle t-J comme un modèle en soi, on peut comparer numériquement ses prédictions à celles du modèle de Hubbard et établir un domaine de validité. Par exemple, dans le cas des échelles dopées, la comparaison est assez bonne pour $U/t \gtrsim 6$ [36].

2 Composés typiques à fortes corrélations

2.1 Supraconducteurs à haute température critique

Les supraconducteurs à haute température critique ont été découverts en 1986 par Bednorz et Müller [37]. Ces composés sont des céramiques contenant plusieurs espèces chimiques et qui ont en commun de posséder des plans bidimensionnels de cuivre et d'oxygène séparés par des plans plus isolants (cf figure I.3). Malgré une structure relativement similaire pour ce qui est des plans cuivres et des températures critiques élevées (entre 30K et 120K environ), il est difficile d'identifier les propriétés physiques universelles de ces systèmes. En effet, beaucoup de paramètres expérimentaux rentrent en jeu : dopage et transfert de charge, impuretés, nombres de plans et présence d'autres sous-systèmes... Malgré cela, il semble généralement admis que la symétrie du paramètre d'ordre supraconducteur est $d_{x^2-y^2}$ avec des paires de Cooper singulet en faisant l'archétype du supraconducteur non conventionnel⁹. L'origine du mécanisme conduisant à de telles températures critiques ne fait pas encore l'objet d'un consensus mais l'antiferromagnétisme semble jouer un rôle déterminant dans l'apparition de la supraconductivité. Les plans CuO se prêtent bien à une description de type modèle t-J. En effet, le réseau est alors le réseau carré formé par les sites de cuivres reliés par les liaisons Cu–O–Cu. Par substitution chimique des contre-ions, le dopage δ des plans CuO peut être fixé à une valeur déterminée. Les trous se mettent préférentiellement sur les oxygènes si bien qu'on s'attend à avoir un modèle de Hubbard à 3 bandes (une bande p pour les oxygènes et deux sous-bandes de Hubbard $d_{x^2-y^2}$ pour les cuivres). En fait, Zhang et Rice ont montré [38] que les trous formaient un état singulet avec Cu^{2+} (singulet de Zhang–Rice) qui se déplace

⁹Le paramètre d'ordre d -wave $d_{x^2-y^2}$ a une fonction de gap dépendant de \mathbf{k} du type $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_0(\cos k_x - \cos k_y)$ tandis que c'est une constante pour s -wave.

sur le réseau des cuivres. Ils dérivent alors un modèle effectif à une bande sur réseau carré de type $t - J$. L'interaction magnétique effective entre deux électrons est alors celle de super-échange médiée par les oxygènes. On attend pour cette dernière une valeur positive et très grande (d'un ordre de grandeur de $J \sim 1000$ K) lorsque les liaisons CuO sont alignées¹⁰.

La schématisation du diagramme de phase expérimental de ces supraconducteurs est représentée sur la figure I.4 et montre que les composés sont des isolants de Mott au demi-remplissage. Une fois dopée, la phase antiferromagnétique survit jusqu'à un dopage critique puis un dôme supraconducteur émerge, avec un maximum pour un dopage optimal. Tenant compte de la grande valeur de l'interaction magnétique, Anderson a suggéré un mécanisme basé sur la description de l'état antiferromagnétique par un état RVB [42]. De manière très qualitative, le mécanisme RVB s'appuie sur le fait que si l'on introduit deux trous dans un pavage de dimères à courte portée tel que celui de la figure I.2, il est énergétiquement préférable de ne briser qu'un singulet au lieu de deux. Les trous ont donc tendance à se lier avec une énergie d'appariement contrôlée par l'échange magnétique J . Nous verrons que les échelles de spins dopées constituent un système très simple dans lequel ce mécanisme est plus légitime puisque l'isolant de Mott parent y est bien un état RVB à la différence du réseau carré. D'autre part, des phases inhomogènes avec des modulations de la densité de trous et de spin selon une direction ont été proposées pour décrire les propriétés des cuprates [43–45]. L'existence de tels « stripes » est discutée théoriquement et expérimentalement [40, 41, 46–49] et peut justifier l'étude de modèles quasi-unidimensionnels comme les échelles de spins (voir figure I.4).

2.2 Composés organiques unidimensionnels

Les composés organiques ont suscité un fort intérêt depuis les mises en évidence de leur propriétés remarquables à la fin des années 70 [50, 51]. Ils sont constitués d'empilements de molécules planes séparés par des contre-ions. Les orbitales π sont perpendiculaires aux plans des molécules et ont donc un fort recouvrement dans cette direction selon laquelle la conductivité est maximale (voir figure I.5). Des familles de composés de structures analogues comme $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ et $(\text{TMTTF})_2\text{X}$ (avec X un contre-ion) ont pu être synthétisées et étudiées de façon systématique. Cela a permis d'établir un diagramme de phase global, représenté sur la figure I.6, pour l'ensemble de ces familles en fonction de la pression effective. Cette dernière correspond soit à la combinaison d'une pression mécanique appliquée et d'une pression chimique évaluée selon les contre-ions. Pour faire le lien avec les interactions, il semble raisonnable de dire que l'intégrale d'échange t augmente avec la pression : l'axe des abscisses peut donc être compris comme $P \sim 1/U$.

Ce diagramme de phase présente une grande variété de phases observées. Notamment, certaines phases ont des propriétés caractéristiques de composés unidimensionnels en interactions fortes qui appartiennent à la classe des liquides de Luttinger (phase LL). Seule une importante pression permet de retrouver des signatures d'une phase de type liquide de Fermi. À noter qu'il n'est pas toujours facile d'évaluer la dimensionnalité que l'on peut attribuer au système suivant les conditions expérimentales. À basse température, il existe de nombreuses instabilités vers des phases ordonnées. On a ainsi un état isolant de Mott à basse pression

¹⁰Les orbitales p de l'oxygène et d du cuivre ont alors un recouvrement maximal.

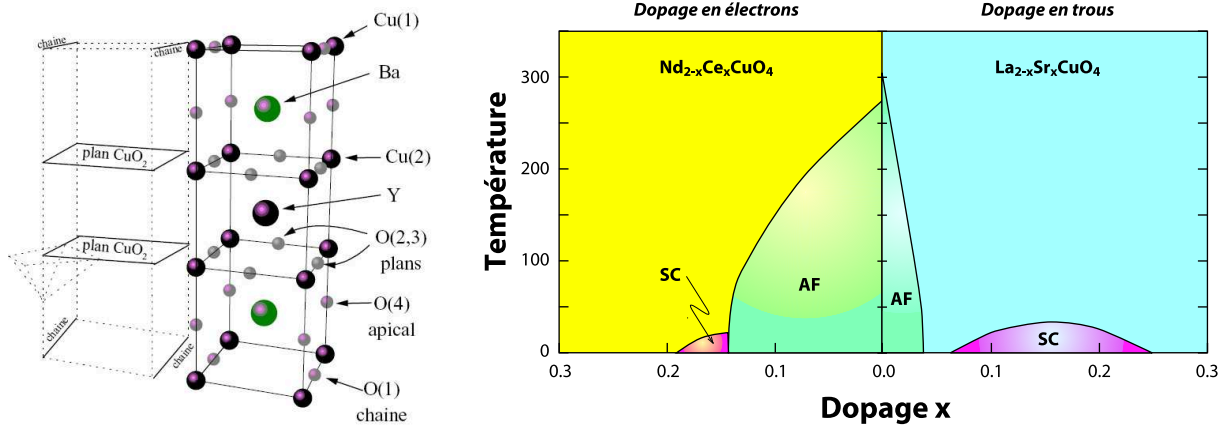


FIG. I.3: À gauche : structure cristallographique du composé YBaCuO montrant les plans CuO ainsi que le sous-système de chaînes entre les plans. D'après Bobroff [39]. À droite : diagramme de phase schématique du supraconducteur à haute température critique LaSrCuO.

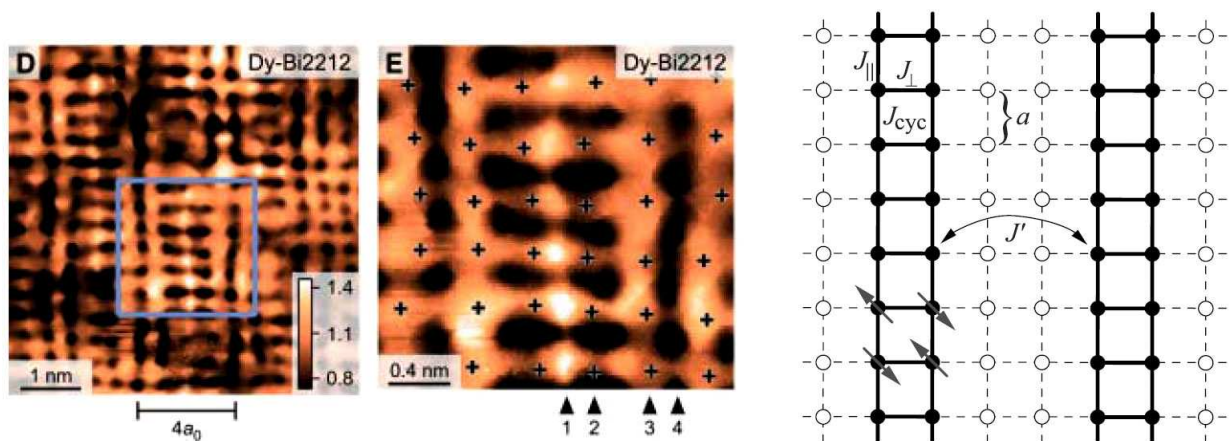


FIG. I.4: À gauche : modulation de la densité locale de trous de type échelles observées par spectroscopie tunnel (STM) dans les cuprates. D'après Kohsaka et al. [40]. À droite, modèle de type stripe pour décrire le magnétisme des plans CuO bidimensionnels. D'après Uhrig et al. [41].

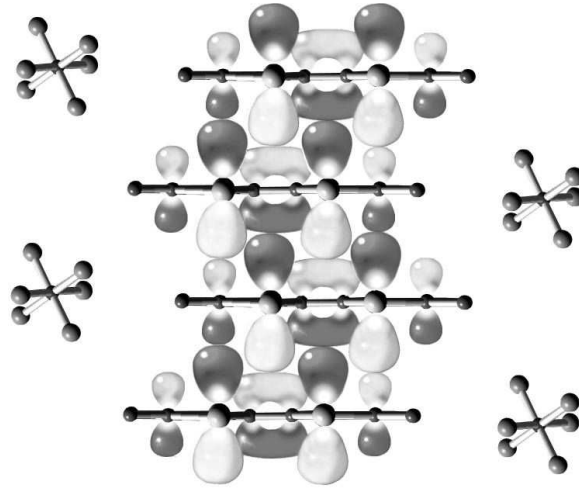


FIG. I.5: Structure d'un composé de type $(TMTTF)_2X$ ou $(TMTSF)_2X$. Les molécules planes sont empilées favorisant le recouvrement des orbitales π selon l'axe de l'empilement qui en fait donc un conducteur quasi-unidimensionnel. Les contre-ions PF_6 sont représentés à côté. D'après Bourbonnais et Jérôme [52].

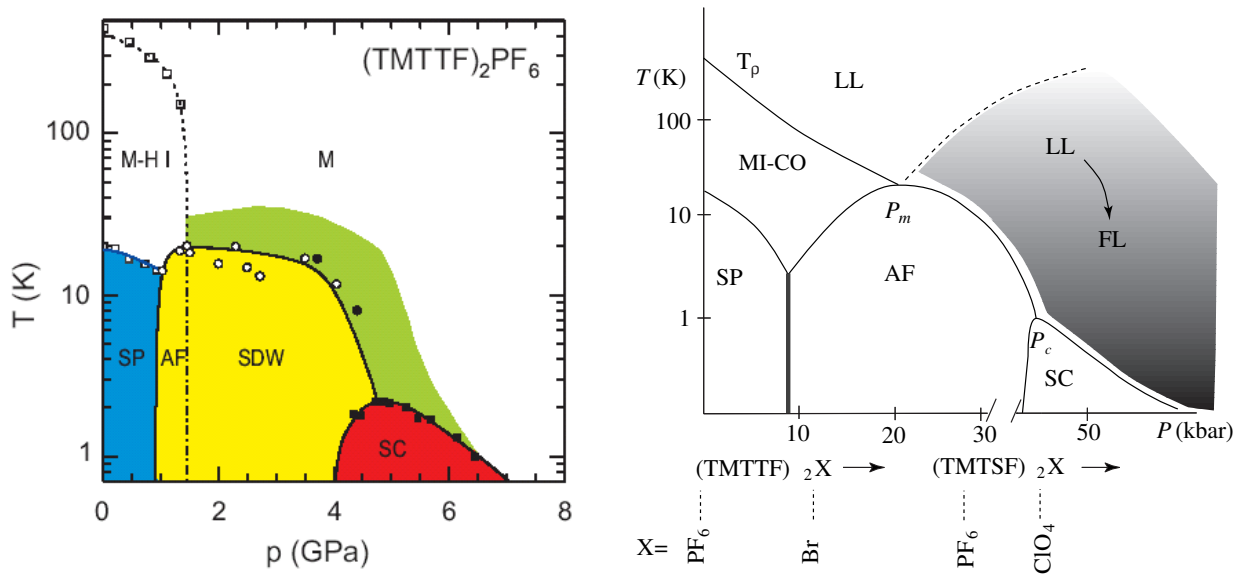


FIG. I.6: À gauche : diagramme de phase du composé $(TMTTF)_2PF_6$ en fonction de la pression. À droite : diagramme de phase de la famille des organiques TTF en fonction de la pression effective. Les pointillés représentent la pression effective pour un composé donné à pression mécanique ambiante. D'après Bourbonnais et Jérôme [52].

(phase avec ordre de charge¹¹ noté MI-CO) qui peut donner lieu à une instabilité spin-Peierls ou antiferromagnétique à plus basse température. Une instabilité de Peierls est due au couplage entre les phonons et le liquide électronique. Le système peut gagner de l'énergie électronique (cinétique ou magnétique) en déformant le réseau ce qu'on appelle transition de Peierls pour la charge et spin-Peierls pour le spin. Le remplissage des bandes dans ces systèmes est fixé par le remplissage des orbitales moléculaires. En l'absence de dimérisation le long des empilements, on peut considérer qu'on est au quart-remplissage [50]. La dimérisation entraînerait de façon effective un demi-remplissage. Des remplissages commensurables sont nécessaires à l'établissement d'une phase de Mott à une dimension comme on le verra au chapitre II. Expérimentalement, il semble qu'une situation au quart-remplissage avec de fortes interactions coulombiennes permet une interprétation cohérente des données [6, 50].

À forte pression, un dôme supraconducteur est trouvé avec des températures critiques de l'ordre du Kelvin (voir figure I.6). Le mécanisme et la nature du paramètre d'ordre dans ce système font toujours l'objet d'un débat [50, 53]. Il est cependant admis qu'on aurait un supraconducteur non conventionnel avec un rôle important des fluctuations de spins. L'ajout d'impuretés dans le système montre une grande sensibilité de la température critique avec leur concentration, semblant suggérer la possibilité d'un paramètre d'ordre avec des nœuds sur la surface de Fermi [54]. Des mesures de RMN montrent que le décalage de Knight du ⁷⁷Se n'est pas affecté par la transition supraconductrice ce qui serait en faveur d'un appariement triplet [55]. Enfin, les mesures de champs critiques sur (TMTSF)₂PF₆ montrent une forte anisotropie de l'état supraconducteur, une courbure anormale de $H_{c2}(T)$ ainsi qu'un dépassement possible de la limite de Pauli [53, 56, 57]. La limite de Pauli, ou limite paramagnétique, est le champ critique théorique pour lequel l'énergie Zeeman de deux quasi-particules polarisées selon le champ magnétique égale l'énergie de condensation à température nulle d'une paire de Cooper. Pour un supraconducteur avec appariement singulet, c'est une limite très forte pour le champ critique supraconducteur si l'on est dans une situation où l'effet orbital est négligeable. Elle peut être dépassée dans généralement trois situations : l'appariement est triplet, un couplage spin-orbite brise SU(2) et « mélange » les secteurs singulet et triplet donnant au système une susceptibilité magnétique finie ou enfin, l'appariement est singulet mais le paramètre d'ordre supraconducteur est inhomogène. Cette dernière situation correspond aux phases de Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) [58–61] qu'on aura l'occasion de discuter plus en détails au chapitre V. Pour les supraconducteurs organiques, les auteurs concluent à une supraconductivité de type triplet pour expliquer de telles observations. Récemment, l'étude du composé (TMTSF)₂ClO₄ met en évidence une évolution plus complexe de l'état supraconducteur sous champ magnétique avec la possibilité d'un crossover à fort champ vers une phase avec un appariement triplet et/ou de la supraconductivité inhomogène de type FFLO [62].

¹¹L'ordre de charge est particulier en ce sens qu'il ne donne pas lieu à un pic de Bragg mais une « dimérisation » locale des charges conduisant à un état ferroélectrique [50].

3 Expériences sur les composés à échelles de spins

3.1 Échelles isolantes

3.1.1 Parité du nombre de montants et gap de spin

Nous abordons maintenant les composés à échelles avec en premier le cas des échelles isolantes. Une première famille de composés a été découverte [67] au début des années 90 sous la formule générique $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$ (voir figure I.7). Tandis que le composé Sr_2CuO est connu pour contenir des chaînes de spin 1/2, les composés SrCu_2O_3 et $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ peuvent être considérés comme des échelles à 2 et 3 montants. En effet, la structure des plans CuO dans ces composés comporte des lignes de cisaillement qui rendent la liaison Cu–O–Cu non pas linéaire mais à angle droit. Dans ce cas, le couplage magnétique entre deux cuivres est beaucoup plus petit que lorsque les liaisons sont alignées et souvent ferromagnétique¹². On peut donc considérer les sous-systèmes en échelles comme faiblement couplés magnétiquement. De plus, ces composés sont des isolants de Mott car au demi-remplissage. On trouve expérimentalement [64] la signature d'un gap de spin pour l'échelle à deux montants, tandis que celle à 3 montants n'en présente pas (voir figure I.7). En effet, s'il n'y pas de gap de spin dans le système, la susceptibilité sera au moins finie à température nulle. En présence d'un gap de spin Δ_S , on aura en revanche une suppression exponentielle de la susceptibilité suivant une loi du type Arrhenius [69]

$$\chi(T) \propto \frac{1}{\sqrt{T}} e^{-\Delta_S/k_B T}. \quad (\text{I.6})$$

Cela permet d'ailleurs d'extraire le gap de spin qui vaut ici 420 K. Les mesures de RMN [70, 71] donnent un gap plus grand d'environ 680 K mais du même ordre de grandeur. La présence du gap de spin dans une échelle à deux montants, alors qu'il n'y en a pas avec 1 ou 3 montants, peut être justifiée qualitativement dans le modèle de Heisenberg où l'on prend une interaction selon les barreaux J_\perp beaucoup plus grande que celle le long des montants J_\parallel . Dans ce cas, on forme des singulets très forts sur les barreaux. La première excitation magnétique est de former un triplet sur un barreau ce qui coûte J_\perp . On a donc des dimères fortement ancrés sur les barreaux dans cette limite anisotrope. Si on branche J_\parallel , ce triplet va disperser le long des montants comme une particule à une dimension [72, 73] dont la relation de dispersion est $J_\perp + J_\parallel \cos k + \dots$ et a son minimum $\Delta_S = J_\perp - J_\parallel$ en $k = \pi$. Au contraire, dans une échelle à trois montants, on peut former sur chaque barreau un singulet mais il reste alors un spin libre sur chaque barreau. Ces spins libres vont approximativement constituer une chaîne de spin 1/2 qui n'est pas gappée. L'image RVB est donc particulièrement adaptée à la description des échelles : si on brise un singulet on forme deux spinons (excitations de type spins libres) et ceux-ci vont être confinés avec 2 montants mais pas confinés avec 3 [65]. Dans le cas isotrope, les résultats numériques confirment cette approche en montrant que les échelles avec un nombre pair de montants ont un gap tandis que celles avec un nombre impair n'en ont pas (voir figure I.8). On verra au chapitre II que le gap s'ouvre dès que l'on branche l'interaction J_\perp entre les chaînes.

¹²Les orbitales p de l'oxygène et d du cuivre ont alors un recouvrement nul si l'angle est exactement 90° et donc pas de super-échange. Il reste un échange direct, donc ferromagnétique et beaucoup plus petit. Si l'angle est légèrement distordu, il y a compétition entre terme magnétique et ferromagnétique [68].

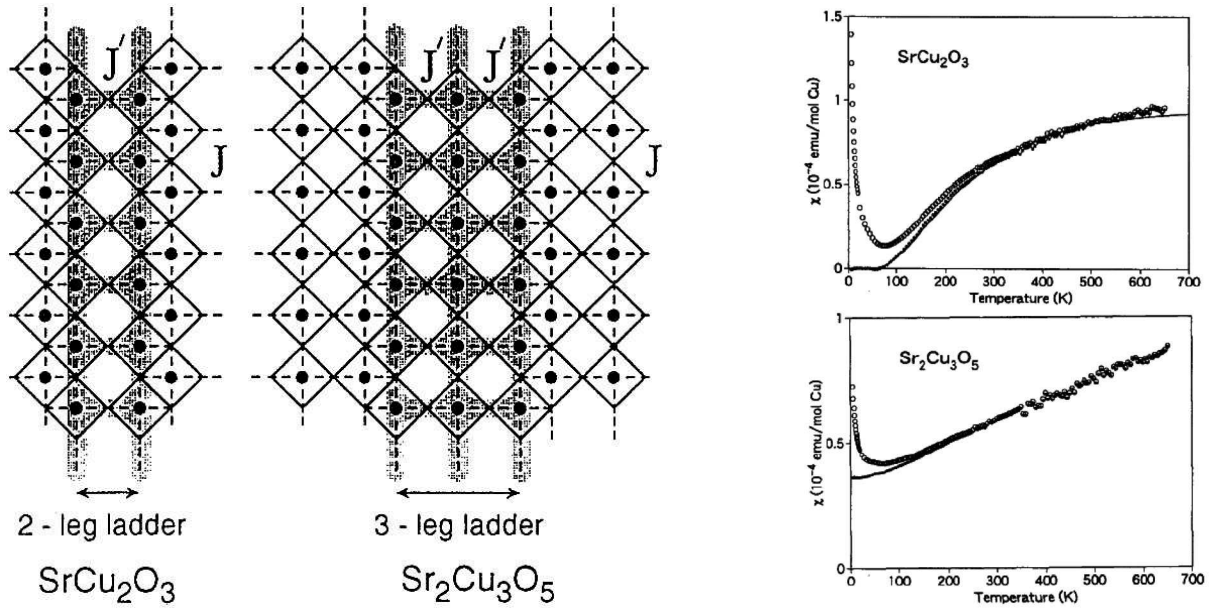


FIG. I.7: À gauche : Structure des échelles $Sr_{n-1}Cu_{n+1}O_{2n}$ pour $n = 3$ (2 montants) et $n = 5$ (3 montants). D'après Rice [63]. À droite : susceptibilités expérimentales montrant l'existence d'un gap de spin pour 2 montants tandis qu'il n'y en a pas pour trois montants. Les contributions de type loi de Curie des impuretés ont été soustraites pour obtenir le signal en trait plein. D'après Azuma et al. [64].

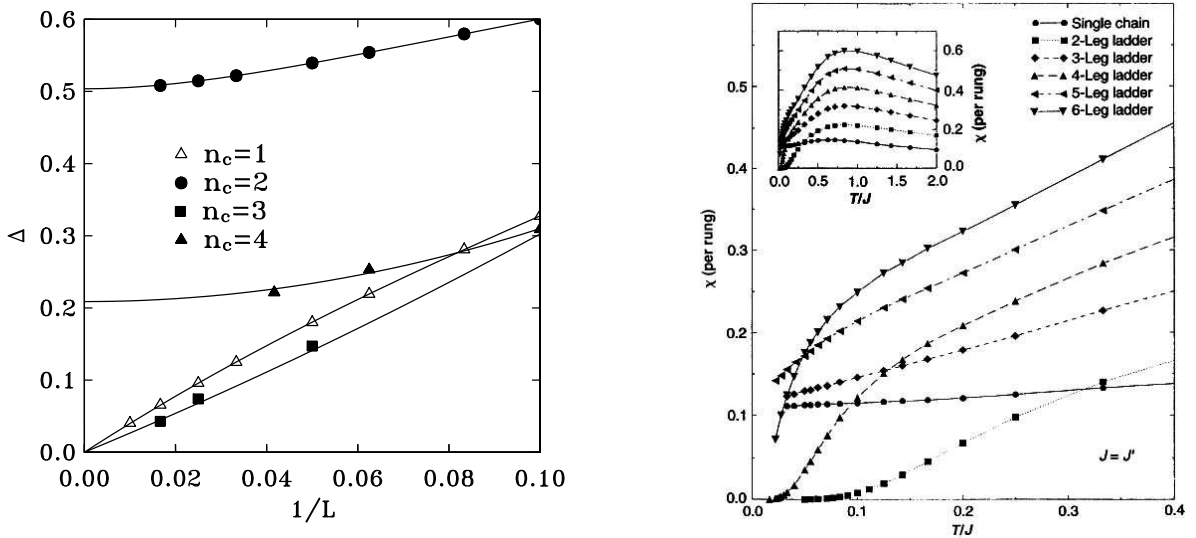


FIG. I.8: À gauche : extrapolations de taille finie des gaps de spin dans les échelles de Heisenberg en fonction du nombre de montants n_c obtenus par DMRG. D'après White et al. [65]. À droite : susceptibilités à basse température pour des échelles de 1 à 6 montants obtenues par Monte-Carlo quantique. D'après Frischmuth et al. [66].

3.1.2 Plateaux d'aimantation

Une particularité des systèmes avec gap de spin est l'existence de plateaux dans la courbe d'aimantation. Pour un antiferromagnétique (dont l'aimantation est nulle en l'absence de champ externe) qui a des excitations de basse énergie, une aimantation apparaît dès que l'on applique un champ externe [27]. Elle croît ensuite jusqu'à ce que tous les spins soient polarisés. Dans une échelle à deux montants, la première excitation triplet est gappée si bien qu'il faut un champ critique égal au gap de spin pour créer une aimantation finie (voir figure I.9). Ensuite, l'aimantation par site m augmente continûment jusqu'au plateau de saturation. Ce type de courbe d'aimantation a pu être mis en évidence dans un composé en échelle organique qui est un isolant de Mott et dont le réseau est constitué par des ions cuivre. Cela est rendu possible grâce à la valeur beaucoup plus petite du gap de spin (environ 7 T) que dans les cuprates. Le composé organique $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ peut être compris en première approximation à partir du modèle de Heisenberg anisotrope avec $J_{\parallel}/J_{\perp} \sim 0.2$ ce qui semble légitime en regard de sa structure cristallographique particulièrement anisotrope (voir figure I.9 et I.10). Une autre échelle d'énergie intervient expérimentalement : celle du couplage entre échelles qui est beaucoup plus faible. En fonction de la température (cf figure I.10), on a différents régimes : classique à haute température, les plateaux en dessous de Δ avec une phase liquide de Luttinger et enfin un ordre antiferromagnétique tridimensionnel à très basse température correspondant à la transition dimensionnelle. La nature de la transition est du second ordre et de type commensurable-incommensurable. D'après les résultats qui seront rappelés au chapitre II, on s'attend à un comportement en racine carrée au voisinage des deux points critiques. Expérimentalement, ce n'est pas observé et les effets tridimensionnels ont été invoqués pour expliquer cela. Aujourd'hui, il semble que les interactions Dzyaloshinski-Moriya soient responsables de ce comportement [77] permettant une compréhension de la courbe d'aimantation à partir d'échelles isolées. D'autres composés de type dimères couplés et assez similaires ont également été étudiés comme le cousin au brome $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Br}_4$ [78] ou encore $\text{Na}_2\text{Co}_2(\text{C}_2\text{O}_4)_3(\text{H}_2\text{O})_2$ [79] et $(5\text{IAP})_2\text{CuBr}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ qui a des couplages inter-échelles négligeables [80]. Enfin, des plateaux d'aimantation peuvent exister pour des valeurs non nulles de l'aimantation : il a été ainsi montré que les échelles anisotropes à trois montants pouvaient présenter un plateau d'aimantation à $m = 1/3$ [81, 82].

3.2 Échelles dopées

L'intérêt du dopage des échelles de spins provient de la proposition de Dagotto *et al.* [63, 83–85] qui suggérait qu'elles puissent représenter une réalisation simple du mécanisme RVB pour la supraconductivité proposé par Anderson dans le contexte des supraconducteurs à haute température critique [42]. En effet, en considérant le modèle t-J avec des couplages sur les barreaux $J_{\perp} \gg J_{\parallel}$, on voit qu'il coûte une énergie J_{\perp} de ne pas appairier les trous sur un même barreau (voir figure I.11). L'énergie d'appariement est alors contrôlée par l'énergie magnétique J_{\perp} , tout comme le gap de spin. La corrélation entre appariement et gap de spin est bien vérifiée dans l'étude analytique et numérique des modèles de Hubbard et t-J isotropes comme on le verra par la suite. De façon remarquable, le paramètre d'ordre a une symétrie du type d -wave [86] pour ces modèles rappelant celui des céramiques à haute température critique.

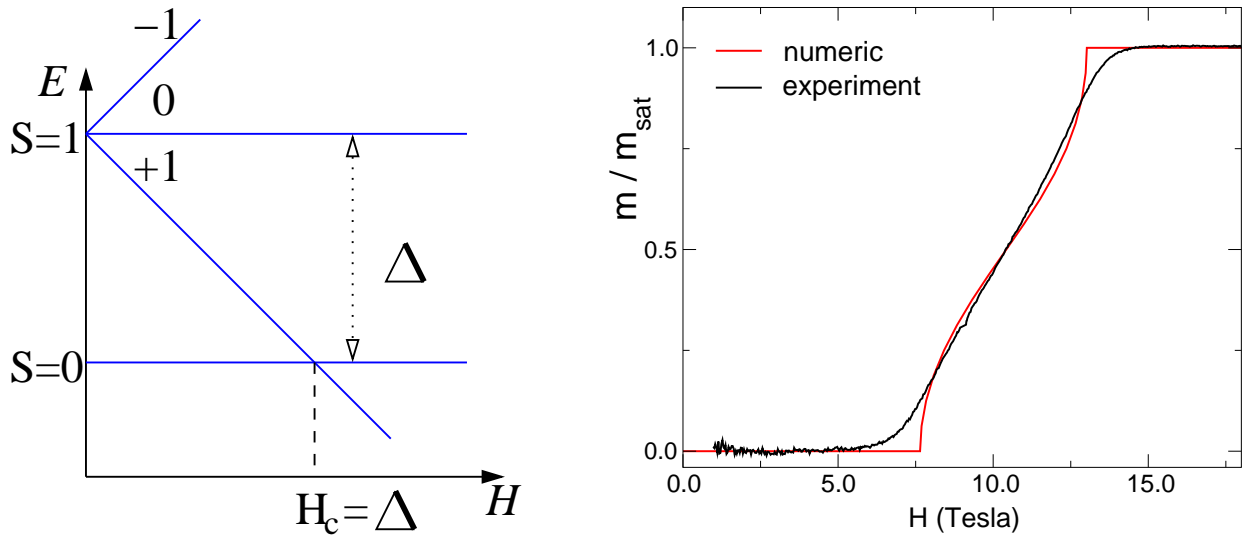


FIG. I.9: Plateaux d'aimantation dans les échelles de spins. À gauche, l'état triplet polarisé selon le champ croise le fondamental singulet pour un champ critique égal au gap de spin. À droite, fit de la courbe d'aimantation expérimentale de $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ par un calcul numérique de diagonalisation exacte sur une échelle isolée. Figure adaptée de Hayward et al. [74].

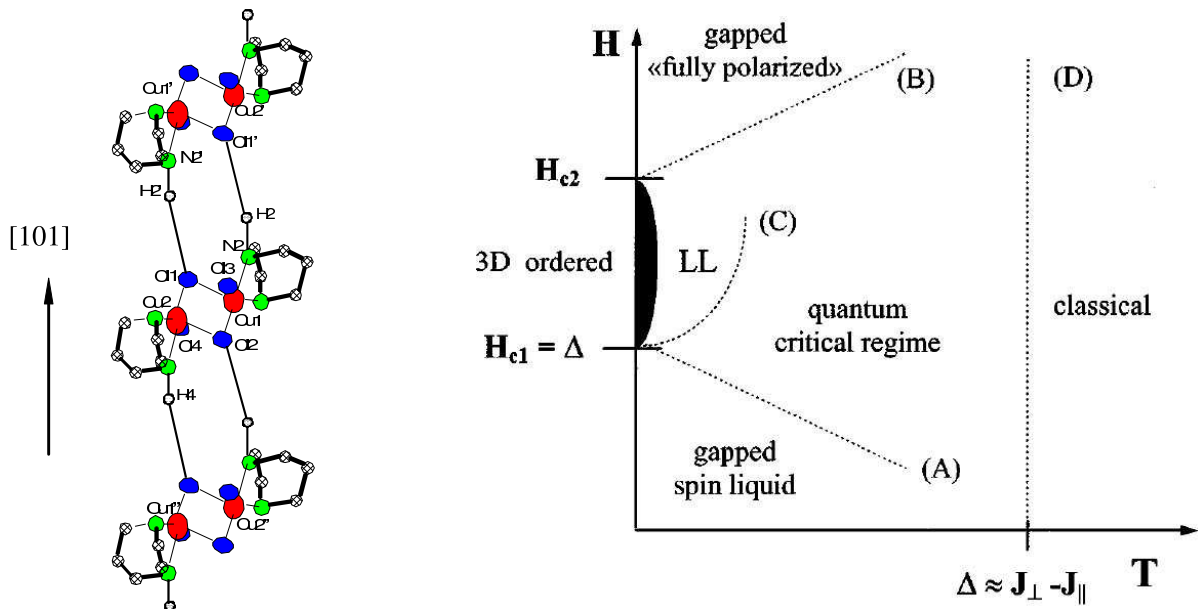


FIG. I.10: À gauche, structure du composé organique $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$. À droite, diagramme de phase sous champ magnétique en fonction de la température. D'après Chaboussant et al. [75, 76].

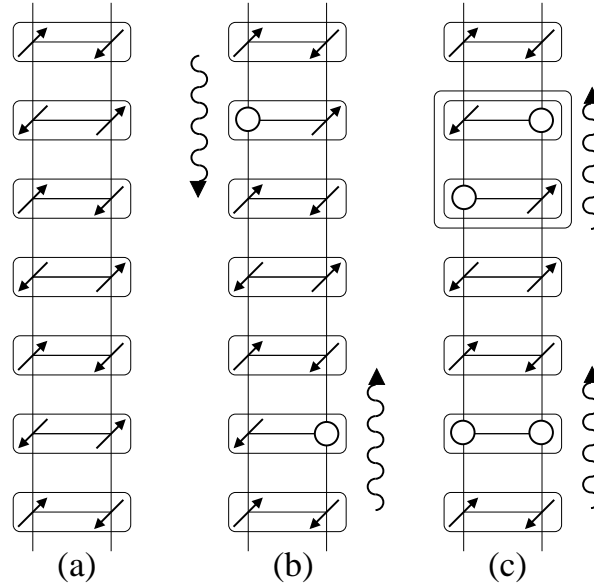


FIG. I.11: *Approche qualitative de l'appariement des trous dans les échelles de spin dopées dans la limite $J_{\perp} \gg J_{\parallel}, t_{\parallel}, t_{\perp}$. (a) l'isolant de Mott. (b) deux trous éloignés brisent deux singulets ce qui coûte approximativement $2J_{\perp}$. (c) deux trous appariés sur le même montants ne brisent qu'un singulet ce qui ne coûte que J_{\perp} . Les trous ont donc tendance à s'apparier. Les flèches suggèrent la dispersion des paires.*

Tout comme ces dernières, on peut jouer sur le remplissage effectif en trous des plans CuO en substituant les contre-ions par d'autres espèces. Ainsi, le composé $\text{LaCuO}_{2.5}$ contient des échelles de spin séparées par des contre-ions (voir figure I.12). C'est un isolant de Mott avec un grand gap de spin de l'ordre de 400 K [87]. Par substitution au Strontium, on obtient la famille $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{2.5}$ qui subit une forte chute de la résistivité avec le dopage pour $x \simeq 0.2$, manifestant une transition métal-isolant [87]. Un état supraconducteur d -wave a été prédit pour ce système même en présence d'une interaction inter-échelles non négligeable [88, 89]. Pourtant, rien de tel n'a été trouvé expérimentalement avec comme explication proposée l'effet du désordre induit par la substitution en Strontium [83]. Le désordre a en effet fortement tendance à localiser les fonctions d'onde dans les systèmes 1D [90]. L'effet du désordre a été évalué dans les échelles en tenant compte des interactions par Orignac [91, 92] et a montré une plus grande sensibilité de la supraconductivité d -wave que celle s -wave. La disparition de la supraconductivité est due aux importants effets de localisation associé au désordre. La théorie BCS pour les supraconducteurs non conventionnels [93] montre qu'un supraconducteur s -wave tridimensionnel n'est pas sensible au désordre tandis que ceux avec des nœuds sur la surface de Fermi le sont beaucoup plus. Qualitativement, la situation est différente de celle des échelles et la suppression de la supraconductivité est dans ce cas due au fait que les impuretés vont avoir tendance à moyenniser les propriétés physiques sur la surface de Fermi. Comme le gap d'un paramètre d -wave a des nœuds sur cette surface, il sera moins robuste vis-à-vis du désordre qu'un gap s -wave qui est isotrope.

Malgré cela, la supraconductivité a bien été trouvée [98] dans un système à échelle de spin dans la famille de composés $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ obtenue à partir de $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ par substitution du Strontium par le Calcium, qui a la même valence. C'était ainsi le premier

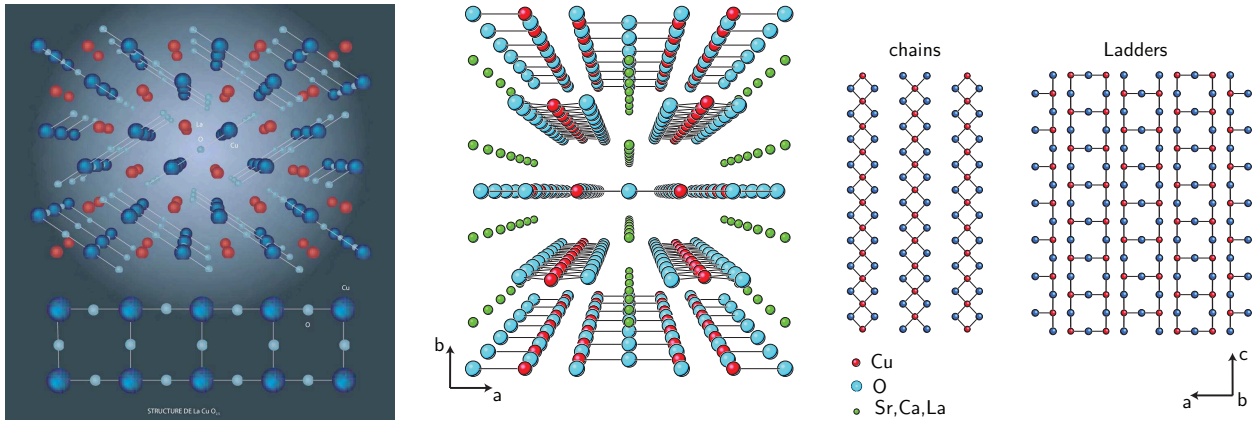


FIG. I.12: Structures de deux composés en échelles dopés. À gauche : $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{2.5}$ ne contient que des sous-systèmes à échelles. D'après Orignac et al. [94]. À droite : $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ contient des plans avec des échelles, d'autres avec des chaînes. Une superstructure $(\text{Sr}_2\text{Cu}_2\text{O}_3)_7(\text{CuO}_2)_{10}$ est représentée. D'après Gozar et Blumberg [95].

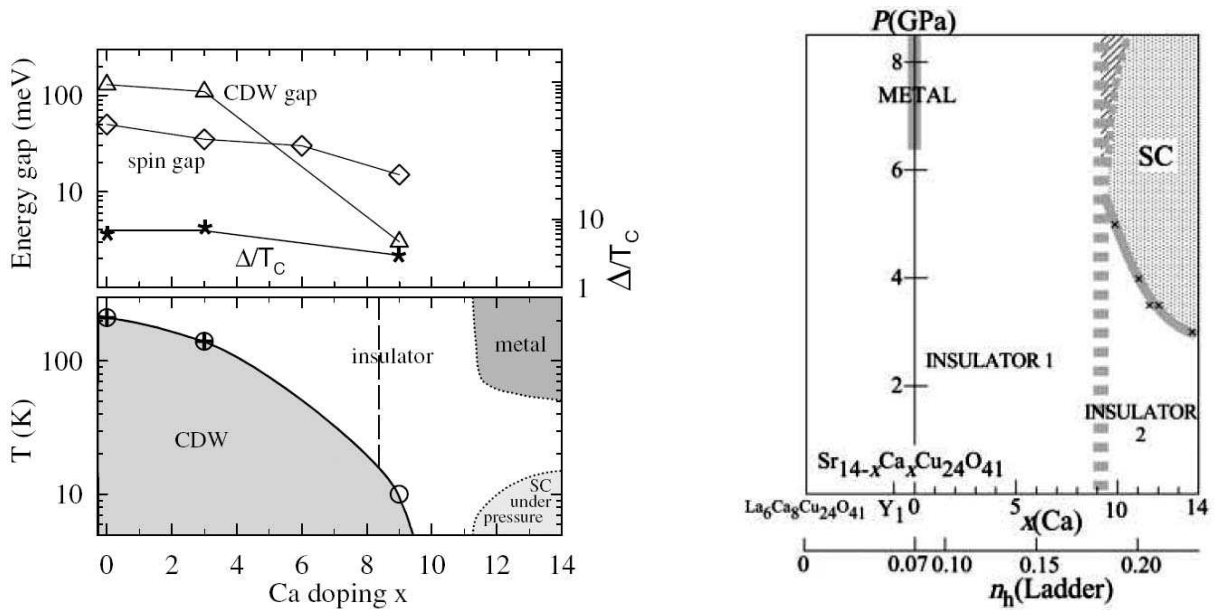


FIG. I.13: Diagrammes de phase expérimentaux proposés pour le composé $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$. À gauche, d'après Vuletić et al. [96] sur la base des réponses diélectrique et optique, à droite d'après Motoyama et al. [97] sur la base de mesures de résistivité. La relation entre la substitution et le dopage, ni même les limites précises et la nature des phases ne font l'objet d'un consensus.

cuprate non bidimensionnel supraconducteur à être découvert. Ce dernier est en fait intrinsèquement dopé même en l'absence de substitution. En effet, il contient des plans avec des chaînes et d'autres avec des échelles (voir figure I.12) et un transfert de charge s'établit entre ces deux sous-systèmes. La structure cristallographique met en évidence une incommensurabilité des paramètres de maille selon les chaînes et selon les échelles mais avec la relation approchée $10c_{\text{chaîne}} \simeq 7c_{\text{échelle}}$ qui se voit en réécrivant la composition chimique sous la forme $(\text{Sr}_2\text{Cu}_2\text{O}_3)_7(\text{CuO}_2)_{10}$. Cela a pour conséquence une certaine distortion des liaisons dans les deux sous-systèmes dont le désordre est un corollaire [68]. Il est important de préciser que la supraconductivité de ce composé n'apparaît que sous forte pression (3-8 GPa) et pour une concentration en Ca très importante $x \sim 10-14$. Un diagramme de phase issu des mesures de transport met en évidence une compétition entre phases isolantes, métalliques et supraconductrices en fonction de la pression et de la substitution. Nous allons maintenant préciser le comportement du composé en l'absence de pression puis sous forte pression pour étudier la phase supraconductrice.

3.2.1 Expériences à pression ambiante

Un premier point à discuter est le dopage effectif du sous-système des échelles dans ce composé. Ce dernier dépend de la substitution x , de la pression et dans une certaine mesure également de la température rendant son évaluation intimement liée aux conditions expérimentales. Il y a un transfert de charge entre les chaînes et les échelles qui induit un dopage intrinsèque en l'absence de Calcium. L'étude de la conductivité optique permet d'évaluer la densité de trous dans le système. Osafune *et al.* [99] ont ainsi mis en évidence le transfert des trous vers les échelles à mesure que x augmente. En assimilant le mode de basse énergie observé au mode de charge des échelles, ils évaluent à $\delta = 0.22$ le dopage pour $x = 11$ par intégration du poids spectral. L'étude par RMN de Magishi *et al.* [100] permet d'accéder à la longueur de corrélation spin-spin. En supposant qu'elle est directement contrôlée par le dopage en trou, ils évaluent $\delta = 0.25$ pour $x = 11$. Par des mesures d'absorption de rayons X polarisés, Nücker *et al.* [101] proposent une valeur plus faible du dopage des échelles $\delta = 0.11$ pour $x = 12$. On voit donc qu'il n'est pas évident de déterminer le dopage effectif en trous des échelles par des mesures expérimentales indirectes d'autant que les conditions expérimentales de température et de pression peuvent varier suivant les méthodes. Cependant une fenêtre de dopage $\delta \simeq 0.05 - 0.3$ semble raisonnable.

L'étude des propriétés magnétiques par RMN [100, 102, 103] et INS [104, 105] montre un gap de spin assez élevé dans ces échelles, de l'ordre de 300-600 K suivant les expériences. Quant aux courbes d'aimantation en dessous de 300 K, elles sondent alors essentiellement la susceptibilité magnétique des chaînes dopées. Les résultats sont en bon accord avec une image de trous localisés et de dimères sur les chaînes, une fois substituée la contribution des spins libres [106, 107]. Les chaînes ont ainsi un gap de spin de l'ordre de 11 meV. Notons qu'un état de Néel pour les composés avec $x > 11$ est trouvé à très basse température (de l'ordre de 5 K) en l'absence de pression [108].

L'étude de la résistivité révèle un comportement avec gap de charge de type semi-conducteur à basse température et plutôt métallique à haute température. Le gap de charge diminue avec le dopage de 0.2 eV pour $x = 0$ à 0.023 eV pour $x = 10$. Plusieurs expériences mettent en évidence l'apparition d'un ordre de charge en dessous d'une température T^* qui

se manifeste sur la mobilité des trous. T^* décroît avec x pour s'annuler vers $x \simeq 6$.

Des mesures de spectroscopies diélectrique et optique (Raman) ont mis en évidence dans ce composé l'existence d'onde de densité de charge [95, 96, 109–112]. La persistance des signatures de ces ondes de densité de charge jusqu'à des températures de l'ordre de 600 K dans $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ fait dire à Blumberg *et al.* [95] que leur origine n'est pas phononique mais magnétique puisque $J \sim 1000$ K. Ils proposent donc des scénarios faisant intervenir l'existence de paires de trous préformées et une compétition entre onde de densité de charge et phase supraconductrice. Pourtant, Vuletić *et al.* [96] proposent une destruction des ondes de densité de charge avec la substitution en calcium (cf figure I.13), en désaccord avec l'interprétation de Blumberg *et al.* Notons pour terminer qu'il a été proposé les valeurs de 3 et 5 pas de réseau pour la périodicité de ces ondes de densité de charge [113, 114].

3.2.2 Expériences dans la phase supraconductrice

Un point intéressant est que la remontée de la résistivité au voisinage de la température critique, même sous forte pression, semble indiquer qu'il s'agit d'une transition isolant-supraconducteur (voir figure I.16). La T_c maximale de 14 K est obtenue pour 5 GPa et $x = 13.6$ et, bien que plus faible que celles des supraconducteurs à haute température critique, elle est néanmoins assez élevée. Des mesures de rayons X [118] montrent que la pression ne change pas la structure du composé mais favorise la redistribution des trous depuis les chaînes vers les échelles en rapprochant les deux sous-systèmes. La pression peut être donc qualitativement interprétée comme augmentant les porteurs de charge dans le système c'est-à-dire le dopage en trous.

L'existence ou non d'un gap de spin est cruciale par rapport aux prédictions théoriques d'un mécanisme de type RVB. En effet, l'énergie d'appariement est contrôlée par le gap de spin. La méthode de choix pour sonder la dynamique de spin dans ces composés est la RMN. Mayaffre *et al.* [119] ont proposé une disparition du gap de spin dans la phase supraconductrice mais avec peu de mesure en dessous de la température critique. Des mesures de RMN plus récentes semblent confirmer cette approche [120–122]. En revanche, Fujiwara *et al.* [116] trouvent un comportement avec un gap de spin de l'ordre de 200 K pour $x = 12$ (voir figure I.14) et interprètent leurs données par l'appariement des holons et des spinons sur un barreau. Leurs mesures s'effectuent pour un champ magnétique proche de la limite de Pauli ce qui leur permet de suggérer un dépassement de la limite de Pauli et de proposer de la supraconductivité triplet [115]. Les mesures de décalage de Knight permettent de mesurer l'évolution du gap de spin avec la substitution sous pression. Le gap de spin semble donc diminuer avec le dopage en trou et l'augmentation du couplage inter-échelles jusqu'à des valeurs d'une centaine de Kelvin (voir figure I.15). Les mesures des effets quadrupolaires de RMN ont récemment permis d'évaluer le dopage en trou sous pression dans la phase supraconductrice avec comme proposition $\delta = 0.1$ pour $x = 12$ sous 32 kBar [123].

La résistivité transverse dans le plan des échelles diminue avec la pression et se rapproche de celle le long des échelles. Cela a conduit Nagata *et al.* [125] à associer la transition supraconductrice à une transition dimensionnelle. La supraconductivité pourrait alors être due à ce passage à un caractère bidimensionnel du liquide électronique, la rapprochant de la situation connue pour les cuprates. Cette analogie est d'ailleurs complétée par d'autres observations sur les propriétés de transport [83] et par la présence non négligeable de désordre

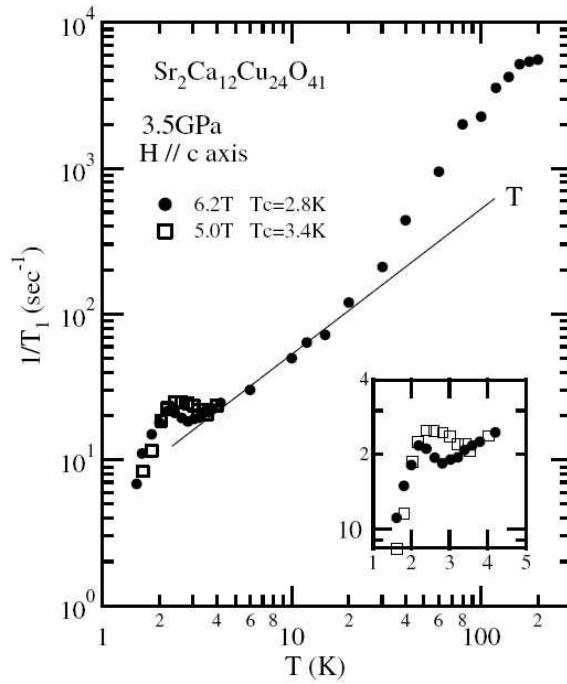


FIG. I.14: Mesure du temps de relaxation longitudinale RMN montrant un pic de cohérence à la transition supraconductrice ainsi qu'un comportement linéaire en température avant la transition. D'après Fujiwara et al. [115, 116].

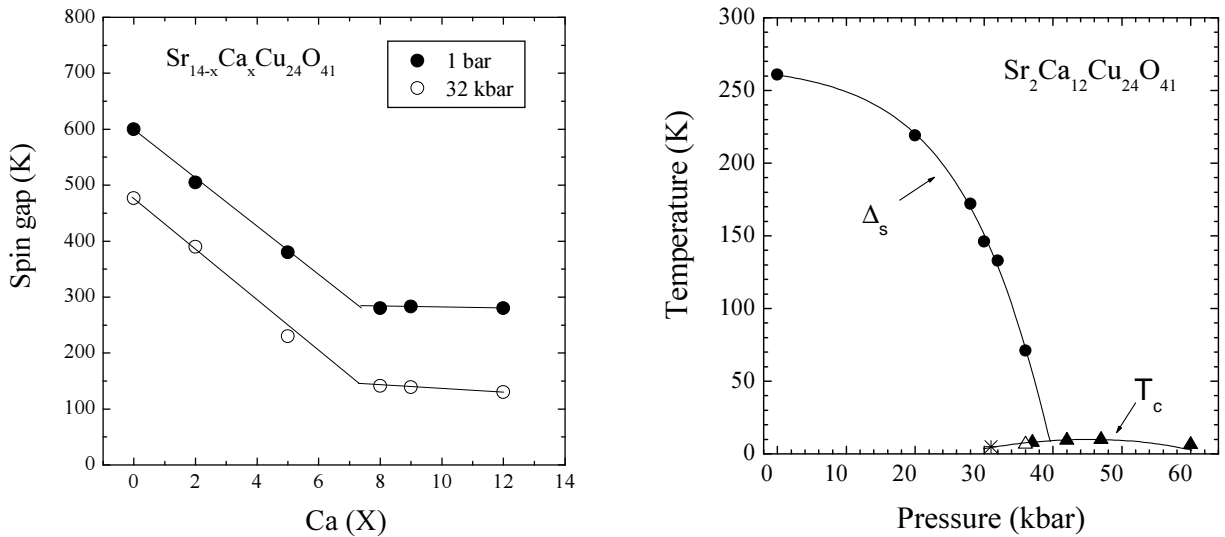


FIG. I.15: À gauche, évolution du gap de spin avec la substitution d'après les mesures de décalage de Knight. À droite, évolution du gap de spin avec la pression et dôme supraconducteur (1 GPa = 10 kbar). D'après Jérôme et al. [117].

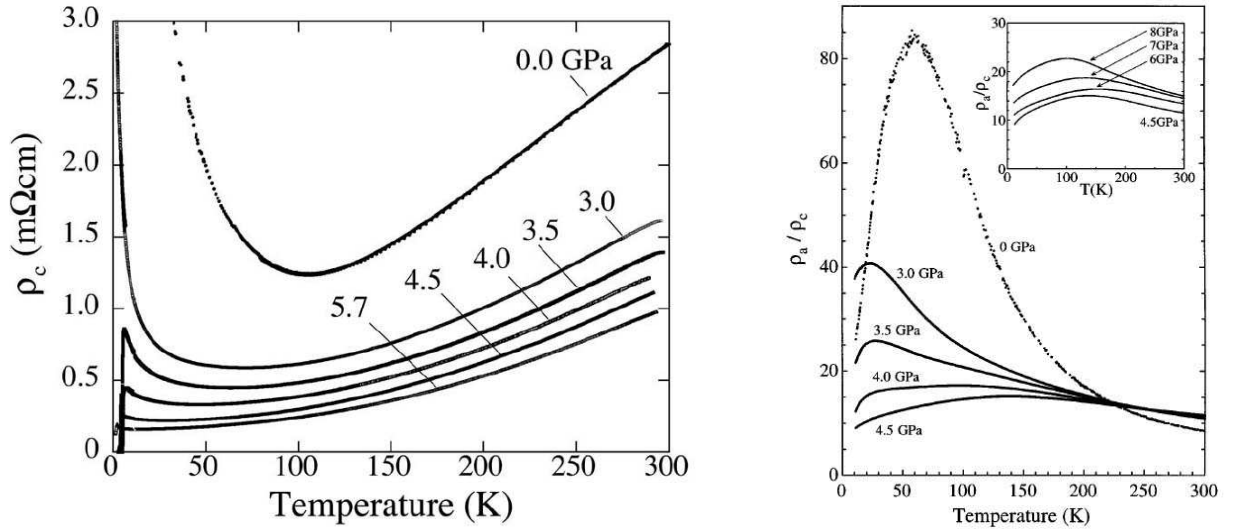


FIG. I.16: À gauche, résistivité de $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ sous pression montrant une transition d'un isolant vers un supraconducteur. D'après Nakanishi et al. [124]. À droite, rapport de la résistivité perpendiculaire aux échelles ρ_a et de la résistivité le long des échelles ρ_c suggérant un crossover vers un état bidimensionnel à l'approche de la transition supraconductrice. D'après Nagata et al. [125].

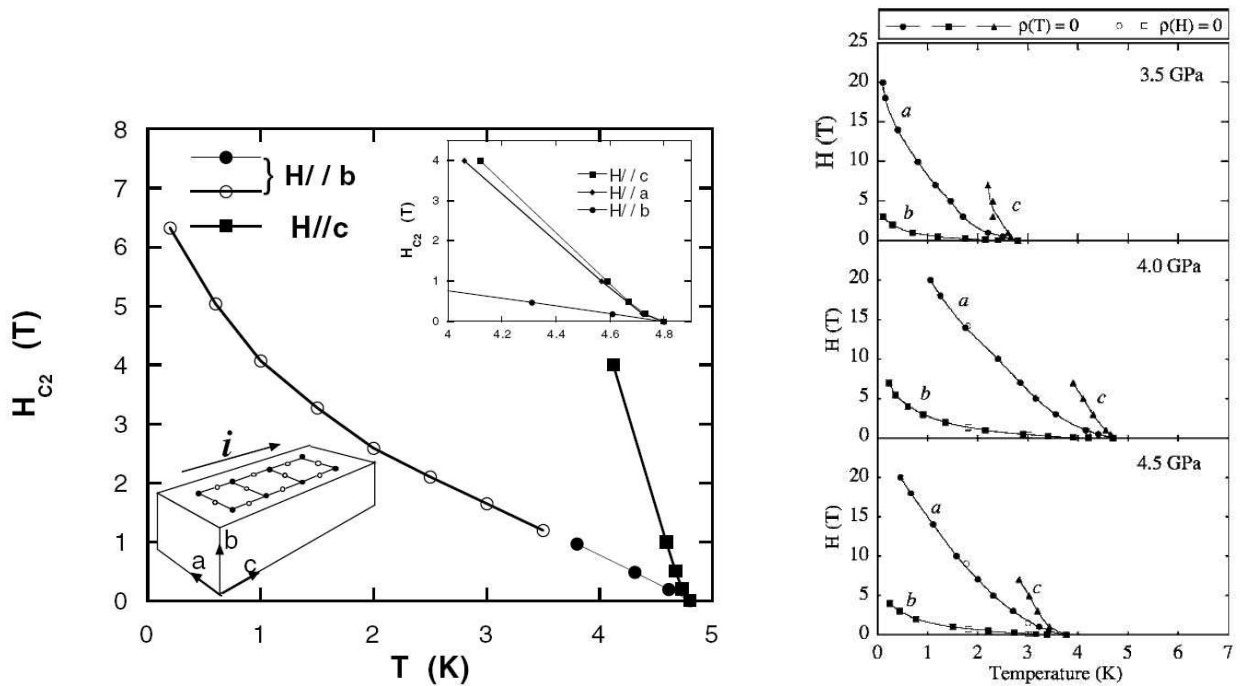


FIG. I.17: Champs supraconducteurs critiques de $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ sous pression d'après les mesures de transport montrant un probable dépassement de la limite de Pauli. À gauche, d'après Braithwaite et al. [126]. À droite, d'après Nakanishi et al. [124].

qui sera moins contraignante à deux dimensions. Pourtant, la structure cristallographique restant inchangée et le rapport des résistivités de l'ordre de 20 au plus bas, la supraconductivité semble demeurer fortement anisotrope. On peut ajouter qu'en vertu du théorème de Mermin-Wagner, l'ordre supraconducteur ne peut s'établir qu'à deux dimensions et il faut un couplage Josephson suffisamment grand pour obtenir une cohérence de phase entre les sous-systèmes échelles. Il n'est donc pas très surprenant de voir la conductivité transverse augmenter en même temps que s'établit la supraconductivité. Il est important de préciser que dans cette hypothèse la température critique n'est pas directement contrôlée par le gap de spin mais par le couplage Josephson entre échelles (voir chapitre II). C'est la raison pour laquelle les températures critiques observées (de l'ordre de 10 K) sont bien plus petite que le gap de spin (de l'ordre de 100 K). On a ainsi deux scénarios possibles, soit les paires se forment au sein des échelles et condensent dans un liquide bidimensionnel mais gardant un caractère fortement anisotrope, soit la supraconductivité provient d'une transition dimensionnelle dans laquelle la physique se rapproche des celles des cuprates, bien qu'anisotrope. Dans ce dernier cas, le mécanisme et la nature du paramètre d'ordre sont plus spéculatifs du point de vue théorique en raison de la difficulté d'étudier les modèles à 2D.

Dans la perspective de sonder expérimentalement la nature du paramètre d'ordre supraconducteur, les expériences sous champ magnétique sont particulièrement enrichissantes comme on a pu le constater dans les supraconducteurs organiques. Braithwaite *et al.* ont mesuré le champ critique de $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ sous pression par des mesures de transport [126] (voir figure I.17). Malgré la faiblesse de la température critique, la supraconductivité survit aux champs forts. Comme on s'y attend, le champ critique perpendiculaire au plan des échelles et dans le plan des échelles sont très différents. Les expériences de Nakanishi *et al.* rapportent des résultats similaires [124], avec en particulier une forte anisotropie du champ critique dans les trois directions laissant supposer un état supraconducteur très anisotrope dans le plan. Là encore, un champ de 20 T n'est pas suffisant pour détruire la supraconductivité ce qui amène à penser que la limite de Pauli est dépassée dans ce système. Enfin, la courbure de la fonction $H_c(T)$ est anormale : pour un supraconducteur de type BCS, la courbure est négative avec un champ linéaire au voisinage de T_c et quadratique vers $T = 0$. Ici, la courbure est positive. Nakanishi *et al.* proposent une supraconductivité triplet pour expliquer une telle divergence à basse température du champ critique [124].

3.2.3 Vers de nouveaux composés supraconducteurs ?

De nouveaux composés apparentés aux échelles de spins ont récemment été découverts. Un premier exemple est celui de $\beta\text{-Na}_x\text{V}_2\text{O}_5$ dont le diagramme de phase [127] pour $x = 0.33$ est tracé sur la figure I.18. Une transition métal-isolant associée à un ordre de charge a lieu pour des températures d'environ 20-100 K. Une phase supraconductrice sous forte pression avec une température critique de 10 K apparaît sous le dôme de l'isolant antiferromagnétique. Cependant, le remplissage effectif en électrons des échelles dont le réseau est celui des ions Vanadium est alors 1/6 pour cette concentration en ion Sodium. Le mécanisme RVB ne peut donc pas être pertinent pour décrire la supraconductivité de ce système. Enfin, la structure cristallographique présente des sous-systèmes de chaîne, de chaînes zig-zag et d'échelles. Malgré une structure cristallographique différente de celle de $\alpha\text{-NaV}_2\text{O}_5$ qui est un composé à échelle de spins et ordonné en charge, Doublet et Lepetit ont suggéré que les interactions

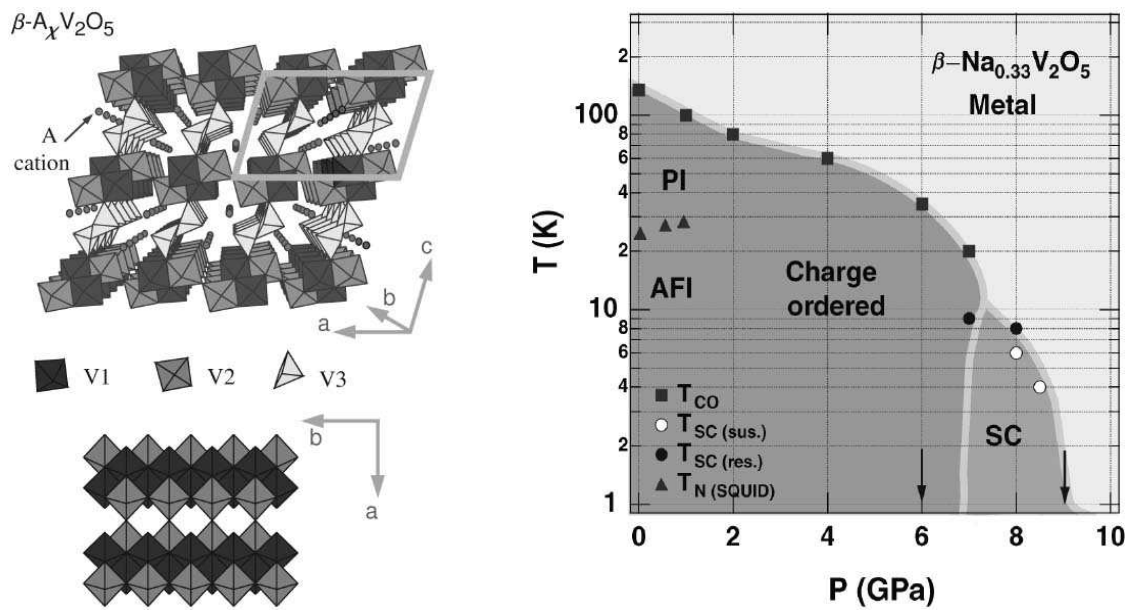


FIG. I.18: Structure de $\beta\text{-Na}_x\text{V}_2\text{O}_5$ et diagramme de phase montrant la nucléation d'une phase supraconductrice sous haute pression à l'intérieur d'un isolant antiferromagnétique. D'après Yamauchi et al. [127].

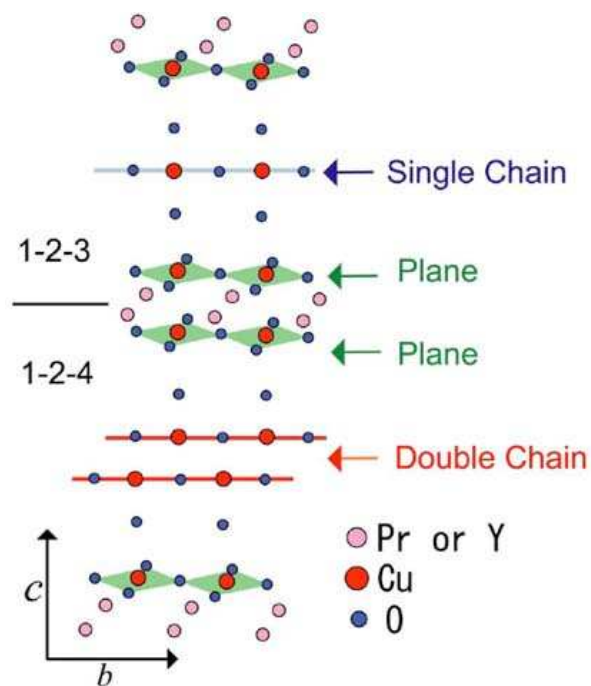


FIG. I.19: Structure du composé supraconducteur avec double chaîne $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$. D'après Sasaki et al. [128].

électroniques soient en réalité assez proches de ce dernier, avec un rôle important pour les échelles à deux montants [129].

Issu de la famille des cuprates à haute température critique YBaCuO, le cristal $\text{Pr}_2\text{Ba}_4\text{Cu}_7\text{O}_{15-\delta}$ présente de la supraconductivité [130] à pression ambiante avec une T_c d'environ 10 K. Il comporte des plans CuO, des chaînes simples et des double-chaînes couplées en zig-zag (voir figure I.19). Une des questions est de savoir si la supraconductivité pourrait se situer au niveau des double-chaînes.

4 Conclusion partielle

Les expériences sur les échelles de spins mettent en évidence des comportements riches en fonction des conditions expérimentales (température, pression, substitution en Ca) avec la présence d'un gap de spin, d'onde de densité de charge et de supraconductivité non conventionnelle. La structure et les propriétés du composé supraconducteur $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ en font un cousin des conducteurs organiques ainsi que des cuprates. Il permet ainsi une approche complémentaire des questions plus générales sur les systèmes fortement corrélés tant du point de vue expérimental que théorique. Cependant, la plupart des questions importantes comme le dopage effectif en trous, l'existence d'un gap de spin, la dimensionnalité, l'effet du désordre et la symétrie de l'appariement dans la phase supraconductrice ne font pas l'objet d'un consensus, en raison de la complexité du système et du défi technique que sont les expériences sous forte pression. La perspective de nouveaux composés à échelles de spins, notamment supraconducteur à pression ambiante, pourrait permettre d'aborder cette problématique sous un nouvel angle.

Chapitre II

Notions sur la physique des systèmes quantiques unidimensionnels

1 Vers un hamiltonien effectif : la bosonisation

Nous abordons dans cette partie la méthode de bosonisation qui permet une description générale de particules en interaction confinées sur un réseau unidimensionnel ou quasi-unidimensionnel. Dans la première partie, on présente la description de basse énergie conduisant à un hamiltonien effectif. Cela introduit à la notion de liquide Luttinger qui est le pendant du liquide de Fermi à une dimension et dont on verra les spécificités. On présente ensuite les instabilités de ce liquide de Luttinger en mettant en évidence le rôle des commensurabilités. Enfin, on rapporte les résultats de cette méthode aux cas des chaînes de fermions couplées, c'est-à-dire les échelles. Ce chapitre introduit des notions et des résultats essentiels, régulièrement utilisés par la suite. Les formules de bosonisations pouvant utiliser des conventions différentes suivant les auteurs, il est utile de préciser que l'on a choisi celles du livre de Giamarchi [6] si bien que certains résultats peuvent prendre une forme différente de celle des articles originaux. Cette présentation est très largement inspirée de certaines des nombreuses références sur le sujet [6, 131–133] à commencer par le livre de Giamarchi ; l'objectif étant de donner un support indispensable aux discussions des chapitres suivant.

1.1 Le Liquide de Luttinger

1.1.1 Introduction des champs $\phi(x)$ et $\theta(x)$

En suivant l'approche générale et phénoménologique proposée par Haldane [6, 131, 134], on relie l'opérateur de création d'une particule $\psi^\dagger(x)$ aux fluctuations de densité dans la limite d'une description continue. Écrivons en effet cet opérateur sous la forme

$$\psi^\dagger(x) = \sqrt{\rho(x)} e^{-i\theta(x)} \quad (\text{II.1})$$

où l'on a introduit les opérateurs de phase $\theta(x)$ et de densité locale $\rho(x)$. Parce qu'on est à une dimension, $\rho(x)$ peut être paramétrée de façon univoque par une fonction continue et croissante $\varphi(x)$ telle que $\varphi(x_i) = 2\pi n$ avec n entier si la i^{e} particule se trouve en x_i . Cette fonction est donc une mesure directe du nombre de particules à gauche de x . Autrement dit, il s'agit d'une description en termes de solitons dans laquelle la fonction $\varphi(x)$ a un « kink »

de 2π au passage de chaque particule. On en déduit¹

$$\rho(x) = \sum_i \delta(x - x_i) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \nabla \varphi(x) \delta(\varphi(x) - 2\pi n) = \nabla \varphi(x) \frac{1}{2\pi} \sum_{m \in \mathbb{Z}} e^{im\varphi(x)}. \quad (\text{II.2})$$

Si la densité moyenne de particules est $\rho_0 = 1/a$ (a étant la distance typique entre particules), le champ ϕ défini par $2\phi(x) = 2\pi\rho_0 x - \varphi(x)$ caractérisera les fluctuations autour de la position « d'équilibre » $\varphi(x) = 2\pi\rho_0 x$. On obtient alors la décomposition de Fourier de l'opérateur densité suivante

$$\rho(x) = \left[\rho_0 - \frac{1}{\pi} \nabla \phi(x) \right] \sum_m e^{i2m(\rho_0 \pi x - \phi(x))}, \quad (\text{II.3})$$

dans laquelle $-\frac{1}{\pi} \nabla \phi(x)$ correspond aux fluctuations de densité de grandes longueur d'onde tandis que les harmoniques m correspondent à des fluctuations aux distances de l'ordre de a . Revenons à l'opérateur de création d'une particule $\psi^\dagger(x)$. Il faut maintenant préciser la nature des particules que l'on décrit. On ne considère pour l'instant que le cas de particules sans degré de liberté interne. Le cas des électrons sera discuté plus tard. Suivant qu'on a des bosons (qui commutent) ou des fermions (qui anti-commutent), on trouve [134] des expressions assez similaires en fonction des deux champs $\phi(x)$ et $\theta(x)$:

$$\psi_B^\dagger(x) = \left[\rho_0 - \frac{1}{\pi} \nabla \phi(x) \right]^{1/2} \sum_m e^{i2m(\rho_0 \pi x - \phi(x))} e^{-i\theta(x)} \quad (\text{II.4})$$

$$\psi_F^\dagger(x) = \left[\rho_0 - \frac{1}{\pi} \nabla \phi(x) \right]^{1/2} \sum_m e^{i(2m+1)(\rho_0 \pi x - \phi(x))} e^{-i\theta(x)} \quad (\text{II.5})$$

avec comme relations de commutation pour les champs,

$$[\theta(x'), \nabla \phi(x)] = i\pi \delta(x - x') \quad (\text{II.6})$$

$$[\phi(x'), \nabla \theta(x)] = i\pi \delta(x - x') \quad (\text{II.7})$$

$$[\phi(x), \theta(x')] = i\frac{\pi}{2} \text{Sign}(x - x'). \quad (\text{II.8})$$

La seule différence entre bosons et fermions est le facteur $e^{i\phi(x)}$ supplémentaire pour les fermions qui permet d'obtenir un signe moins entre $\psi^\dagger(x')\psi^\dagger(x)$ et $\psi^\dagger(x)\psi^\dagger(x')$ puisque le champ ϕ prend un « kink » de π au passage d'une particule. En revanche, l'opérateur densité et les relations de commutation des champs θ et ϕ sont les mêmes quelque soit la statistique des particules. La nature des particules se manifestera dans les fonctions de corrélations comme on le verra. $\frac{1}{\pi} \nabla \phi(x)$ et $\theta(x)$ sont donc des champs conjugués, de même que $\frac{1}{\pi} \nabla \theta(x)$ et $\phi(x)$. On introduit d'ailleurs souvent le champ conjugué de $\phi(x)$ avec la notation

$$\Pi(x) = \frac{1}{\pi} \nabla \theta(x). \quad (\text{II.9})$$

¹d'après les relations sur les distributions et la formule de sommation de Poisson

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(n) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int dz e^{i2\pi mz} f(z).$$

On peut préciser ici quelques propriétés topologiques de ces champs lorsque les N particules sont confinées sur une chaîne L avec conditions aux bords périodiques. Comme on doit avoir N particules entre x et $x+L$, on a immédiatement $\phi(x+L) = \phi(x) + \pi N$. La périodicité de la fonction d'onde $\psi(x+L) = \psi(x)$ donnera pour des bosons $\theta(x+L) = \theta(x) + \pi J$ (avec J un entier pair) et pour des fermions $\theta(x+L) = \theta(x) + \pi(J+N)$ (avec $N+J$ pair cette fois). Le nombre quantique N est simplement le nombre de particules tandis que J est lui relié à la quantification de l'impulsion totale autour de l'anneau et à la possibilité d'avoir des courants permanents [131].

1.1.2 Hamiltonien

Pour décrire la dynamique du système dans la limite continue, on cherche l'hamiltonien effectif le plus simple en fonction des champs $\theta(x)$ et $\phi(x)$ et de leur dérivées aux ordres les plus bas autorisés par les symétries. La symétrie la plus générale à considérer est de dire que le système est invariant si $x \rightarrow -x$, i.e. on se place dans le référentiel où il est au repos. L'invariance du premier terme de la densité entraîne notamment $\nabla\phi(x) = \nabla\phi(-x)$ et donc $\phi(x) = -\phi(-x)$. La densité de courant local de particules $j(x) = i[\psi^\dagger(x)\nabla\psi(x) - \nabla\psi^\dagger(x)\psi(x)]$ donne à l'ordre le plus bas $j(x) \sim \nabla\theta(x)$. Ce courant vérifiant $j(x) = -j(-x)$, on en déduit² $\nabla\theta(x) = -\nabla\theta(-x)$. En regardant les décompositions des opérateurs de création et d'annihilation (II.4) et (II.5), on voit qu'on peut s'attendre à la fois à des termes du type polynôme en $\nabla\phi(x)$ et $\nabla\theta(x)$ (mais pas en $\phi(x)$ et $\theta(x)$) ainsi que des termes du type $\cos(a\phi(x))$, $\cos(a\theta(x))$, etc... On oublie ces derniers pour l'instant, ils seront discutés plus en détails dans la section 1.3. D'après l'argument ci-dessus, les termes en $\nabla\theta$ et $\nabla\theta\nabla\phi$ ne sont pas autorisés par symétrie. Pour $\theta(x)$, le terme le plus bas est donc $(\nabla\theta(x))^2 = (\pi\Pi(x))^2$ avec (II.9). Ce terme a en fait une interprétation physique très simple : en première approximation un boson s'écrit $\psi^\dagger(x) \simeq \rho_0^{1/2} e^{-i\theta(x)}$ et un terme cinétique $\int dx \nabla\psi^\dagger \nabla\psi$ donne une contribution de ce type. Les fermions contiendront également ce terme. Pour le champ $\phi(x)$, un terme en $\nabla\phi$, comme par exemple le terme de potentiel chimique $-\mu \int dx \rho(x)$, se couple à la densité et peut être réabsorbé dans la définition du champ ϕ donc on l'oubliera ici. Reste les termes en $(\nabla\phi(x))^2$ qui ont une origine intuitive : ils proviennent d'une interaction locale de type densité-densité $\int dx \rho(x)^2$. Ainsi, l'hamiltonien générique qui contient les termes élémentaires d'énergie cinétique et d'énergie d'interaction, prend la forme d'un hamiltonien quadratique

$$\mathcal{H} = \int \frac{dx}{2\pi} \left[uK(\pi\Pi(x))^2 + \frac{u}{K}(\nabla\phi(x))^2 \right]. \quad (\text{II.10})$$

Cet hamiltonien *effectif*, puisque indépendant d'une description microscopique, est *paramétré* par le jeu de constantes (u, K) appelées paramètres de Luttinger. Le paramètre u a la dimension d'une vitesse et K est sans dimension. Pour des fermions libres, $u = v_F$ la vitesse de Fermi et $K = 1$. Pour des bosons libres, u est la vitesse du son et $K = \infty$, signifiant simplement que le terme $(\nabla\phi)^2$ est absent. En revanche, pour des bosons de cœur dur dont on ne peut en avoir deux au même site, on aura $K = 1$: le terme $(\nabla\phi)^2$ assurant alors cette contrainte similaire au principe de Pauli. On verra comment déterminer ces paramètres

²Pour les bosons, l'invariance de la fonction d'onde implique plus directement $\theta(x) = \theta(-x)$ puis $\nabla\theta(x) = -\nabla\theta(-x)$.

de façon spécifique par la suite. À l'instar de la théorie du liquide de Fermi, la théorie du liquide de Luttinger repose donc sur des hypothèses très générale et permet des prédictions simples entièrement paramétrées par deux constantes. Le paradigme du liquide de Luttinger proposé par Haldane [134] est que tout système unidimensionnel ayant un mode avec une relation de dispersion linéaire à basse énergie sera décrit de manière effective par l'hamiltonien (II.10). Tout comme pour le liquide de Fermi, des interactions fortes peuvent entraîner des instabilités vers d'autres phases : ces cas seront abordés à la section 1.3.

1.1.3 Propriétés physiques et détermination des paramètres de Luttinger u et K .

Avec un hamiltonien quadratique tel que (II.10), de nombreux résultats analytiques sont à disposition. Si l'on souhaite calculer des valeurs moyennes d'observables (paramètres d'ordre, corrélations), on pourra utiliser les résultats

$$\langle [\phi(r) - \phi(0)]^2 \rangle = KF_1(r) \quad (\text{II.11})$$

$$\langle [\theta(r) - \theta(0)]^2 \rangle = \frac{1}{K}F_1(r) \quad (\text{II.12})$$

$$\langle \phi(r)\theta(0) \rangle = \frac{1}{2}F_2(r) \quad (\text{II.13})$$

avec $r = (x, u\tau)$ et τ le temps imaginaire. Les fonctions

$$F_1(r) = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{x^2 + (u|\tau| + \alpha)^2}{\alpha^2} \right] \quad (\text{II.14})$$

$$F_2(r) = -i \text{Arg}[u\tau + \alpha \text{Sign}(\tau) + ix], \quad (\text{II.15})$$

comportent un paramètre de coupure (cutoff) α qui est typiquement la distance a . Cela entraîne notamment pour des conditions aux bords périodiques

$$\langle \prod_j e^{i[a_j\phi(r_j) + b_j\theta(r_j)]} \rangle = e^{-\frac{1}{2}(\sum_j a_j\phi(r_j) + b_j\theta(r_j))^2} \quad (\text{II.16})$$

$$= e^{-\frac{1}{2}\sum_{j < k} [-a_j a_k K - \frac{b_j b_k}{K}] F_1(r_j - r_k) + [a_j b_k + b_j a_k] F_2(r_j - r_k)} \quad (\text{II.17})$$

avec $\sum_j a_j = 0$ et $\sum_j b_j = 0$ pour avoir une contribution non nulle. À temps égaux et pour $x \gg \alpha$, on a $F_1(x) \sim \ln(x/\alpha)$ de sorte que, de manière générique, les corrélations statiques suivront des lois algébriques dont les exposants ne seront paramétrés que par K . Dans cette limite, il est plus simple de retenir le résultat suivant

$$\langle A_{m,n}(x) A_{-m,-n}(0) \rangle \propto \left[\frac{\alpha}{x} \right]^{\frac{1}{2} [m^2 K + \frac{n^2}{K}]}, \quad (\text{II.18})$$

en omettant le facteur de phase, et en notant

$$A_{m,n}(x, \tau) = e^{im\theta(x,\tau)} e^{in\phi(x,\tau)}. \quad (\text{II.19})$$

Prenons un exemple simple pour appliquer ce résultat en calculant la fonction de Green à temps égaux de fermions en approximant (II.5) par $\psi_F^\dagger(x) \sim e^{ik_F x} e^{-i(\phi(x) - \theta(x))}$ (avec $k_F = \rho_0 \pi$ le vecteur d'onde de Fermi) :

$$\langle \psi_F(x) \psi_F^\dagger(0) \rangle \sim e^{ik_F x} \langle e^{i(\phi(x) - \theta(x))} e^{-i(\phi(0) - \theta(0))} \rangle + \dots \quad (\text{II.20})$$

$$\sim e^{ik_F x} \left(\frac{\alpha}{x} \right)^{\frac{K+K^{-1}}{2}} \quad (\text{II.21})$$

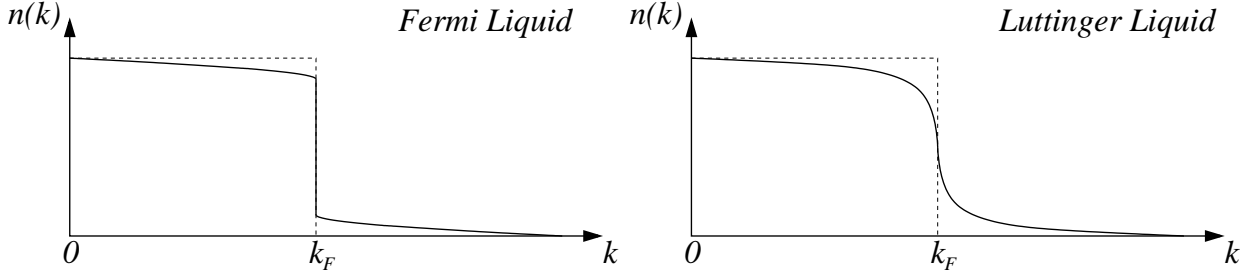


FIG. II.1: Facteur d'occupation des états $n(k)$ à température nulle dans les liquides de Fermi et de Luttinger : à la différence de liquide Fermi, celui de Luttinger n'a pas de discontinuité au niveau de Fermi mais une singularité.

Ainsi, on peut en déduire le facteur d'occupation $n(k) = \int dx e^{-ikx} \langle \psi_F(x) \psi_F^\dagger(0) \rangle$ de l'état k en prenant la transformée de Fourier. Celui-ci présente une singularité au niveau de Fermi de la forme

$$n(k) - n(k_F) \propto \text{Sign}(k_F - k) |k_F - k|^{\frac{K+K^{-1}}{2} - 1}. \quad (\text{II.22})$$

Pour des fermions libres, on aurait une discontinuité au niveau de Fermi donc dans ce cas $K = 1$. En présence d'interactions, cette discontinuité se transforme en singularité (voir figure II.1). L'effet des interactions à une dimension est donc beaucoup plus important que dans un liquide de Fermi pour lequel la discontinuité survit aux interactions. Notons que le calcul pour des bosons avec le même hamiltonien effectif donne un résultat différent,

$$\langle \psi_B(x) \psi_B^\dagger(0) \rangle \sim \langle e^{-i\theta(x)} e^{i\theta(0)} \rangle \sim \left(\frac{\alpha}{x} \right)^{\frac{1}{2K}}. \quad (\text{II.23})$$

Les corrélations ne font donc intervenir que le paramètre K . Un moyen d'accéder à la vitesse u est de perturber le système. Par exemple, en ajoutant des particules au système, on va sonder sa compressibilité

$$\kappa = \frac{\partial \rho}{\partial \mu}. \quad (\text{II.24})$$

Le potentiel chimique μ se couple au système par un terme $-\mu \int dx \rho(x)$. La perturbation de la densité $\delta \rho$ induite par ce terme sera $\delta \rho = -\frac{1}{\pi} \nabla \phi$ d'après (II.3), soit un terme $\frac{\mu}{\pi} \int dx \nabla \phi$ dans l'hamiltonien. La transformation $\phi \rightarrow \phi + \mu \frac{K}{u} x$ permet de retrouver l'hamiltonien quadratique. On a donc perturbé la densité de $\langle \delta \rho \rangle = -\frac{1}{\pi} \langle \nabla \phi \rangle = \mu \frac{K}{u\pi}$ si bien que la compressibilité vaut

$$\kappa = \frac{K}{u\pi} = \frac{v_F}{u} K \kappa_0. \quad (\text{II.25})$$

La dernière relation compare la compressibilité obtenue avec celle du système libre κ_0 . Tout comme dans la théorie du liquide de Fermi, certaines observables sont simplement renormalisées par les interactions et ce, au travers des paramètres de l'hamiltonien effectif.

De façon similaire, le poids de Drude du liquide de Luttinger peut être déterminé en fonction des seuls paramètres de Luttinger. Le poids de Drude est la contribution à fréquence

nulle de la conductivité optique. Il est aussi égal à la raideur de charge du système. Cette dernière caractérise la réponse du système, pris avec des conditions aux bords périodiques, lorsqu'on introduit un petit flux magnétique à travers l'anneau (voir figure III.1). Ce flux va induire un courant qui lui est proportionnel. Le poids de Drude sera simplement ce coefficient de proportionnalité. Le champ magnétique associé au potentiel vecteur $A(x, t)$ va se coupler au système par un terme du type $-\int dx j(x, t)A(x, t)$. L'équation de continuité pour la charge $\partial_t \rho + \nabla j = 0$ permet de relier le courant au champ ϕ selon $j = \frac{1}{\pi} \partial_t \phi$. En notant que la dynamique du champ ϕ est couplée à son opérateur conjugué en raison de $\partial_t \phi = i [\mathcal{H}, \phi]$, on obtient que le courant est relié à l'opérateur impulsion Π

$$j(x, t) = \frac{uK}{\pi} (\pi \Pi(x, t)) \quad (\text{II.26})$$

Comme pour la compressibilité, le terme $-\int dx uK \Pi(x) A$ (avec A uniforme et constant) peut être réabsorbé par la transformation $\pi \Pi \rightarrow \pi \Pi - A$. La densité de courant diamagnétique est donc $j = -\frac{uK}{\pi} A$ et le poids de Drude $D = -\partial j / \partial A$ vaut donc simplement

$$D = \frac{uK}{\pi}. \quad (\text{II.27})$$

La compressibilité (II.25) et le poids de Drude (II.27) peuvent être calculés numériquement soit à travers les équations de l'ansatz de Bethe pour un système intégrable, soit par des méthodes numériques qui seront présentées dans le chapitre III, section 1.4. On aura donc dans l'énergie du système deux contributions $\frac{1}{2} \kappa N^2$ et $\frac{1}{2} D J^2$ qui sont directement reliées aux nombres quantiques topologiques N et J . Tandis que l'hamiltonien (II.10) décrit les fluctuations, ces termes correspondent à des excitations topologiques [131].

1.1.4 Effets de taille finie et théories conformes

Un des avantages des systèmes quantiques unidimensionnels est la possibilité d'utiliser les résultats des théories conformes [131, 135]. Pour un hamiltonien qui a des corrélations critiques comme (II.10), on appelle dimension de l'opérateur \mathcal{O} l'exposant ν intervenant dans le changement d'échelle $r \rightarrow b^{-1}r$. Le corrélateur

$$\langle \mathcal{O}_1(r') \mathcal{O}_2(r) \rangle = b^{-\nu_1} b^{-\nu_2} \langle \mathcal{O}_1(b^{-1}r') \mathcal{O}_2(b^{-1}r) \rangle \quad (\text{II.28})$$

fait apparaître les dimensions des deux opérateurs \mathcal{O}_1 et \mathcal{O}_2 . Pour une fonction de corrélation ($\mathcal{O}_1 = \mathcal{O}_2$), la dimension de l'opérateur sera simplement la moitié de l'exposant de la décroissance algébrique. Si on considère la variable $z = (x, u\tau)$ comme une variable complexe, on peut utiliser la grande famille des transformations conformes à deux dimensions pour calculer les effets de taille finie. En particulier, un premier résultat intéressant [136] est le comportement des corrections de taille finie à l'énergie par site $e(L)$ d'un système de taille L à température nulle

$$e(L) = e^\infty - \frac{c\pi u}{6L^2} + O\left(\frac{1}{L^2}\right). \quad (\text{II.29})$$

Ces corrections ne font intervenir que la vitesse de Luttinger u et une constante c appelée charge centrale. Elle est reliée qualitativement au nombre de modes bosoniques présents

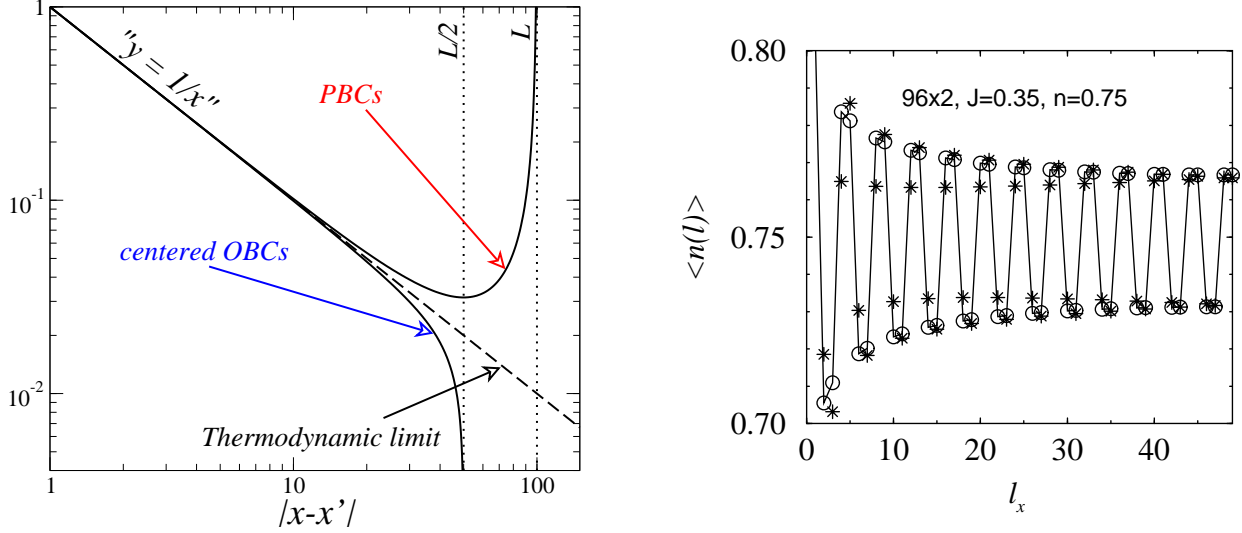


FIG. II.2: À gauche : effets de taille finie prédits par les théories conformes pour un système avec conditions aux bords fermées (PBC) ou ouvertes (OBC) avec, dans ce dernier cas, x' fixé à $L/2$. C'est résultats permettent d'améliorer l'interprétation des données numériques. À droite : oscillations de Friedel de la densité électronique près du bord d'une échelle dopée avec conditions aux bords ouvertes. Les deux types de symboles représentent les données numériques et l'ajustement par les lois de théorie conforme. D'après White et al. [137].

dans la théorie effective de basse énergie. Cette constante vaut $c = 1$ pour l'hamiltonien de Luttinger (II.10) et $c = 2$ pour un liquide de Luttinger avec mode de spin et de charge, mais peut aussi être une fraction rationnelle : on verra un cas avec $c = 3/2$ dans le chapitre IV. C'est un résultat remarquable que ces corrections soient universelles dans la mesure où elles ne dépendent que de u et c .

Grâce aux théories conformes, les fonctions de corrélation vues précédemment dans la limite thermodynamique peuvent également être évaluées à température nulle sur un système de taille finie. En effet, on peut utiliser la transformation qui amène un système infini sur un cylindre de périmètre L est $z' = \exp(2\pi z/L)$ et de hauteur infinie (l'axe du temps imaginaire $u\tau$). Le comportement algébrique discuté jusqu'ici pour $L \rightarrow \infty$ va dépendre des conditions aux limites. Si ces dernières sont périodiques, les corrélations ne dépendent que de la distance relative $x - x'$ et on peut montrer qu'on a alors

$$\langle A_{m,n}(x)A_{-m,-n}(x') \rangle_{\text{pbc}} = c_{nm} \left[\frac{1}{d(x-x'|L)} \right]^{\frac{1}{2} \left[m^2 K + \frac{n^2}{K} \right]}, \quad (\text{II.30})$$

à un facteur de phase près, avec c_{nm} une constante dépendant du modèle. Ce résultat n'est en toute rigueur valable que pour $|x' - x| \gg \alpha$. On a introduit la distance conforme

$$d(x|L) = \frac{L}{\pi} \left| \sin \left(\frac{\pi x}{L} \right) \right|. \quad (\text{II.31})$$

qui tend vers x dans la limite thermodynamique. L'effet du sinus est de renforcer les corrélations lorsque $x' - x = L/2$ par rapport à une pure décroissance algébrique (voir figure II.2).

Les corrélations sont également symétriques par rapport à ce point et sont par conséquent redondantes au-delà. Au contraire, lorsque les conditions aux bords sont ouvertes, les corrélations dépendent à la fois de x et de x' du fait qu'il n'y a plus invariance par translation. Dans ce cas, on montre [131] qu'on n'a plus nécessairement $m' = -m$ mais toujours $n' = -n$, et les corrélations vérifient maintenant

$$\begin{aligned} \langle A_{m,n}(x)A_{m',-n}(x') \rangle_{\text{obc}} &= c_{nmm'} \frac{[d(x+x'|2L)]^{\frac{1}{2}[mm'K-\frac{n^2}{K}]}}{[d(2x|2L)]^{\frac{1}{4}[m^2K-\frac{n^2}{K}]} [d(2x'|2L)]^{\frac{1}{4}[m'^2K-\frac{n^2}{K}]}} \\ &\times \left[\frac{1}{d(x-x'|2L)} \right]^{\frac{1}{2}[mm'K+\frac{n^2}{K}]} . \end{aligned} \quad (\text{II.32})$$

Dans le cas particulier où l'on prend $x' = L/2$, $n = K = 1$ et $m = m' = 0$, on a tracé un exemple de ces effets de taille finie sur la figure II.2 qui montre un décrochement de la fonction de corrélation lorsque x atteint les bords du système. Un peut également prendre x' plus près d'un bord que l'autre ce qui permet d'accéder à des distances $x - x' > L/2$ plus grandes que pour des conditions périodiques. Notez enfin que ces effets vont dépendre des valeurs de K , m et n . D'autre part, un point remarquable de l'utilisation des conditions aux bords ouvertes est que certains opérateurs ne vont plus avoir de valeur moyenne constante. Ainsi, on montre que

$$\langle A_{m,0}(x) \rangle_{\text{obc}} = c_m \left[\frac{1}{d(2x|2L)} \right]^{\frac{m^2K}{4}} . \quad (\text{II.33})$$

On peut appliquer ce résultat à l'opérateur densité de l'équation (II.3) qui va voir ses fluctuations accrochées par les conditions aux bords ouvertes :

$$\langle \rho(x) \rangle_{\text{obc}} = \rho_0 \left\{ 1 + \sum_{m>0} c_{2m} \frac{\cos(2m\pi\rho_0x + \varphi_{2m})}{[d(2x|2L)]^{m^2K}} \right\} , \quad (\text{II.34})$$

avec c_{2m} et φ_{2m} des constantes. Ce résultat sur la densité est indépendant de la statistique des particules. Physiquement, ces oscillations de la densité qui décroissent des bords vers le milieu du système ne sont rien d'autre que des oscillations de Friedel dont un exemple dans les échelles dopées est donné sur la figure II.2. Les harmoniques décroissent d'autant plus vite que m est grand.

De la même manière, à température finie sur un système infini, l'effet de la température sera d'entraîner une périodicité $\beta = 1/T$ le long de l'axe temporel et on pourra utiliser des résultats similaires en faisant la transposition $iL \rightarrow u\beta$. Enfin, dans certains cas, on peut connaître les fonctions d'échelle de certaines observables ce qui permet une extraction des exposants par collapse des données. En revanche, pour les modèles quantiques bidimensionnels, les effets de taille finie ne bénéficient pas de résultats aussi généraux.

1.2 Bosonisation

Nous avons suivi jusqu'ici une approche phénoménologique des liquides de Luttinger qui ne dépend pas d'un modèle microscopique en particulier. En pratique, lorsqu'on veut étudier un modèle microscopique comme le modèle de Hubbard ou de Heisenberg et dériver

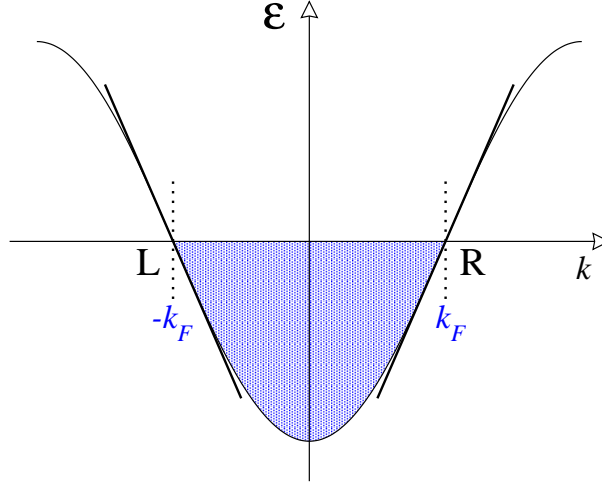


FIG. II.3: *Linéarisation de la relation de dispersion au niveau de Fermi dans la méthode de bosonisation.*

son hamiltonien effectif, il faut trouver un procédure qui relie les opérateurs de création et d'annihilation sur réseau $c_{i\sigma}, c_{i,\sigma}^\dagger$ aux champs $\phi(x)$ et $\theta(x)$ de la description continue. On verra que ce lien se fait par l'utilisation des opérateurs densités équivalents à des bosons. On commence par discuter la bosonisation des fermions sans spin³, ce qui permet de discuter le cas des spin 1/2 avant de parler des fermions avec spins.

1.2.1 Fermions sans spins

On part de l'hamiltonien du système sans interaction à une dimension qui se diagonalise par transformée de Fourier pour donner une relation de dispersion $\mathcal{E}(k) = -2t \cos k$ (voir figure II.3). Si le potentiel chimique se trouve vers le milieu de la bande, il est raisonnable de linéariser la dispersion autour des deux points de Fermi $k_F, -k_F$ ce qui donne pour l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = \sum_{k,r=R,L} v_F(\epsilon_r k - k_F) c_{r,k}^\dagger c_{r,k} \quad (\text{II.35})$$

avec la vitesse de Fermi $v_F = 2t \sin k_F$ et $k_F = \pi n$. On a introduit les fermions qui se propagent avec une impulsion k appelés fermions « droits » et ceux avec $-k$ appelés « gauches » donc $\epsilon_{R/L} = \pm 1$. Cette relation de dispersion linéaire rappelle l'équation de Dirac et diffère nettement de la dispersion quadratique du liquide de Fermi. Les excitations particules-trou sont bien définies au sens où elles ont un moment bien déterminé puisque, pour une excitation vers la droite, elles ont une énergie $E_{R,k}(q) = \mathcal{E}(k+q) - \mathcal{E}(k) = v_F q$ indépendante de k . L'idée est alors de les utiliser pour réécrire l'hamiltonien en introduisant l'opérateur de densité $\rho_r^\dagger(q)$ dans chaque branche R/L qui n'est autre que la superposition de ces excitations

³Cette dénomination peut paraître assez surprenante d'un point de vue physique. Il s'agit simplement de particules qui anti-commutent mais n'ont pas les degrés de liberté interne \uparrow, \downarrow des fermions « avec spin ». Physiquement, cette situation est réalisable en polarisant tous les spins avec un fort champ magnétique.

particule-trou

$$\rho_r^\dagger(q) = \begin{cases} \sum_k c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k} & \text{si } q \neq 0 \\ \sum_k c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k} - \langle c_{r,k+q}^\dagger c_{r,k} \rangle_0 = N_r & \text{si } q = 0 \end{cases} \quad (\text{II.36})$$

en notant que $\rho^\dagger(q) = \rho(-q)$. Il faut utiliser un ordre normal car la mer de Fermi est étendue à tous les vecteurs k , la deuxième équation définissant l'opérateur N_r . On peut ensuite montrer [6, 133] les résultats établissant le lien avec les champs θ et ϕ . Tout d'abord, les opérateurs $\rho_r^\dagger(q)$ sont de nature bosonique en raison des relations de commutation

$$\left[\rho_R^\dagger(q), \rho_L^\dagger(q') \right] = 0 \quad (\text{II.37})$$

$$\left[\rho_r^\dagger(q), \rho_{r'}^\dagger(-q') \right] = -\delta_{r,r'} \delta_{q,q'} \frac{rqL}{2\pi} \quad (\text{II.38})$$

avec L la taille du système. On peut également montrer que le passage à la description en termes des variables $\rho_r^\dagger(q)$ est exact. L'intérêt de ce changement de description réside dans la simplification du traitement des interactions : les interactions de type densité-densité seront naturellement quadratique dans ces variables. Pour ce qui est de la partie cinétique, on peut montrer [138] qu'elle aussi est quadratique en

$$\mathcal{H} = \sum_{q \neq 0} \frac{\pi v_F}{L} [\rho_R(q) \rho_R(-q) + \rho_L(q) \rho_L(-q)]. \quad (\text{II.39})$$

Cela est assez surprenant car chacun des opérateur $\rho_r(q)$ est lui-même quadratique dans les opérateurs fermioniques. Pour décrire un opérateur fermionique à la position x on part de sa décomposition de Fourier

$$\psi(x) = \frac{1}{L} \sum_k e^{ikx} c_k \simeq \frac{1}{L} \left[\sum_{-\Lambda < k - k_F < \Lambda} e^{ikx} c_k + \sum_{-\Lambda < k + k_F < \Lambda} e^{ikx} c_k \right] \quad (\text{II.40})$$

$$= e^{ik_F x} \psi_R(x) + e^{-ik_F x} \psi_L(x) \quad (\text{II.41})$$

où l'on a introduit un paramètre de coupure Λ dans les vecteurs d'ondes accessible (typiquement $\Lambda = \alpha^{-1} \sim a^{-1}$ où a est le pas du réseau). On peut alors montrer que les opérateurs créant les fermions droit et gauche s'écrivent respectivement

$$\psi_r(x) = U_r \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i\frac{r\pi}{L}x} e^{-i(r\phi(x) - \theta(x))} \quad (\text{II.42})$$

avec $r = R/L = \pm 1$. Pour l'expression des champs θ et ϕ en fonction des opérateurs $\rho_r(q)$, il a été montré que l'on obtient

$$\phi(x) = -(N_R + N_L) \frac{\pi x}{L} - \frac{i\pi}{L} \sum_{q \neq 0} \frac{e^{-\alpha|q|/2 - iqx}}{q} (\rho_R^\dagger(q) + \rho_L^\dagger(q)) \quad (\text{II.43})$$

$$\theta(x) = +(N_R - N_L) \frac{\pi x}{L} + \frac{i\pi}{L} \sum_{q \neq 0} \frac{e^{-\alpha|q|/2 - iqx}}{q} (\rho_R^\dagger(q) - \rho_L^\dagger(q)). \quad (\text{II.44})$$

L'opérateur U_r dans (II.42) est là pour donner la possibilité de créer ou détruire un fermion ce qu'on avait omis jusqu'à présent. En effet, les champs θ et ϕ ne peuvent créer des particules puisqu'ils se décomposent à travers les opérateurs de densité qui ne changent pas le nombre de particules. On remarque également que les nombres quantiques associés aux N_r sont reliés à N et J . En pratique, on peut montrer que la formulation (II.41) se simplifie dans la limite $L \rightarrow \infty$ en

$$\psi_r(x) = \frac{U_r}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i(r\phi(x) - \theta(x))} \quad (\text{II.45})$$

On obtient ainsi une forme similaire à celle de (II.5) où l'on a conservé que les termes avec $m = 0$ et $m = -1$.

Imaginons qu'on ait un hamiltonien ou une observable exprimé en fonction des opérateurs locaux c_i : on utilise alors $c_i \rightarrow \psi(x)$ et les formules (II.41) et (II.45) pour tout réexprimer en fonction des champs θ et ϕ . On obtient alors généralement un hamiltonien du type de (II.10) avec éventuellement des termes supplémentaires. Cette approche permet également une interprétation simple des champs conjugués θ et ϕ en remarquant que (II.43) et (II.44) donnent

$$\nabla\phi(x) = -\pi[\rho_R(x) + \rho_L(x)] \quad (\text{II.46})$$

$$\nabla\theta(x) = +\pi[\rho_R(x) - \rho_L(x)]. \quad (\text{II.47})$$

Ainsi, $-\frac{1}{\pi}\nabla\phi(x)$ est relié aux densités de particules gauche et droite et $\Pi = \frac{1}{\pi}\nabla\theta$ est le courant vers la droite des particules. À noter que la densité totale, elle, comporte un terme supplémentaire à $2k_F$ qui est simplement la première harmonique de (II.3)

$$\rho(x) = \psi^\dagger(x)\psi(x) = \rho_R(x) + \rho_L(x) + e^{-i2k_F x} \psi_R^\dagger(x)\psi_L(x) + h.c. \quad (\text{II.48})$$

$$= -\frac{1}{\pi}\nabla\phi(x) + \frac{1}{\pi\alpha} \cos(2k_F x - 2\phi(x)) \quad (\text{II.49})$$

On peut appliquer ce passage de l'hamiltonien microscopique à l'hamiltonien effectif sur un cas simple. Considérons des fermions sans spins sur une chaîne interagissant entre plus proche voisins : il s'agit du modèle $t - V$

$$\mathcal{H} = -t \sum_j \left[c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1} \right] + V \sum_j n_j n_{j+1} \quad (\text{II.50})$$

avec les opérateurs densités locales $n_j = c_j^\dagger c_j$. Le passage à la description dans le continu se fait par $c_i \rightarrow \psi(x)$. La partie cinétique donne un hamiltonien du type (II.10) avec $u = v_F$ et $K = 1$ tandis que le terme d'interaction en $\rho(x)^2$, si l'on fait l'approximation $\rho(x) \simeq \rho_R + \rho_L$, conduit à un terme $\int \frac{dx}{2\pi} \frac{2V}{\pi} (\nabla\phi(x))^2$, d'où les paramètres de Luttinger

$$u = v_F \left[1 + \frac{2V}{\pi v_F} \right]^{1/2} \quad (\text{II.51})$$

$$K = \left[1 + \frac{2V}{\pi v_F} \right]^{-1/2} \quad (\text{II.52})$$

Ainsi, les interactions n'ont fait que renormaliser les paramètres de Luttinger. On remarque d'ailleurs que $uK = v_F$ n'est pas modifié tandis qu'on aura $K < 1$ pour des interactions

répulsives et $K > 1$ pour des interactions attractives. Ces résultats sont en fait valides dans la limite $V/t \ll 1$. En effet, l'approximation faite consiste à ne prendre que la contribution aux grandes longueur d'ondes lorsque $q \rightarrow 0$. Pour des fortes interactions, la physique à courte portée va être déterminante. Par exemple, pour celles attractives, qui laisseraient supposer une divergence de K près de $V_c = -\frac{\pi v_F}{2}$, on aura tendance à associer les fermions par deux sur un lien et il faudrait prendre en compte cette physique locale. On verra aux chapitres VI et VII des comparaisons de ce genre de formules perturbatives avec des résultats numériques. Le diagramme de phase exacte du modèle t-V sera discuté dans la section 1.4.

1.2.2 spin 1/2 : transformation de Jordan-Wigner

Nous allons voir que le modèle $t - V$ a en fait une correspondance avec le modèle XXZ d'une chaîne de spins-1/2 :

$$\mathcal{H} = \frac{J_{xy}}{2} \sum_j [S_{j+1}^+ S_j^- + S_{j+1}^- S_j^+] + J_z \sum_j S_{j+1}^z S_j^z \quad (\text{II.53})$$

Jordan et Wigner [139] ont montré qu'une transformation canonique permettait de réécrire l'hamiltonien (II.53) en un modèle $t - V$ de fermions sans spin. La transformation de Jordan-Wigner s'écrit

$$\begin{aligned} S_j^z &= n_j - 1/2 \\ S_j^+ &= c_j^\dagger e^{i\pi \sum_{k<j} n_k} \\ S_j^- &= e^{-i\pi \sum_{k<j} n_k} c_j \end{aligned} \quad (\text{II.54})$$

avec comme précédemment $n_j = c_j^\dagger c_j$. La présence du kink dans S^+ est similaire à celle du facteur $e^{-i\phi(x)}$ dans (II.5) et permet d'assurer l'anticommutation des fermions. En utilisant (II.54) suivie de $c_j \rightarrow (-1)^j c_j$, on aboutit à l'hamiltonien (II.50) avec $t = J_{xy}/2$ et $V = J_z$. Dès lors, on peut en déduire les formes bosonisées des opérateurs de spins

$$S^z(x) = -\frac{1}{\pi} \nabla \phi(x) + \frac{(-1)^x}{\pi \alpha} \cos(2\phi(x)) \quad (\text{II.55})$$

$$S^+(x) = \frac{e^{-i\theta(x)}}{\sqrt{2\pi\alpha}} [(-1)^x + \cos(2\phi(x))] . \quad (\text{II.56})$$

S^z s'interprète donc comme la densité de spin c'est-à-dire l'aimantation locale. Le champ ϕ est relié physiquement à la projection du spin selon z tandis que θ sera associé à la partie du spin dans le plan xy [6].

1.2.3 Fermions avec spins : séparation spin-charge

Abordons maintenant le cas plus réaliste pour la physique du solide en tenant compte des degrés de liberté de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ de l'électron. Les opérateurs $c_{k,\sigma}$ sont alors bosonisés de façon similaire à (II.41) mais avec des champs $\theta_{\uparrow,\downarrow}$ et $\phi_{\uparrow,\downarrow}$ maintenant indicés par la variable de spin. On peut classer les processus d'interactions à deux fermions possibles autour et entre les points de Fermi (voir figure II.4). On attribue à chaque processus une certaine constante

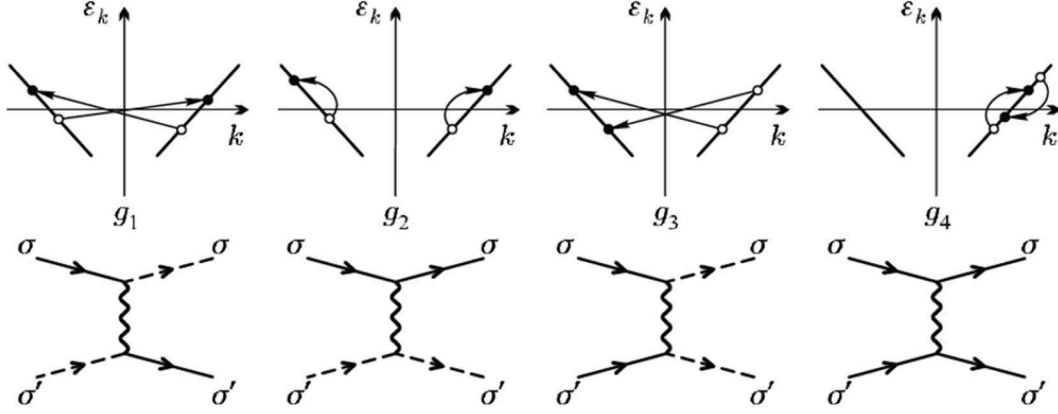


FIG. II.4: Les quatre processus élémentaires d'interactions à deux fermions avec spins : les lignes pleines représentent les fermions droits R et les pointillés les fermions gauches L . Les processus de umklapp transforment deux fermions droits en fermions gauches (g_3).

de couplage $g_{1,2,3,4}$ et on utilise la notation \perp si les spins des deux fermions sont différents et \parallel s'ils sont identiques. Le résultat essentiel est qu'on aboutit à un hamiltonien qui se décompose en une partie spin et une partie charge $\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_s$ avec respectivement

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_c &= \int \frac{dx}{2\pi} \left[u_c K_c (\pi \Pi_c(x))^2 + \frac{u_c}{K_c} (\nabla \phi_c(x))^2 \right] + \frac{2g_{3\perp}}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos \left[2\sqrt{2}\phi_c(x) - 2\pi\delta \frac{x}{a} \right] \\ \mathcal{H}_s &= \int \frac{dx}{2\pi} \left[u_s K_s (\pi \Pi_s(x))^2 + \frac{u_s}{K_s} (\nabla \phi_s(x))^2 \right] + \frac{2g_{1\perp}}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos[2\sqrt{2}\phi_s(x)] \quad (\text{II.57}) \end{aligned}$$

où les paramètres de Luttinger u_a, K_a dans les secteurs $a = c, s$ peuvent s'exprimer en fonction des constantes g_i et $\delta = 1 - n$ est le dopage en trous. Partant d'un modèle de Hubbard, les constantes g_i peuvent être exprimées en fonction du paramètre d'interaction U . La séparation du hamiltonien en deux secteurs repose sur la définition des secteurs de charge et de spin selon la transformation canonique

$$\phi_c(x) = [\phi_\uparrow(x) + \phi_\downarrow(x)]/\sqrt{2} \quad (\text{II.58})$$

$$\phi_s(x) = [\phi_\uparrow(x) - \phi_\downarrow(x)]/\sqrt{2}, \quad (\text{II.59})$$

si bien que les fermions droit et gauche s'écrivent désormais sous la forme⁴

$$\psi_{r,\sigma}(x) = \frac{U_{r,\sigma}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{irk_F x} e^{-i[r\phi_c(x) - \theta_c(x) + \sigma(r\phi_s(x) - \theta_s(x))]/\sqrt{2}}. \quad (\text{II.60})$$

Dans le cas où le terme en $\cos(2\sqrt{2}\phi_s)$ n'entraîne pas de transition de phase (voir section 1.3), la physique de basse énergie sera ainsi décrite par deux modes collectifs bosoniques associés aux excitations de charge et de spin ayant des vitesses différentes $u_s \neq u_c$. C'est ce qu'on appelle la séparation spin-charge pour mettre l'accent sur ce résultat très différent de celui

⁴Il faut que les $U_{r,\sigma}$ assure les relations d'anticommution entre différentes espèces. Cela est reproduit en leur donnant les relations de commutation adéquates. On les appelle aussi facteurs de Klein, notés η_a et tels que $\{\eta_a, \eta_b\} = \{\eta_a^\dagger, \eta_b^\dagger\} = 2\delta_{ab}$ et $\{\eta_a, \eta_b^\dagger\} = 0$ [140].

du liquide de Fermi où les excitations élémentaires, les quasi-particules, portaient à la fois la charge et le spin à la manière d'un électron libre. Le terme $\cos(2\sqrt{2}\phi_s)$ peut entraîner l'ouverture d'un gap de spin, il ne reste alors que le mode de charge : on parle dans ce cas de liquide de Luther-Emery [141–143]. Dans la littérature, on utilise la notation $CnSm$ pour décrire une phase ayant n modes de charge et m modes de spin. Ainsi, le liquide de Luttinger des fermions avec spins est dans une phase C1S1 tandis que le liquide de Luther-Emery est noté C1S0. Le terme $\cos[2\sqrt{2}\phi_c(x) - 2\pi\delta x]$ peut entraîner l'ouverture d'un gap de charge lorsque $\delta = 0$ conduisant à une phase de Mott C0S1. Nous allons maintenant discuter ces deux derniers cas plus en détails.

1.3 Instabilités du liquide de Luttinger

1.3.1 hamiltonien de sine-Gordon : comportement autour d'un point critique

On a vu que, compte-tenu de la forme des opérateurs (II.4) et (II.5), on s'attendait à voir apparaître parmi les termes de l'hamiltonien effectif des termes du type $\cos(\lambda\theta)$ comme (II.57) ou $\cos(\lambda\phi)$ avec λ un réel. Prenons le cas le plus simple où un seul terme $\cos\lambda\phi$ est présent : il s'agit de l'hamiltonien de sine-Gordon

$$\mathcal{H} = \int \frac{dx}{2\pi} \left[uK(\pi\Pi(x))^2 + \frac{u}{K}(\nabla\phi(x))^2 \right] + \frac{2g}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos[\lambda\phi(x)], \quad (\text{II.61})$$

avec g la constante de couplage. Dans cet hamiltonien, on a une compétition entre le terme $\nabla\phi$ qui favorise les fluctuations de ϕ et le terme en $\cos(\lambda\phi)$ qui préférerait avoir $\langle\phi\rangle = \text{cste}$ à une valeur qui minimise l'énergie. On s'attend donc, suivant la force du couplage g/u et le paramètre de Luttinger K à ce qu'il y ait une transition entre une phase type liquide de Luttinger et une phase où le champ sera gelé. L'hamiltonien (II.61) ne pouvant être complètement traité analytiquement, le comportement du système est étudié par renormalisation. L'étude est standard et recoupe les célèbres résultats sur la transition Kosterlitz-Thouless [144, 145] du modèle XY à deux dimensions. Si on paramètre la coupure par $\alpha(l) = \alpha_0 e^l$ dans la renormalisation, on montre qu'on aboutit dans la limite perturbative en $y = g/(\pi u)$ au système d'équations

$$\frac{dK}{dl} = -y^2(l)K^2(l)/2 \quad (\text{II.62})$$

$$\frac{dy}{dl} = [2 - \lambda^2 K(l)/4]y(l) = 2 \left[1 - \frac{K(l)}{K_c} \right] y(l) \quad (\text{II.63})$$

avec la valeur critique $K_c = 8/\lambda^2$. On voit sur l'équation (II.63) que si $K > K_c$, le couplage réduit y sera renormalisé à zéro et sera donc non pertinent. En revanche, lorsque $K < K_c$, le couplage deviendra pertinent et croîtra lors du processus de renormalisation ; le traitement perturbatif en y ne sera plus correct dans ce régime de couplage fort mais permet d'étudier le comportement de certaines quantités physiques comme le gap en suivant le flot de renormalisation. Le diagramme de la figure II.5 représente le flot du système d'équations précédent autour du point critique $K = K_c$ dans la limite $|y| \ll 1$. Il fait apparaître la ligne séparatrice $|y| = 2(K - K_c)$ entre les deux phases possibles. Voici résumés les différents scénarios que l'on peut rencontrer :

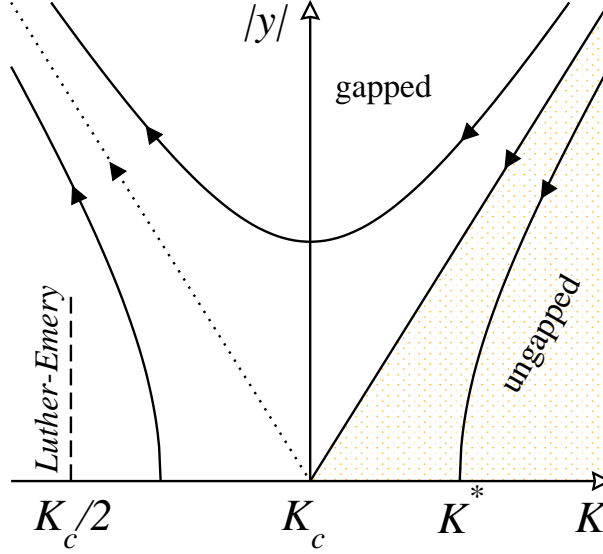


FIG. II.5: Flot de la renormalisation de l'hamiltonien de sine-Gordon (II.61) en fonction du paramètre de Luttinger K et du couplage y . Les différentes régions et comportements correspondant sont expliqués dans le texte.

- (a) Si on part d'un point (K, y) se trouvant sous la séparatrice, l'effet du couplage sera seulement de renormaliser le paramètre de Luttinger K en $K^* > K_c$ au travers du flot de renormalisation.
- (b) Si on se trouve sur la séparatrice, le couplage est marginalement pertinent. Le flot entraîne le système vers le point $K^* = K_c$. Cependant, il faut parfois tenir compte dans ce cas particulier de corrections logarithmiques (par exemple en $\sqrt{\ln x/x}$) dans certaines fonctions de corrélations.
- (c) De l'autre côté de la séparatrice, l'effet du couplage sera de geler $\phi(x)$ à une des valeurs qui minimise l'énergie totale. En vertu du théorème de Mermin-Wagner, on aura une brisure spontanée de symétrie *discrète* associée à cette transition de phase quantique⁵. Le système développe alors un gap Δ . En ce qui concerne les fonctions de corrélations, dans la mesure où le champ ϕ s'ordonne ($\langle \phi \rangle = \text{cste}$), on pourra remplacer les observables $\langle f(\phi) \rangle$ par $f(\langle \phi \rangle)$. Les fonctions de corrélations associées au champ ϕ vérifieront $\langle f(\phi(x))f(\phi(0)) \rangle \simeq f^2(\langle \phi \rangle) + Ae^{-x/\xi}$ où l'on a introduit la longueur de corrélation $\xi \sim u/\Delta$ qui varie comme l'inverse du gap. Pour le champ dual $\theta(x)$, les termes contenant $e^{in\theta(x)}$ décroîtront exponentiellement vers zéro avec la même longueur de corrélation ξ .

En suivant le flot de la renormalisation, on peut obtenir le comportement du gap dans les différentes régions de la figure II.5. Lorsque $y \ll 2(K - K_c)$, on peut montrer qu'on aura

$$\Delta \propto g^{\frac{K_c}{2(K_c - K)}}, \quad (\text{II.64})$$

de sorte que le gap se ferme bien pour $K \rightarrow K_c$. On retrouve également le résultat

⁵Dans le cas où il y a plusieurs champs ϕ associés à différents secteurs dans l'hamiltonien effectif, il n'y aura pas nécessairement brisure d'une symétrie discrète.

exact (II.69) sur la ligne de Luther-Emery en prenant $K = K_c/2$. L'ouverture du gap est donc une loi de puissance du couplage g contrôlée par l'exposant de Luttinger K . Sur la ligne $y = -2(K - K_c)$, il est montré que le gap est exponentiellement petit dans le couplage

$$\Delta \propto e^{-\text{cste}/g}. \quad (\text{II.65})$$

Enfin, pour $|y| > 2(K - K_c)$ (mais perturbativement en y), on a le comportement typique de la transition Kosterlitz-Thouless

$$\Delta \propto e^{-\text{cste}/\sqrt{g-g_c}}, \quad (\text{II.66})$$

avec $g_c = 2u(K - K_c)$.

En général, on peut avoir de nombreux termes supplémentaires du type sine-Gordon dans l'hamiltonien et il faudra écrire le système d'équations particulier gouvernant le flot de renormalisation des paramètres de Luttinger $u_\rho, u_\sigma, \dots, K_\rho, K_\sigma, \dots$ et des constantes de couplage réduites y_0, y_1, y_2, \dots . Pour ce faire, il existe des méthodes systématiques comme le développement des produits d'opérateurs (OPE) [132, 135]. Le système d'équations est alors étudié pour déterminer les différentes phases possibles et leurs transitions. On peut aussi tirer des informations sur le comportement de quantités physiques comme le gap ou les susceptibilités en suivant le flot. Notons, que si on a un terme en $\cos \lambda\theta$ dans le traitement précédent, comme dans la partie quadratique $\sqrt{K}\theta$ est l'équivalent de ϕ/\sqrt{K} , on en déduit que le champ θ sera gelé si cette fois $K > K_c = \lambda^2/8$.

1.3.2 Spectre d'excitation d'un système gappé

Afin de décrire le spectre des excitations dans une phase gappée où le couplage g précédent devient pertinent, il est d'usage d'utiliser une astuce due à Luther et Emery [143]. En effet, l'hamiltonien (II.61) peut être réécrit

$$\mathcal{H} = \int \frac{dx}{2\pi} \left[u\tilde{K}(\pi\tilde{\Pi}(x))^2 + \frac{u}{\tilde{K}}(\nabla\tilde{\phi}(x))^2 \right] + \frac{2g}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos[2\tilde{\phi}(x)], \quad (\text{II.67})$$

en faisant la transformation canonique $\tilde{\phi}(x) = (\lambda/2)\phi(x)$ et en notant $\tilde{K} = (\lambda^2/4)K$. Si on a la valeur particulière $K = 4/\lambda^2 = K_c/2 < K_c$, alors le système est gappé d'après l'analyse précédente. Or, comme $\tilde{K} = 1$, la partie cinétique de l'hamiltonien est celle de fermions libres ce qui suggère de repasser dans un langage de pseudo-fermions⁶ $\tilde{c}_{r,k}$ correspondant aux champs $\tilde{\phi}$ et $\tilde{\theta}$. D'autre part, le terme d'interaction devient lui aussi très simple dans ce langage, ce qui conduit à l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = \sum_k uk(\tilde{c}_{R,k}^\dagger \tilde{c}_{R,k} - \tilde{c}_{L,k}^\dagger \tilde{c}_{L,k}) + \frac{g}{2\pi\alpha} \sum_k \tilde{c}_{R,k}^\dagger \tilde{c}_{L,k} + \tilde{c}_{L,k}^\dagger \tilde{c}_{R,k}. \quad (\text{II.68})$$

Celui-ci se résout à l'aide d'une transformation de Bogoliubov et on obtient alors un spectre d'excitations gappé en (voir figure II.6)

$$E(k) = \sqrt{(uk)^2 + \Delta^2} \quad \text{avec pour le gap} \quad \Delta = \frac{g}{2\pi\alpha}. \quad (\text{II.69})$$

⁶Ces fermions ne sont pas les fermions originaux du modèle microscopique.

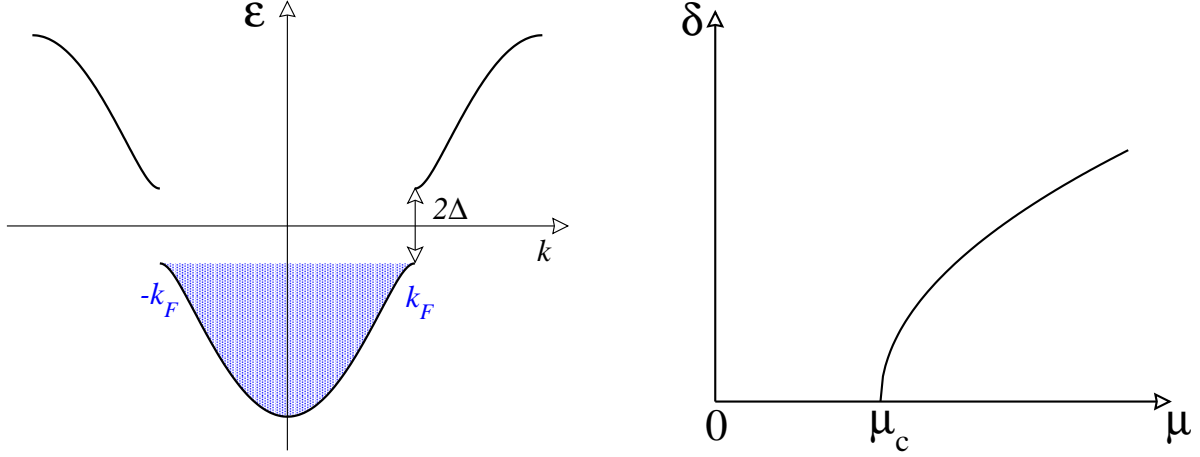


FIG. II.6: À gauche, ouverture d'un gap due à des processus de umklapp pertinents dans le cas d'un remplissage commensurable (ici au demi-remplissage). À droite, la relation densité-potentiel chimique lors de la transition commensurable-incommensurable, avec $\mu_c = \Delta$.

Cette transformation ne résout cependant pas tout pour cette valeur particulière de K car elle ne peut prédire le comportement des fonctions de corrélations par exemple. On a représenté cette ligne particulière sur la figure II.5.

1.3.3 Transition commensurable-incommensurable

On a vu que pouvaient aussi apparaître dans l'hamiltonien des termes du type

$$\frac{2g}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos \left[\lambda\phi(x) - 2\pi\delta\frac{x}{a} \right], \quad (\text{II.70})$$

avec λ, δ deux réels. Comme nous décrivons des fermions sur un réseau, nous avons que $x = na$ avec n entier et on se limite à $0 \leq \delta < 1$. Si $\delta = 0$ ou 1 , on est ramené au cas précédent et on se placera désormais dans le cas où ce terme est pertinent. $a\delta^{-1}$ est une longueur caractéristique. Souvent, ce genre de terme apparaît pour une densité δ associée à un potentiel chimique μ . Cette densité peut correspondre à la densité d'électrons ou à une densité de spin (aimantation). Dans ce dernier cas le potentiel chimique sera le champ magnétique. Suivant qu'on travaille à densité fixée ou avec le potentiel chimique fixé, le champ ϕ est contraint (valeur moyenne fixée) ou non. On a alors deux situations possibles [146–149] :

- (i) le champ est contraint : on peut montrer que, dès lors que $\delta \neq 0$, la présence de $-2\pi\delta x$ dans le cosinus va tuer l'effet pertinent du couplage. On a donc une transition de phase entre le système avec $\delta = 0$ (commensurable, gappé) et $\delta \neq 0$ (incommensurable, toujours non gappé). Lorsque $\delta = 0$, le résultat précédent nous donne $K_c = 8/\lambda^2$ pour la transition.
- (ii) le champ n'est pas contraint : il va y avoir une compétition entre le potentiel du cosinus qui préfère geler le champ ϕ à une valeur moyenne et le terme incommensurable. Il y a alors une valeur critique μ_c pour la transition en-dessous de laquelle $\delta = 0$. μ_c , et par conséquent l'étendue de la phase commensurable, dépend alors interactions.

Cependant, la valeur critique de K nécessaire pour qu'il y ait transition lorsqu'on s'approche de $\delta = 0$ est plus petite : $K_c = 4/\lambda^2$.

Pour déterminer le comportement critique de cette transition, on peut utiliser une transformation en termes de pseudo-fermions similaire à celle de la section précédente. Le résultat essentiel est qu'on peut négliger les interactions entre les excitations au-dessus du gap si bien qu'il est raisonnable d'utiliser (II.69). Ainsi, en introduisant le potentiel chimique associé à ces pseudo-fermions, on peut écrire que dans la phase non gappé on aura $\mu = \sqrt{(u\tilde{k}_F)^2 + \Delta^2}$ soit $\tilde{k}_F \propto \sqrt{\mu^2 - \mu_c^2} \sim \sqrt{\mu - \mu_c}$ avec $\mu_c = \Delta$. La signification physique de ces pseudo-fermions est celle de solitons associés au champ ϕ . On en déduit le comportement critique $\delta = \sqrt{\mu - \mu_c}$ typique d'un remplissage de bande à une dimension (voir figure II.6).

D'autre part, si on imagine maintenant que le remplissage est à une commensurabilité rationnelle $\delta = p/q$ avec p et q premiers entre eux, des termes du type

$$\left(\frac{2g}{(2\pi\alpha)^2}\right)^q \int dx \cos \left[q\lambda\phi(x) - 2\pi p \frac{x}{a} \right] = \left(\frac{2g}{(2\pi\alpha)^2}\right)^q \int dx \cos [q\lambda\phi(x)] \quad (\text{II.71})$$

peuvent être générés perturbativement par des processus faisant intervenir q fermions et sont autorisés par les symétries⁷. Ils peuvent eux aussi ouvrir un gap dans le système mais le couplage $g_q \sim g^q$ est fortement réduit tandis que $K_c = 8/(\lambda q)^2$ est très petit. Dans ce cas, on a une brisure spontanée de la symétrie de translation avec pour valeurs possibles $\lambda\langle\phi\rangle = 2\pi k/q$, $k = 0, \dots, q-1$. Bien que les conditions d'ouverture de gap sont donc moins favorables pour les q élevés, de tels effets de commensurabilités apparaissent régulièrement pour $q = 2$ par exemple qui, dans l'exemple de la transition de Mott, apparaît au quart-remplissage. Ces effets de commensurabilités peuvent être justifiés dans un cadre plus général.

1.3.4 Approche topologique du rôle des commensurabilités

On a vu que des valeurs particulières du remplissage en électrons engendrent des termes pouvant entraîner l'ouverture de gap au niveau de Fermi. Cette discussion sur le rôle des commensurabilités peut en fait être abordée sur la base d'arguments topologiques très généraux et indépendants de la notion de liquide de Luttinger [150, 151]. On va voir que l'on peut d'ailleurs justifier le fait que lors de la description du liquide de Luttinger, on a considéré que le vecteur de Fermi k_F ne dépendait pas des interactions mais uniquement de la densité électronique. La conservation du volume de la surface de Fermi lorsqu'on branche les interactions constitue le théorème de Luttinger [152]. Enfin, bien que ne pouvant déterminer le spectre de basse énergie et la dégénérescence du fondamental, cette approche permet de les contraindre fortement. Commençons par le cas de fermions sans spins. La démonstration repose sur la construction d'un état excité $|\psi_e\rangle$ par application d'un opérateur de twist U sur le fondamental $|\psi_0\rangle$: $|\psi_e\rangle = e^{2\pi i \sum_j \frac{j}{L} n_j} |\psi_0\rangle = U |\psi_0\rangle$. On montre alors que [151] : pour hamiltonien sur une chaîne contenant des interactions à courte portée commutant avec U (interactions de type densité-densité par exemple) et conservant la parité $x \rightarrow -x$ ou l'invariance par renversement dans le temps, alors cet état a un gap en énergie d'ordre $O(1/L)$ avec

⁷En pratique, la parité de q peut aussi jouer car les termes qui apparaissent en fonction des opérateurs fermioniques dépendent aussi de la partie spin. Dans le cadre des transitions de Mott à 1D, à une commensurabilité, $K_c = 4/q^2$ pour q pair et $3/q^2$ pour q impair.

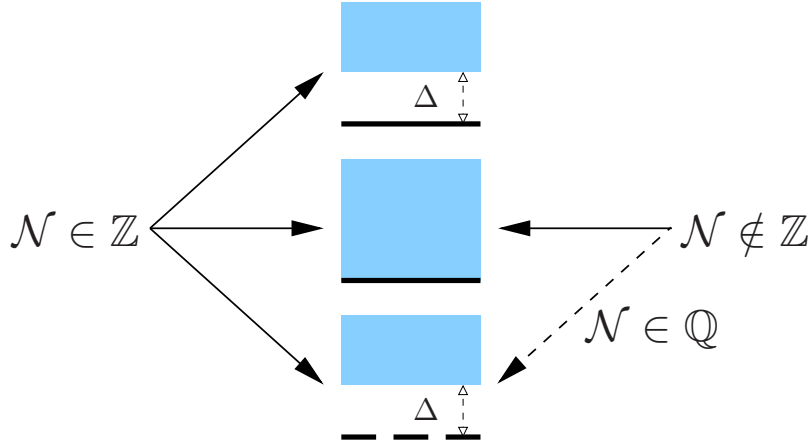


FIG. II.7: **Théorème de Yamanaka-Oshikawa-Affleck.** Trois situations sont possibles pour le fondamental, de haut en bas : non dégénéré avec un gap Δ , non dégénéré avec continuum et dégénéré avec un gap. \mathcal{N} est le nombre apparaissant dans le théorème. Ce nombre est le spin S dans le théorème de Lieb-Schultz-Mattis.

le fondamental. Or, en utilisant la symétrie de translation d'un pas du réseau, on trouve que cet état est orthogonal à $|\psi_0\rangle$ si la densité de fermions $n = \sum_j n_j/L \notin \mathbb{Z}$. On a donc construit un état excité de basse énergie orthogonal au fondamental dans la limite thermodynamique. Au passage, le vecteur d'onde $2\pi n \equiv 2k_F$ associé à cette excitation est bien indépendant des interactions, ce qui démontre le théorème de Luttinger à une dimension. En revanche, si $n \in \mathbb{Z}$, cet état est colinéaire à $|\psi_0\rangle$ et on ne peut rien conclure. Dans le cas particulier où $n = p/q \in \mathbb{Q}$, on peut avoir q états de basse énergie. S'il y a un gap dans le spectre de basse énergie à la limite thermodynamique, on a alors nécessairement brisure spontanée de l'invariance par translation et dégénérescences des q états comme discuté précédemment. Rappelons ici que d'après les arguments de la section précédente, les commensurabilités du type p/q sont d'autant peu « probables » que q est grand. Ce théorème est résumé sur la figure II.7 où l'on a noté \mathcal{N} le « nombre » qui intervient dans le théorème, c'est-à-dire simplement n jusque-là.

Dans le cas de fermions de spins-1/2, le spin total S^z selon z entre en jeu et le théorème suppose qu'il est conservé. Il y a alors deux opérateurs de twist $U_{\uparrow,\downarrow}$ qui interviennent pour donner deux nombres de Yamanaka-Oshikawa-Affleck $\mathcal{N}_{\uparrow} = n_{\uparrow}$ et $\mathcal{N}_{\downarrow} = n_{\downarrow}$ indépendamment, en notant n_{σ} les densités électroniques dans l'état de spin σ . Si l'aimantation $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ est nulle, alors $n_{\uparrow} = n_{\downarrow} = n/2$ si bien que $k_F = \pi n/2$ validant le théorème de Luttinger. Dans ce cas, on voit que le théorème ne contraint pas le gap dans le secteur spin ($m = 0 \in \mathbb{Z}$) tandis qu'il le contraint dans le secteur de la charge. Cette indépendance des secteurs rappelle la séparation spin-charge et la physique du liquide de Luther-Emery. Les arguments utilisés ici sont les mêmes que pour le théorème de Lieb-Schultz-Mattis [31, 32] sur les chaînes : le nombre intervenant dans le théorème est alors le spin $\mathcal{N} = S$. Comme conséquence, une chaîne de spin 1/2 gappée brise nécessairement l'invariance par translation. Enfin, au delà des chaînes, le théorème pour les échelles dopées à M montants fait intervenir les nombres $\mathcal{N}_{\uparrow} = Mn_{\uparrow}$ et $\mathcal{N}_{\downarrow} = Mn_{\downarrow}$ [153]. Dans la limite bidimensionnelle $M \rightarrow \infty$, le théorème n'a plus de sens mais il existe une généralisation du théorème de Lieb-Schultz-Mattis à deux dimensions [154, 155].

1.4 Diagrammes de phase

L'objectif de cette partie est d'appliquer ce qui a été introduit jusqu'ici pour discuter les diagrammes de phases des modèles microscopiques sur des chaînes avant de s'attaquer au cas des chaînes couplées (les échelles!) dans la section 2. Comme toutes les fonctions de corrélations sont gouvernées par les paramètres de Luttinger K , les diagrammes de phases reviennent à tracer d'une part les limites des secteurs gappés mais aussi les lignes de K constant d'après lesquelles on détermine les fluctuations dominantes.

1.4.1 Fluctuations dominantes

On peut étudier les diagrammes de phase prédits par la bosonisation en fonction des paramètres K des différents secteurs et des constantes de couplage g qui vont perturber le liquide de Luttinger. Lorsqu'un secteur est non gappé, il va y avoir plusieurs paramètres d'ordre qui vont fluctuer et entrer en compétition (par exemple ondes de densité de charge et supraconductivité, respectivement abrégées en CDW et SC dans la suite). Pour savoir quel paramètre d'ordre \mathcal{O} domine, on regarde la susceptibilité qui lui est associée; elle s'écrit à température nulle

$$\chi_{\mathcal{O}}(k, \omega_n) = \int_0^\infty d\tau \int dx \langle \mathcal{O}(x, \tau) \mathcal{O}(0, 0) \rangle e^{-ikx + i\omega_n \tau}, \quad (\text{II.72})$$

avec ω_n les fréquences de Matsubara. En général, le terme dominant des corrélations est de la forme e^{-iqr}/r^η avec q le moment associé à l'exposant ν le plus petit parmi ceux des termes algébriques. Comme l'intégrale sur le temps et l'espace peut être vue comme une intégrale à deux dimensions, la contribution principale à la susceptibilité aura comme loi d'échelle pour δk petit

$$\chi_{\mathcal{O}}(q + \delta k, \omega_n) \sim [\max(\delta k, \omega_n)]^{\eta-2}, \quad (\text{II.73})$$

ce qui signifie que si $\eta < 2$, la susceptibilité statique ($\omega = 0$) divergera algébriquement près de $k = q$. La susceptibilité caractérisant la réponse du système à une perturbation extérieure, sa divergence signifie qu'infinitésimale soit cette perturbation, le système y donnera une réponse finie. Si on étudie le facteur de structure sur un système de taille finie $\mathcal{S}_{\mathcal{O}}(k, L) = \int_0^L dx e^{-ikx} \langle \mathcal{O}(x, 0) \mathcal{O}(0, 0) \rangle$ associé aux corrélations à temps égaux, le pic $\mathcal{S}_{\mathcal{O}}(q, L)$ divergera comme $L^{1-\eta}$.

Bien qu'il ne puisse y avoir de brisure de symétrie continue à une dimension, le fait que la susceptibilité diverge sur une chaîne se manifestera par un vrai ordre si on couple ces chaînes à deux ou trois dimensions comme dans les vrais composés. Cela peut se justifier au travers d'un traitement de la susceptibilité du système à deux ou trois dimension par la méthode Random Phase Approximation (RPA) :

$$\chi_{\mathcal{O}}^{\text{RPA}}(k, \omega_n) = \frac{\chi_{\mathcal{O}}(k, \omega_n)}{1 + g^{\text{inter}}(k, k_{\perp}) \chi_{\mathcal{O}}(k, \omega_n)} \quad (\text{II.74})$$

avec $g^{\text{inter}}(k, k_{\perp})$ le couplage inter-chaînes qui introduit les modes transverses k_{\perp} . L'annulation du dénominateur pour des vecteurs d'onde particuliers k, k_{\perp} se traduira par une transition de phase et l'ordre associé. Par exemple, des fluctuations dominantes d'ordre de densité

de charge à 1D vont donner à un vrai ordre à 2D ou 3D. Lorsqu'on a plusieurs ordres en compétition dont les exposants $\nu(K_1, K_2, \dots)$ sont paramétrés par les paramètres de Luttinger K_1, K_2, \dots , l'ordre qui se développera préférentiellement sera donc celui qui a l'exposant *le plus petit*.

1.4.2 Chaîne XXZ

La bosonisation de la chaîne de spin XXZ (II.53) donne un hamiltonien quadratique avec, à aimantation nulle, un terme

$$-\frac{2J_z}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos[4\phi(x)]. \quad (\text{II.75})$$

dû aux processus de umklapp. Le système a deux paramètres : l'aimantation m (ou la densité de fermions sans spin, $m = 0$ s'identifiant au demi-remplissage) et le rapport des interactions J_z/J_{xy} . Le terme (II.75) entraîne l'ouverture d'un gap lorsque $m = 0$ si $K = 1/2$ d'après les résultats précédents. Les paramètres de Luttinger u, K du modèle sont calculables par résolution numérique des équations de l'ansatz de Bethe [23, 24, 157] (et analytiquement sur la ligne $m = 0$ ou $n = 1/2$). Les résultats d'Haldane [156] sont rapportés sur la figure II.8. Ils montrent qu'un gap Δ s'ouvre au point de Heisenberg $J_z = J_{xy} > 0$ pour entrer dans une phase ordonnée antiferromagnétique. Cela s'interprète comme une transition de Mott dans le langage des fermions sans spin. Lorsque $J_z < -J_{xy}$, le système est dans une phase ferromagnétique et K diverge au voisinage de cette transition. Autour de la ligne ($m = 0, J_z > J_{xy}$), on a une transition commensurable-incommensurable avec une aimantation qui varie donc selon $m \sim \sqrt{h - \Delta}$. En ce qui concerne les ordres en compétition, comme on n'a pas la symétrie SU(2), les corrélations du spin selon l'axe et dans le plan sont différentes, on obtient pour une aimantation quelconque dans toute la phase liquide de Luttinger

$$\langle S^z(x)S^z(0) \rangle - m^2 = \frac{K}{2\pi^2} \frac{1}{x^2} + C_1 \cos((1+2m)\pi x) \frac{1}{x^{2K}} \quad (\text{II.76})$$

$$\langle S^+(x)S^-(0) \rangle = C_2 \cos(2\pi m x) \frac{1}{x^{2K+1/(2K)}} + C_2 \cos(\pi x) \frac{1}{x^{1/(2K)}} \quad (\text{II.77})$$

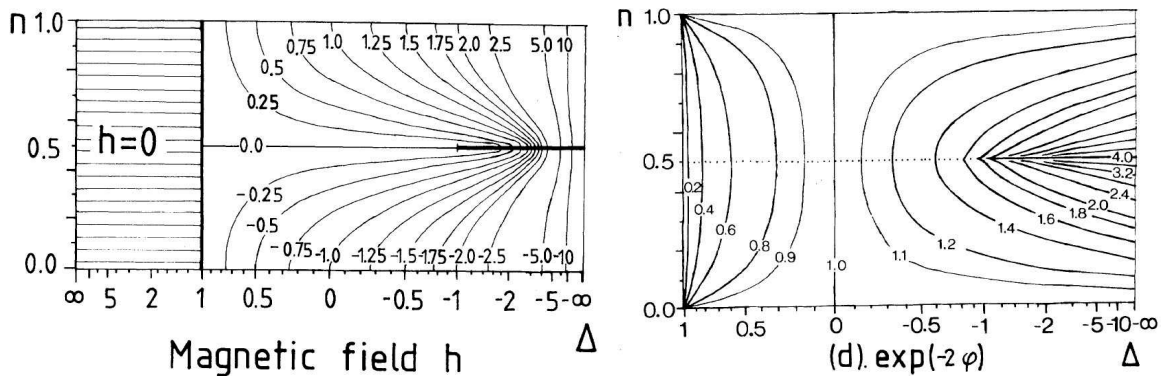


FIG. II.8: Diagramme de phase d'une chaîne XXZ. n est le remplissage de fermions sans spins (l'aimantation est $m = n - 1/2$), $\Delta = J_z/J_{xy}$ (et non le gap) et $K = \exp(2\varphi)$ (c'est K^{-1} qui est en fait tracé). D'après Haldane [156].

Sur le premier terme, on voit que, suivant que $K > 1$ ou $K < 1$, les fluctuations ferromagnétiques ou antiferromagnétiques vont dominer. Pour $K < 1/2$, c'est l'ordre dans le plan xy qui va contribuer le plus aux fluctuations. Au point de Heisenberg, l'opérateur (II.75) est marginalement pertinent et on a des corrections logarithmiques aux fonctions de corrélations dont le terme dominant est en $(-1)^x \sqrt{\ln x}/x$.

1.4.3 Chaîne de Hubbard

Le modèle de Hubbard précédemment vu est lui aussi intégrable par ansatz de Bethe [14] quel que soit U . Quatre ordres vont entrer en compétition :

$$\mathcal{O}_{\text{CDW}} \sim e^{-2ik_F} e^{i\sqrt{2}\phi_c} \cos \sqrt{2}\phi_s \quad (\text{II.78})$$

$$\mathcal{O}_{\text{SDW}^x} \sim e^{-2ik_F} e^{i\sqrt{2}\phi_c} \cos \sqrt{2}\theta_s \quad (\text{II.79})$$

$$\mathcal{O}_{\text{SDW}^z} \sim e^{-2ik_F} e^{i\sqrt{2}\phi_c} \sin \sqrt{2}\phi_s \quad (\text{II.80})$$

$$\mathcal{O}_{\text{SS}} \sim e^{-i\sqrt{2}\theta_c} \cos \sqrt{2}\theta_s \quad (\text{II.81})$$

$$\mathcal{O}_{\text{TS}} \sim e^{-i\sqrt{2}\theta_c} \sin \sqrt{2}\phi_s \quad (\text{II.82})$$

avec CDW pour onde de densité de charge, $\text{SDW}^{x,y,z}$ pour onde de densité de spin, SS pour supraconductivité singulet et TS pour supraconductivité triplet. Pour un remplissage non commensurable, deux situations sont possibles suivant que le spin est gappé ou non. Dans le second cas, l'analyse du modèle de sine-Gordon montre une renormalisation de K_s en $K_s^* = 1$. Les comportements des corrélations associées à ces ordres sont résumés dans le tableau II.1 et les paramètres de Luttinger sont donnés pour $U < 0$ et $U > 0$ sur les figures II.10 et II.9. Pour $U > 0$, $0.5 < K_c < 1$ et $K_s^* = 1$: on a un liquide de Luttinger avec séparation spin-charge et soit un ordre dominant CDW ou SDW. C'est en fait SDW qui domine en raison de corrections logarithmiques. Pour $U < 0$, $1 < K_c < 2$ et le mode de spin est gappé : le système a des fluctuations supraconductrices singulet dominantes. Dans la limite de basse densité à fort U négatif, on interprète simplement le fait que $K_c \rightarrow 2$ puisque les électrons s'apparient formant des bosons de cœur dur quasi-libres pour lesquels la fonction de Green est en $1/\sqrt{x}$. Au demi-remplissage, on entre dans une phase de Mott dès que $U > 0$, mais le mode de spin reste non gappé (phase COS1). On a alors un système équivalent à une chaîne de spin 1/2 antiferromagnétique avec $J = 4t^2/U$.

Si on rajoute une interaction répulsive au deuxième voisin V , on observe [160–162] une phase supraconductrice avec $U > 0$ existant au delà d'un V critique ainsi qu'une transition de Mott au quart-remplissage (voir figure II.11). On peut donc avoir de la supraconductivité avec interactions répulsives seulement avec un modèle étendu. D'autre part, le paramètre K_c a pu être évalué à environ 0.23 dans les conducteurs organiques à partir du comportement en loi d'échelle de la conductivité optique à haute température dans les sels $(\text{TMTSF})_2\text{X}$ [163]. Les interactions répulsives à plus longue portée sont donc pertinentes expérimentalement.

1.4.4 Chaîne t-J

Enfin, pour la chaîne t-J qui n'est pas intégrable sauf pour les valeurs particulières $J/t = 0$ et 2, le diagramme de phase a été calculé numériquement par diagonalisation exacte et est rapporté sur la figure II.12. On y observe [164] essentiellement trois phases : pour $0.5 <$

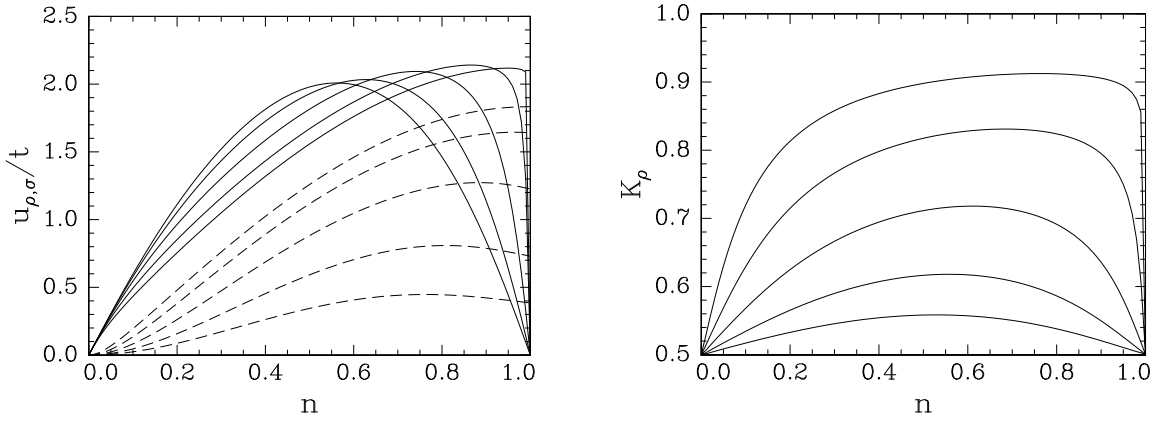


FIG. II.9: Paramètres de Luttinger des modes de charge et de spin ($K_s^* = 1$ n'est pas représenté) d'une chaîne de Hubbard à $U > 0$ (phase C1S1). D'après Schulz [158].

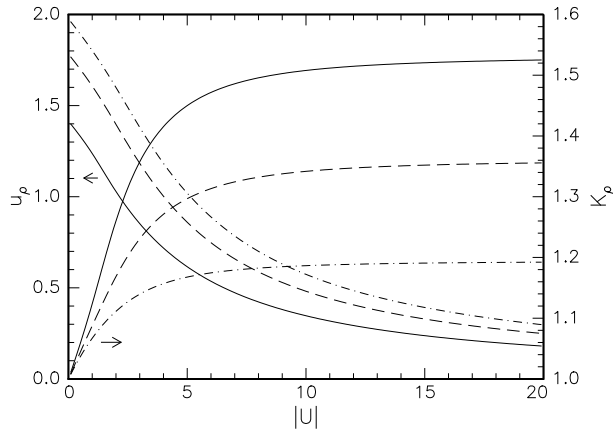


FIG. II.10: Paramètres de Luttinger du mode de charge d'une chaîne de Hubbard à $U < 0$. Le mode de spin est gappé dans ce cas (phase C1S0). D'après Giamarchi [159].

Order	in C1S1		in C1S0	
	exponent	wave-vector	exponent	wave-vector
\mathcal{O}_{CDW}	$K_c + K_s^*$	$2k_F$	K_c	$2k_F$
$\mathcal{O}_{\text{SDW}^{x,y}}$	$K_c + 1/K_s^*$	$2k_F$	exp.	$2k_F$
$\mathcal{O}_{\text{SDW}^z}$	$K_c + K_s^*$	$2k_F$	exp.	$2k_F$
\mathcal{O}_{SS}	$1/K_c + K_s^*$	0	$1/K_c$	0
\mathcal{O}_{TS}	$1/K_c + K_s^*$	0	exp.	0

TAB. II.1: Résumé des exposants des corrélations algébriques (hors certains terms en x^{-2}) pour les deux phases liquide de Luttinger et liquide de Luther-Emery de la chaîne de Hubbard. Notez que $K_s^* = 1$.

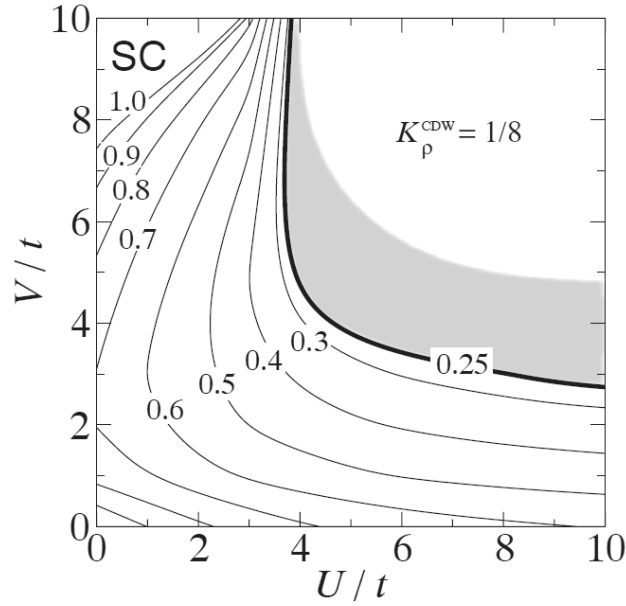


FIG. II.11: Diagramme de phase de la chaîne de Hubbard étendue au quart-remplissage montrant une phase supraconductrice pour $K_c > 1$. D'après Ejima et al. [160].

$K_c < 1$ à faible J/t , on a domination des CDW. Pour des J/t un peu plus grands, on a $1 < K_c < \infty$ donc ce sont les corrélations supraconductrices qui dominent. Enfin, on observe une séparation de phase correspondant à une transition du premier ordre vers un état où les trous et les spins occupent des domaines séparés. De façon similaire à la transition vers l'état ferromagnétique de la chaîne XXZ, K_c diverge au voisinage de cette transition.

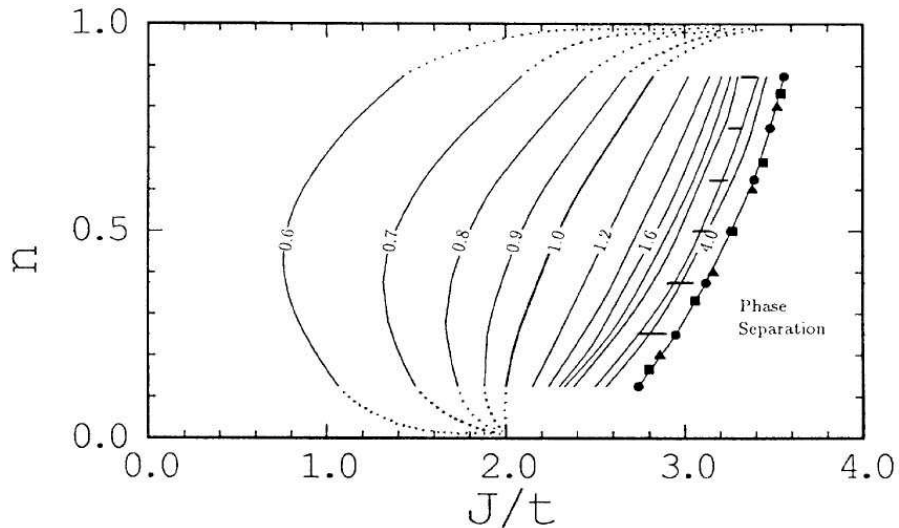


FIG. II.12: Diagramme de phase de la chaîne t - J donnant les lignes de K_c en fonction de la densité n et de J/t . D'après Ogata et al. [164].

2 Application aux échelles de spins

On utilise maintenant les notions introduites jusqu'ici pour discuter de ce qu'il advient de deux chaînes couplées. On commence par le cas des échelles isolantes dont le magnétisme est décrit par le modèle XXZ ou Heisenberg. Les résultats de bosonisation sont ensuite confrontés aux résultats numériques existants. On s'intéresse ensuite au cas d'échelles dopées avec l'étude des modèles de Hubbard (dans l'approche couplage faible) et du modèle t-J (pour la limite de couplage fort). Là encore, les prédictions sur la physique de basse énergie sont mis en relation avec les calculs numériques, mettant en évidence une grande richesse dans les phases observées par rapport au cas d'une chaîne isolée.

2.1 Échelles isolantes

On rapporte ici les résultats sur les échelles XXZ décrites par l'hamiltonien

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{XXZ} = & \sum_{i,l=1,2} J_{xy} [S_{i+1,l}^+ S_{i,l}^- + S_{i+1,l}^- S_{i,l}^+] / 2 + J_z S_{i+1,l}^z S_{i,l}^z \\ & + \sum_i J_{xy}^\perp [S_{i,1}^+ S_{i,2}^- + S_{i,2}^- S_{i,1}^+] / 2 + J_z^\perp S_{i,1}^z S_{i,2}^z \end{aligned} \quad (\text{II.83})$$

Cet hamiltonien a la symétrie $U(1)$ associé à la conservation de S^z . Pour l'hamiltonien de Heisenberg $J_{xy}^\perp = J_z^\perp$ et $J_{xy} = J_z$, et le système est invariant par rotation de spin $SU(2)$. Notez aussi que les résultats seront également applicables au modèle $t-V$ de bosons de cœur dur.

La bosonisation [165, 166] se fait en utilisant les formules (II.54) de la transformation de Jordan-Wigner et donne un hamiltonien $\mathcal{H} = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_a$ décomposé selon les modes symétrique et antisymétrique définis par $\phi_{s/a} = [\phi_1 \pm \phi_2] / \sqrt{2}$ (et de même pour les $\theta_{a/s}$). On obtient

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_s &= \int \frac{dx}{2\pi} \left[u_s K_s (\pi \Pi_s)^2 + \frac{u_s}{K_s} (\nabla \phi_s)^2 \right] + \frac{2g_2}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos(\sqrt{8}\phi_s) \\ \mathcal{H}_a &= \int \frac{dx}{2\pi} \left[u_a K_a (\pi \Pi_a)^2 + \frac{u_a}{K_a} (\nabla \phi_a)^2 \right] \\ &+ \frac{2g_1}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos(\sqrt{2}\theta_a) + \frac{2g_3}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos(\sqrt{8}\phi_a), \end{aligned} \quad (\text{II.84})$$

avec pour les couplages et les paramètres de Luttinger dans la limite $aJ_z^\perp \ll 2\pi u/K$:

$$u_s = u \left(1 + \frac{KaJ_z^\perp}{2\pi u} \right), \quad K_s = K \left(1 - \frac{KaJ_z^\perp}{2\pi u} \right) \quad (\text{II.85})$$

$$u_a = u \left(1 - \frac{KaJ_z^\perp}{2\pi u} \right), \quad K_a = K \left(1 + \frac{KaJ_z^\perp}{2\pi u} \right) \quad (\text{II.86})$$

$$g_1 = \pi a J_{xy}^\perp, \quad g_2 = g_3 = a J_z^\perp. \quad (\text{II.87})$$

Remarquez qu'il n'y a pas d'hypothèses sur J_{xy} et J_z qu'on peut en particulier prendre égaux. La partie symétrique est gappée si $K_s < 1$ d'après l'analyse de l'hamiltonien de sine-Gordon. Si $K_s > 1$, il y aura un couplage critique J_c^\perp au-delà duquel le gap s'ouvre.

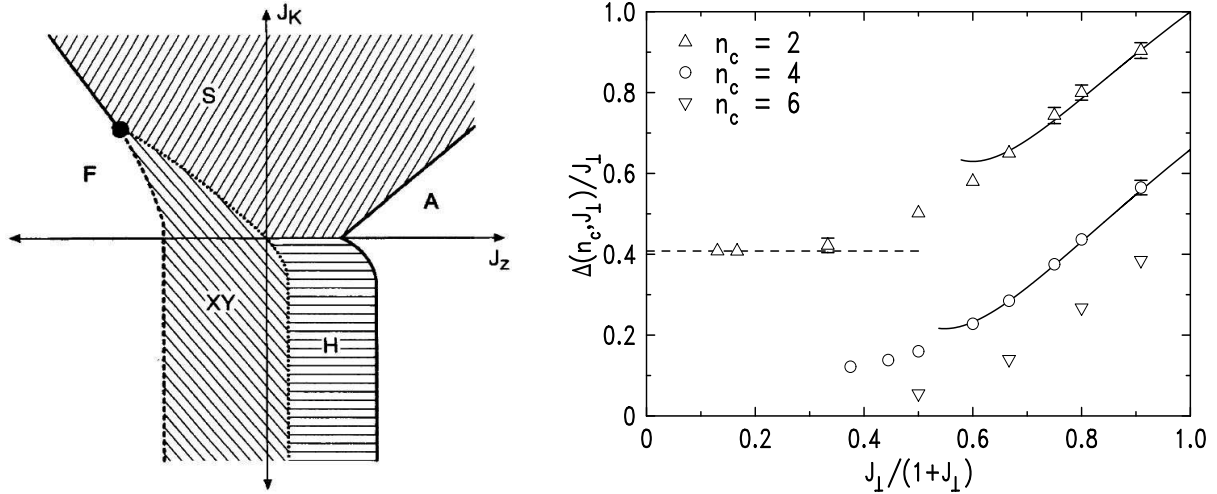


FIG. II.13: À gauche : diagramme de phase de deux chaînes de spins-1/2 couplées avec $J_z^\perp = J_{xy}^\perp \equiv J_K$. Les phases A et F sont les phases (anti)ferromagnétiques, la phase S est la phase liquide de spin des échelles isotropes, la phase H est la phase de Haldane (équivalente à une chaîne de spin-1) et enfin XY est la phase liquide de Luttinger. D'après Strong et Millis [165]. À droite : calcul Monte-Carlo montrant l'ouverture du gap avec J_\perp . D'après Greven et al. [167].

En ce qui concerne le mode antisymétrique, il y a une compétition entre les deux termes en cosinus : on montre que si $K_a < 1/2$, ϕ_a est gelé tandis que si $K_a > 1/2$ alors θ_a est gelé. Dans tous les cas, le mode antisymétrique est gappé. Pour des chaînes de Heisenberg couplées antiferromagnétiquement, comme $K = 1/2$, on aura $\langle \phi_s \rangle = \pi/\sqrt{8}$ et $\langle \theta \rangle = \pi/\sqrt{2}$ dès lors que $J_z^\perp \neq 0$. Le système acquiert donc un gap de spin avec des corrélations qui décroissent exponentiellement donnant une phase liquide de spin. Le diagramme de phase est donné sur la figure II.13. Numériquement, le gap de spin a été calculé par DMRG pour le modèle de Heisenberg isotrope (voir figure I.8). On peut donner également une image de type Resonating Valence Bond du fondamental en calculant les configurations de dimères qui ont un grand poids dans le fondamental [65].

Le cas général avec N chaînes [81, 82] a été abordé par bosonisation montrant que l'ouverture du gap dépendait de la parité du nombre de chaînes et du couplage inter-chaînes J^\perp en accord avec le théorème de Oshikawa-Yamanaka-Affleck. Les calculs numériques par DMRG et Monte-Carlo quantique confirme ce résultat (voir figure I.8).

2.2 Échelles dopées

On aborde maintenant le cas des échelles de Hubbard et t-J. Notons qu'à la différence d'une chaîne, deux particules peuvent s'échanger sans interagir dans une échelle de Hubbard si bien que la statistique va jouer un rôle plus important. Le premier modèle a été généralement abordé en couplage faible avec traitement par le groupe de renormalisation perturbatif. On trouve pour des interactions répulsives une phase liquide de Luther-Emery à faible dopage en trous qui est également présente dans les simulations des modèles Hubbard et t-J. C'est le point fixe attractif du modèle qui de plus a une large phase supraconductrice de type d -

wave. La situation est donc très différente du cas de la chaîne de Hubbard avec interactions répulsives. Écrivons le modèle de Hubbard étendu pour une échelle de spin avec des termes de sauts anisotropes t_{\perp} et t_{\parallel}

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -t_{\parallel} \sum_{i,\sigma,l=1,2} \left[c_{i+1,l,\sigma}^{\dagger} c_{i,l,\sigma} + h.c. \right] - t_{\perp} \sum_{i,\sigma} \left[c_{i+1,1,\sigma}^{\dagger} c_{i,2,\sigma} + h.c. \right] \\ & + U \sum_{i,l=1,2} n_{i,l\uparrow} n_{i,l\downarrow} + V \sum_{i,l=1,2} n_{i+1,l} n_{i,l}. \end{aligned} \quad (\text{II.88})$$

Dans la suite on travaille à remplissage en électrons fixé, noté n , comme c'est le cas dans les composés. Il est facile de diagonaliser la partie cinétique donnant les bandes $\mathcal{E}_{0,\pi}(k) = -2t_{\parallel} \cos k \mp t_{\perp}$ et de déterminer les vecteurs-d'onde de Fermi en fonction de la densité pour le système libre (voir figure II.14) :

$$k_F^0 + k_F^{\pi} = \pi n \quad \text{et} \quad \sin \left(\frac{k_F^0 - k_F^{\pi}}{2} \right) = \frac{t_{\perp}}{2t_{\parallel} \sin(\pi n/2)}, \quad (\text{II.89})$$

lorsqu'on a 4 points de Fermi. La première relation est simplement le théorème de Luttinger appliqué aux échelles.

2.2.1 Approche de couplage faible

Dans cette approche [168–174], on commence par diagonaliser la partie sans interactions puis on branche perturbativement les interactions. On va donc avoir quatre champs pour décrire la physique de basse énergie : $\phi_{0\uparrow}, \phi_{0\downarrow}, \phi_{\pi\uparrow}$ et $\phi_{\pi\downarrow}$. Au cours de la bosonisation, il est utile d'introduire les champs de spin et de charge $\phi_{c/s,k_y}$ ainsi que leur combinaisons symétrique et antisymétrique $\phi_{c/s\pm}$ définis par

$$\phi_{c/s,k_y} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{k_y,\uparrow} \pm \phi_{k_y,\downarrow}] \quad \text{et} \quad \phi_{c/s\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{c/s,0} \pm \phi_{c/s,\pi}]. \quad (\text{II.90})$$

Dans le cas général, la première chose à regarder est le nombre de points de Fermi dans le système. En effet, on peut en avoir deux ou quatre. S'il y en a deux, on est ramené à la physique d'une chaîne qui est génériquement décrite par un liquide de Luttinger C1S1 pour interactions répulsives. Cette région du diagramme de phase correspond à un fort t_{\perp} ou un faible remplissage (voir figure II.14). De l'autre côté, on a toujours quatre points de Fermi. Dans ce cas, l'écriture du hamiltonien bosonisé, puis la résolution du flot du groupe de renormalisation pour $U > 0, V = 0$ montre la prédominance d'une phase type liquide de Luther-Emery C1S0 avec comme seul secteur non gappé le secteur de charge symétrique $c+$ [168]. D'autres phases peuvent apparaître près de la ligne de transition avec la phase C1S1 lorsque les vitesses de Fermi deviennent très différentes (phases C2S1 et C2S2 qui ont une étendue limitée). Enfin, il faut tenir compte des effets de commensurabilité du remplissage en électrons. Au demi-remplissage, on aura soit un isolant de Mott de type C0S0 (phase liquide de spin dont l'hamiltonien effectif est celui de Heisenberg discuté ci-avant), soit un isolant de bandes C0S0 suivant qu'on se situe au-dessus ou en dessous de $t_{\perp} = 2t_{\parallel}$. Lorsque la bande du bas sera à demi-remplie ($k_F^0 = \pi/2$), on va avoir soit une phase C1S2 soit une phase C0S1 suivant le nombre de points de Fermi.

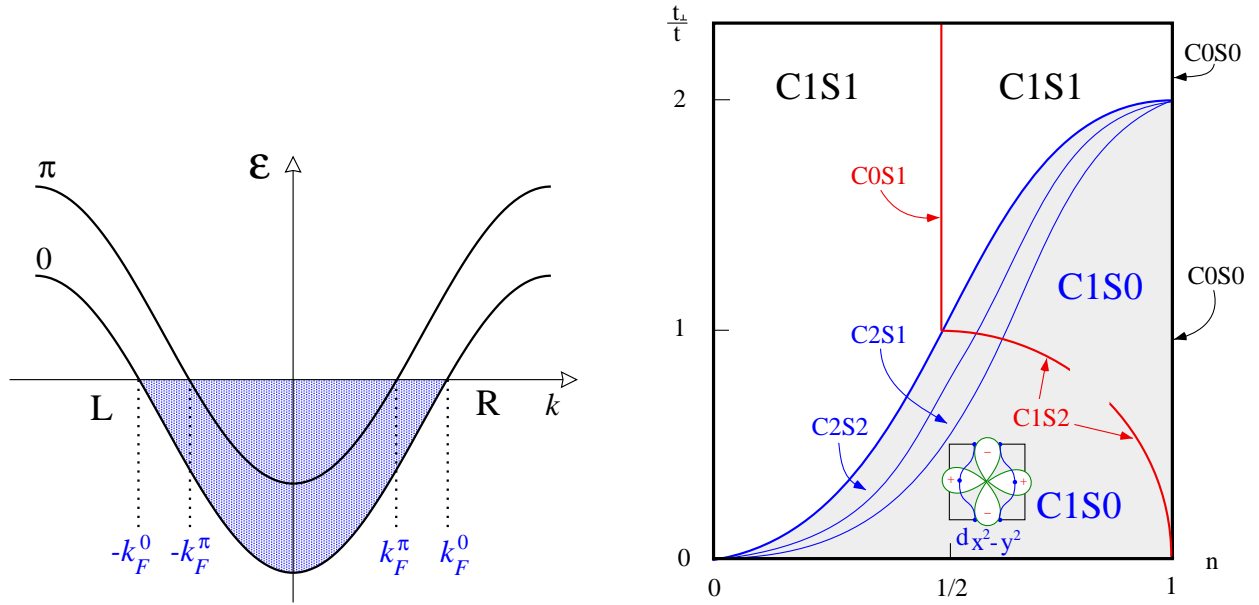


FIG. II.14: À gauche : les deux bandes d'une échelle pour $t_{\perp} < 2t_{\parallel}$: on a quatre points de Fermi avec des vitesses de Fermi qui sont génériquement assez proches. À droite : le diagramme de phase en couplage faible $U \ll t$ d'une échelle de Hubbard en fonction de t_{\perp}/t_{\parallel} et de la densité électronique n . Voir texte pour les différentes phases. D'après Balents et Fisher [168].

Focalisons-nous maintenant sur la phase la plus intéressante, c'est-à-dire celle de Luther-Emery C1S0 pour la décrire plus précisément. On est dans la situation où la différence de vitesses de Fermi entre les bandes 0 et π n'est pas pertinente et on les prendra donc égales (notées v_F) dans la suite. De plus, t_{\perp} va introduire un terme $-\frac{2t_{\perp}}{\pi} \int dx \nabla \phi_{c-}$ qui, en dehors d'effets de commensurabilités va tuer la pertinence des termes en cosinus contenant ϕ_{c-} . On peut montrer [174] que dans ce cas, les termes de type sine-Gordon qui proviennent des interactions se décomposent en deux contributions : d'une part celle des diffusions vers l'avant à l'intérieur des chaînes

$$\frac{g_2}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos 2\theta_{c-} [\cos 2\phi_{s-} + \cos 2\theta_{s-}] \quad (\text{II.91})$$

d'autre part celle des diffusions vers l'arrière entre chaînes

$$\frac{g_1}{(2\pi\alpha)^2} \int dx [\cos 2\phi_{s+} (\cos 2\theta_{c-} + \cos 2\phi_{s-} + \cos 2\theta_{s-}) - \cos 2\theta_{c-} \cos 2\theta_{s-}]. \quad (\text{II.92})$$

Si, pour plus de généralité, on réintroduit le terme V dans l'hamiltonien, le paramètre de Luttinger du secteur de charge symétrique vérifie

$$K_{c+} = \left[\frac{2\pi v_F - (2g_2 - g_1)}{2\pi v_F + (2g_2 - g_1)} \right]^{1/2}, \quad (\text{II.93})$$

avec

$$g_1 = \alpha [U + 2V \cos(2k_F a)] \quad (\text{II.94})$$

$$2g_2 - g_1 = \alpha [U + 2V(2 - \cos(2k_F a))]. \quad (\text{II.95})$$

L'analyse du flot de renormalisation permet de construire le diagramme de phase de couplage faible dans cette région. Il est reproduit sur la figure II.15 et montre la compétition entre quatre phases. Ces phases sont associées aux paramètres d'ordre qui ne sont pas tués par les fortes fluctuations de spin. Le secteur de charge symétrique a un hamiltonien quadratique donc ce mode restera fluctuant. Tous les autres secteurs sont gappés (voir le tableau II.2) si bien que toutes les fonctions de corrélations seront gouvernées par le seul paramètre K_{c+} . On peut déterminer les paramètres d'ordre associés aux fluctuations dominantes dans chacune des phases :

$$\mathcal{O}_{\text{SC}^d} = \Delta_{i1,i2} \propto e^{-i\theta_{c+}} \sin \phi_{s+} \sin \phi_{s-} \quad (\text{II.96})$$

$$\mathcal{O}_{\text{SC}^s} = \Delta_{i1,i1} \propto e^{-i\theta_{c-}} \cos \phi_{s+} \cos \phi_{s-} \quad (\text{II.97})$$

$$\mathcal{O}_{\text{CDW}^{2k_F}} = n_{i1} - n_{i2} \propto e^{i\phi_{c+}} \cos \phi_{s+} \sin \theta_{s-} \quad (\text{II.98})$$

$$\mathcal{O}_{\text{OAF}^{2k_F}} = j_{\perp,i} \propto e^{i\phi_{c+}} \sin \phi_{s+} \cos \theta_{s-} \quad (\text{II.99})$$

et les vecteurs d'ondes q associés avec $2k_F = k_F^0 + k_F^\pi = \pi n$. $\Delta_{il,jp} = c_{i\uparrow} c_{jp\downarrow} - c_{jp\uparrow} c_{i\downarrow}$ est l'opérateur qui crée un singulet entre les sites (i, l) et (j, p) . n_{ip} est l'opérateur de densité électronique sur la chaîne p . $j_{\perp,i} = i \sum_{\sigma} (c_{i1\sigma}^\dagger c_{i2\sigma} - c_{i2\sigma}^\dagger c_{i1\sigma})$ est le courant transverse entre les chaînes (sur les barreaux). Chacun de ces ordres est schématisé sur la figure II.15. Si on se limite au cas $V = 0$, seules deux phases sont possibles suivant que $U < 0$ (phase SC^s) ou $U > 0$ (phase SC^d). Il est d'ailleurs remarquable que le modèle de Hubbard sur une échelle donne génériquement de la supraconductivité s ou d que les interactions soient attractives ou répulsives. Dans la phase SC^d , on a reporté le comportement des paramètres d'ordre dans le tableau II.3. Précisons ce que l'on entend par paramètre d'ordre d -wave. En effet, comme la symétrie de rotation C^{4v} n'est pas une symétrie du réseau, on n'a pas un ordre purement d -wave mais une superposition s -wave (isotrope) et d -wave. Sur le réseau de Brillouin, cette symétrie correspond à un changement de signe du paramètre d'ordre pour une rotation de 90° (cf figure II.14). La conséquence sur les corrélations dans l'espace réel est que, en notant l'opérateur de création d'une paire singulet sur un barreau Δ_b^\dagger et selon un montant Δ_m^\dagger , on aura un signe différent entre les corrélations $\langle \Delta_b(x) \Delta_b^\dagger(0) \rangle$, $\langle \Delta_m(x) \Delta_m^\dagger(0) \rangle$ d'un côté et $\langle \Delta_b(x) \Delta_m^\dagger(0) \rangle$ de l'autre. En effet, les formes bosonisées de ces opérateurs après simplifications vérifient

$$\Delta_{m=1,2}(x) \propto \sin \left(\frac{k_F^\pi - k_F^0}{2} \right) \Delta_b(x), \quad (\text{II.100})$$

et comme $k_F^\pi < k_F^0$, on a le résultat. En compétition avec ces fluctuations supraconductrices, on trouve les fluctuations de charge. Le comportement des corrélations de l'opérateur $n(x)$ contient des termes à $q = 2k_F$ qui sont en fait exponentiels dans cette limite de basse énergie. Cependant, l'opérateur $n^2(x)$ va lui contenir des contributions algébriques

$$\mathcal{O}_{\text{CDW}^{4k_F}} = n^2(x) \propto e^{i2\phi_{c+}} \quad (\text{II.101})$$

associées au vecteur-d'onde $4k_F = 2\pi n$ et avec un exposant $2K_{c+}$. Si on réintègre perturbativement des processus de haute énergie dans les corrélations $\langle n(x)n(0) \rangle$ (voir chapitre VI), on trouve qu'elles doivent contenir des termes similaires en $4k_F$. Ceux-ci vont dominer à longue portée si $K_{c+} < 1/2$.

Sector	SC^d	SC^s	CDW^{2k_F}	OAF^{2k_F}
$s+$	$\langle \phi_{s+} \rangle = \frac{\pi}{2}$	$\langle \phi_{s+} \rangle = 0$	$\langle \phi_{s+} \rangle = 0$	$\langle \phi_{s+} \rangle = \frac{\pi}{2}$
$s-$	$\langle \phi_{s-} \rangle = \frac{\pi}{2}$	$\langle \phi_{s-} \rangle = 0$	$\langle \theta_{s-} \rangle = \frac{\pi}{2}$	$\langle \theta_{s-} \rangle = 0$

TAB. II.2: Champs de spin gelés suivant les phases dans l'approche de couplage faible. Pour la charge, on a $\langle \theta_{c-} \rangle = 0$ et le secteur $c+$ n'est pas gappé.

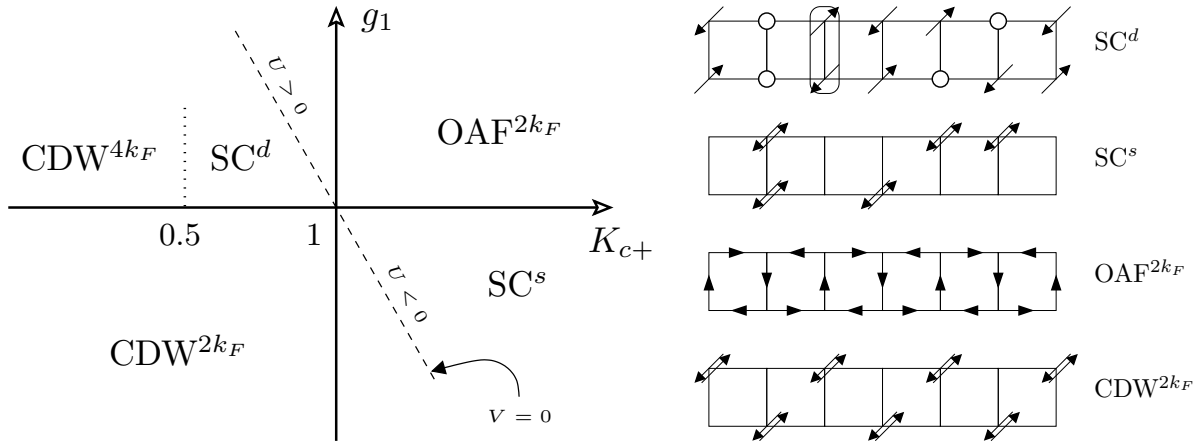


FIG. II.15: Diagramme de phase en couplage faible d'une échelle de Hubbard étendue dans la région C1S0 de la figure II.14. La ligne $V = 0$ correspond au modèle de Hubbard. La phase CDW^{4k_F} a des fluctuations de charge dominantes. Les phases OAF et CDW^{4k_F} sont représentées au demi-remplissage pour $2k_F = \pi$ par simplicité.

Order	Exponent	Wave-vector
$S^{x,y,z}$	exp.	$2k_F$
SC^s	$1/(2K_{c+})$	0
SC^d	$1/(2K_{c+})$	0
CDW^{2k_F}	exp.	$2k_F$
CDW^{4k_F}	$2K_{c+}$	$4k_F$
OAF^{2k_F}	exp.	$2k_F$

TAB. II.3: Comportement des paramètres d'ordre et vecteur d'onde associé dans la phase C1S0 avec $K_{c+} < 1, g_1 > 0$ (exp. signifie corrélations exponentielles et $2k_F = \pi n = \pi(1 - \delta)$).

Signalons pour terminer que le modèle de Hubbard sur les échelles comporte des symétries émergentes qui font qu'elles peuvent être décrites par les modèles intégrables de Gross-Neveu $SO(8)$ au demi-remplissage [175] et $SO(6)$ pour un remplissage générique [175, 176]. De part leur nature intégrable, ces modèles permettent une détermination analytique des rapports des gaps des excitations élémentaires (gap de spin, gap de charge,...) ainsi que du comportement de certains paramètres de Luttinger.

2.2.2 Résultats numériques

Toutes ces prédictions mises en place au cours de l'étude du modèle ont été au fur et à mesure confrontées aux résultats numériques, principalement par diagonalisation exacte et DMRG. L'étude numérique du modèle de Hubbard isotrope confirme le comportement attendu pour les différentes corrélations associées aux paramètres d'ordre précédemment discutés. La phase à $U < 0$ n'a pas ou très peu fait l'objet d'étude car elle présente peu d'intérêt physiquement. Le modèle t-J a été lui aussi énormément utilisé pour se placer dans la limite de couplage fort et son diagramme de phase qualitatif sur la base de nombreux résultats numériques est donné sur la figure II.17. Il met en évidence une large phase avec prédominance des fluctuations d -wave. Pour J/t petits (très fortes interactions), on observe que $K_{c+} < 1/2$ si bien que ce sont les ondes de densité de charge qui dominent alors. Pour les remplissages commensurables en électrons $n = 0.5$ et 0.75 , des phases isolantes de type ondes de densité de charge ont été identifiées [137]. On aura l'occasion de revenir sur la nature de ces phases au chapitre VI. Enfin, dans la limite de très faible densité en trous $n \rightarrow 1$ ou $\delta \rightarrow 0$, les paires de trous sont essentiellement des bosons libres sans interactions qui se propagent à une dimension et on aura donc $K_{c+} = 1$ puisque les corrélations de paires sont alors simplement la fonction de Green de bosons de cœur dur libres qui varie en $1/\sqrt{x}$ d'après (II.23). Un mapping des échelles dopées vers un modèle effectif 1D de bosons de cœur dur [180] a d'ailleurs été proposé et montre une tendance des paires à se repousser, même dans la phase supraconductrice.

Enfin, le modèle de Hubbard peut être étendu en prenant en compte les interactions répulsives aux seconds voisins V le long des montants mais aussi entre les montants (noté V_{\perp}) ainsi que des interactions antiferromagnétiques J_{\parallel} et J_{\perp} . Il a été montré numériquement [181, 182] et en relation avec des résultats de bosonisation qu'on pouvait y stabiliser la phase OAF qui est remarquable par le fait qu'elle brise spontanément l'invariance par renversement dans le temps.

2.3 Une brève discussion sur le couplage entre chaînes ou entre échelles

On aborde ici la présentation de quelques résultats et remarques générales sur la prise en compte du couplage entre liquides de Luttinger [183–185]. On se limite à une discussion qualitative. Tout d'abord, le liquide de Luttinger sera caractérisé par une échelle d'énergie grande qui est sa largeur de bande ainsi que par les paramètres de Luttinger qui intègrent l'information sur les interactions intra-chaînes. Lorsqu'on couple les liquides de Luttinger avec un couplage faible, celui-ci introduit une nouvelle échelle d'énergie. À haute température, ce couplage n'est pas pertinent et les le comportement liquide de Luttinger est observé. À

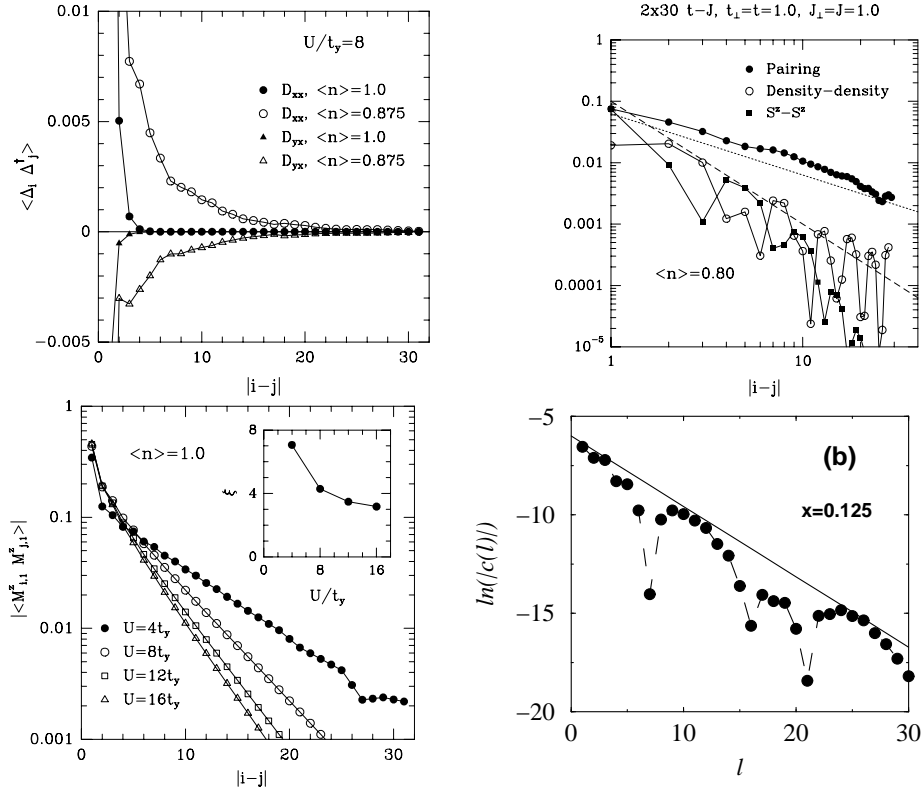


FIG. II.16: Comportement de quelques fonctions de corrélation obtenues par DMRG dans la phase C1S0 et SC^d d'échelles de Hubbard dopées. En haut : symétrie d-wave du paramètre d'ordre supraconducteur et corrélations algébriques de charge et de paires. En bas : les corrélations de spin et de courant transverse sont exponentielles. D'après les références [177–179].

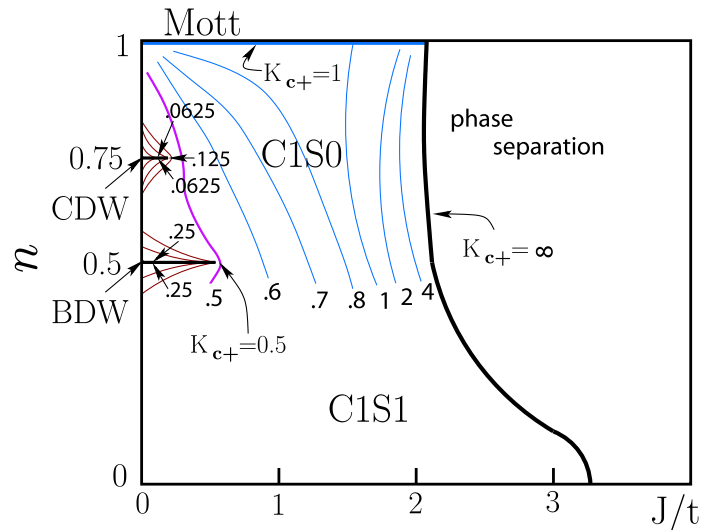


FIG. II.17: Diagramme de phase qualitatif sur la base des résultats numériques de l'échelle t - J en fonction de J/t et de la densité électronique n . CDW et BDW représentent les phases isolantes commensurables. Figure adaptée de White et al. [137].

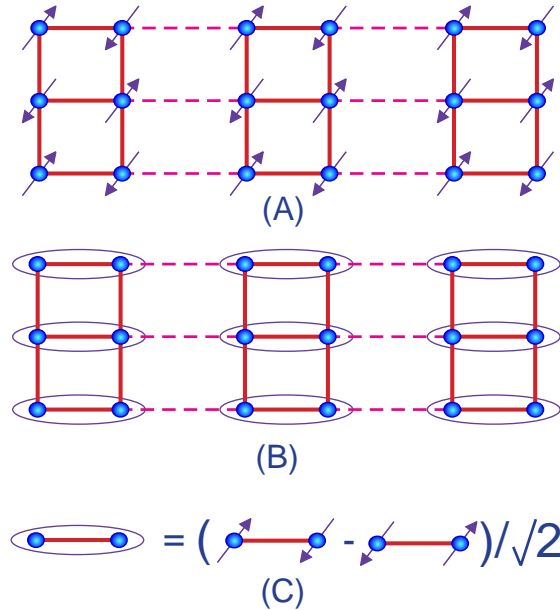


FIG. II.18: Transition de déconfinement entre un état VBS et un état de Néel pour un réseau bidimensionnel d'échelles couplées. D'après Sachdev [186].

basse température, le couplage devient pertinent et on aura un crossover vers un système bi ou tridimensionnel. C'est ce qu'on appelle le crossover dimensionnel. Si maintenant on imagine qu'on augmente le couplage entre liquide de Luttinger de sorte qu'il soit comparable aux échelles d'énergie à l'intérieur du liquide de Luttinger, il va y avoir une transition de phase quantique pour une valeur critique du couplage entre le comportement type liquide de Luttinger à faible couplage et une phase en interaction forte bi ou tridimensionnelle qui sort a priori de la description par la classe des liquides de Luttinger. On appelle cette transition une transition de déconfinement, au sens où les électrons ne sont plus confinés à une dimension. Dans la mesure où les phases en interaction forte sont très difficiles à décrire à deux ou trois dimensions, il en va de même de ce genre de transition. Un exemple dans le cadre des échelles de spins est la transition lorsqu'on couple des échelles de spin antiferromagnétiquement, une transition de phase apparaît entre la phase VBS d'échelles faiblement couplées et la phase de Néel du réseau carré pour $J_{\text{inter}} = J$ (cf figure II.18).

Revenons à la question du crossover dimensionnel dans lequel la physique du liquide de Luttinger est un bon point de départ à l'effet du couplage. Une première chose est que le couplage va être renormalisé par les interactions intra-liquide de Luttinger et ce de telle sorte que, quelles que soient les interactions, cette échelle d'énergie est diminuée. Par exemple, le terme de saut entre liquide de Luttinger t_{inter} est renormalisé [187–189]. Les interactions renforcent donc l'anisotropie du système. Lorsque les couplages entre liquide de Luttinger sont branchés (saut, interactions densité-densité, . . .), on s'attend en premier à une transition vers un état de type liquide de Fermi à basse température si le terme de saut t_{inter} domine. En effet, les termes d'échange et de saut de paires sont en $t_{\text{inter}}^2/\Delta$, avec Δ l'énergie de pairing. Cependant, les fluctuations de spins et de paires ont une décroissance qui évolue différemment avec les paramètres de Luttinger que la fonction de Green à une particule. Suivant K_c et K_s , ces fluctuations peuvent s'ordonner préférentiellement donnant une transition à basse

température vers une phase antiferromagnétique (SDW) ou supraconductrices. C'est bien ce qui est observé expérimentalement sur les diagrammes de phase expérimentaux comme celui de la figure I.6. Enfin, si des excitations sont gappées comme le spin dans un liquide de Luther-Emery, les sauts à une particules qui nécessitent de briser une paire sont très défavorisés, on aura plutôt tendance à faire sauter les paires, établissant ainsi un couplage effectif Josephson. Dans ce cas, on peut évaluer la température de la transition qui varie en gros comme $t_{\text{inter}}^2/\Delta_s$ avec Δ_s le gap de spin. Des méthodes RPA plus évoluées peuvent être développées pour évaluer la température critique d'un réseau d'échelle bidimensionnel [190].

3 Conclusion partielle

Ce chapitre présentait les résultats connus sur les systèmes quantiques à une dimension. On a vu qu'il existait une approche générique sous le nom de théorie du liquide de Luttinger. Grâce à elle, la détermination des diagrammes de phase de ces systèmes est grandement simplifiée car il suffit en général d'étudier les instabilités possibles du liquide de Luttinger et de calculer les paramètres de Luttinger du modèle effectif pour construire le diagramme de phase. Or, si ces paramètres et instabilités peuvent être dans certains cas calculés exactement pour des modèles intégrables ou analytiquement dans le régime perturbatif, il faut en général avoir recours aux méthodes numériques pour déterminer les différentes phases réalisées. Au cours de cette thèse, on a essayé d'utiliser la complémentarité des approches numériques et de bosonisation afin de décrire au mieux la physique des systèmes que l'on a abordés.

Chapitre III

Méthodes numériques

Les méthodes numériques ont été considérablement développées [191] dans l'étude des fermions fortement corrélés en raison du peu de résultats analytiques (notamment en dimension 2) et grâce à l'augmentation de la puissance des ordinateurs. Leur rôle s'étend de la compréhension des modèles théoriques, parfois abstraits, jusqu'au calcul de diagrammes de phases non perturbatifs et la comparaison directe avec les courbes expérimentales afin d'en extraire par exemple des paramètres microscopiques. Il existe de nombreux algorithmes permettant d'aborder le problème à N-corps quantique, chacun ayant ses avantages et ses inconvénients. Pour ce qui est des techniques de diagonalisation exacte et de groupe de renormalisation de la matrice-densité (abrégé en anglais et dans la suite en DMRG) utilisées au cours de cette thèse, elles reposent essentiellement sur une résolution variationnelle de l'équation de Schrödinger

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{III.1}$$

pour un hamiltonien quelconque \mathcal{H} défini sur un réseau. L'objectif étant de pouvoir accéder à un grand nombre d'observables de la physique de basse énergie à partir de la connaissance du fondamental $|\psi_0\rangle$ et des premiers états excités. Si la donnée du problème paraît simple puisqu'il s'agit essentiellement de déterminer certains vecteurs propres et valeurs propres de l'équation (III.1), on se rend vite compte de la présence d'une contrainte difficilement contournable : la croissance exponentielle de l'espace de Hilbert avec le nombre de sites du réseau. Prenons l'exemple du modèle de Heisenberg, les deux états \uparrow, \downarrow sont possibles en chaque site si bien que l'espace de Hilbert croît comme 2^N , avec N le nombre de sites du réseau. C'est cette contrainte qui a motivé le développement des algorithmes avec schématiquement, l'utilisation des symétries de \mathcal{H} pour la diagonalisation exacte et la troncation de l'espace de Hilbert pour le DMRG. De manière surprenante, ce sont plutôt des développements fondés sur des idées physiques qui ont été les plus déterminants.

Ce chapitre¹ a pour but de présenter les algorithmes mais aussi leur utilisation dont on verra d'ailleurs des applications dans les quatre chapitres suivant. On discutera dans un premier temps la méthode de la diagonalisation exacte dont on verra qu'elle donne accès à presque n'importe quelle observable à température nulle mais reste limitée par la taille des systèmes pouvant être étudiés (typiquement 40 sites au maximum). On abordera ensuite le DMRG qui permet lui de faire des mesures sur des systèmes plus grands mais reste limité à des réseaux quasi-unidimensionnel. Enfin, il est important de mentionner l'existence d'autres méthodes très puissantes, avec leurs nombreuses variantes respectives, plutôt fondées sur le

¹On a essayé de reporter les aspects les plus techniques à la fin de chacune des deux parties.

calcul de la fonction de Green du système. En particulier, le Monte-Carlo quantique [192–195] permet des calculs à température nulle ou finie mais souffre du « problème de signe » encore non résolu pour la plupart des systèmes magnétiques frustrés et des systèmes dopés qui nous intéressent plus particulièrement dans cette thèse. Notons enfin l’existence de la théorie du champ moyen dynamique (DMFT) [16] qui repose sur l’utilisation de ces méthodes numériques dans le cadre d’une théorie champ moyen dynamique qui traite particulièrement bien la physique à haute énergie et la transition de Mott.

1 La Diagonalisation Exacte

La diagonalisation exacte, comme son nom l’indique, consiste à diagonaliser un hamiltonien \mathcal{H} pour obtenir valeurs propres et vecteurs propres. Il existe des algorithmes d’algèbre linéaire qui exécutent cette tâche pour des matrices carrées pleines quelconques. Si $N_{\mathcal{H}}$ est la dimension de l’espace de Hilbert, ces algorithmes prennent un temps proportionnel à $N_{\mathcal{H}}^3$. D’autre part, la mémoire vive requise pour stocker la matrice est $8N_{\mathcal{H}}^2$ octets², soit 800Mo pour $N_{\mathcal{H}} = 10000$ mais déjà 20Go pour $N_{\mathcal{H}} = 50000$ qui est à peu près ce qu’on peut faire de plus gros. Si ces algorithmes donnent accès à l’ensemble du spectre, ce qui peut être utile pour les observables faisant intervenir l’ensemble du spectre (statistiques spectrales, température finie, . . .), les physiciens ne s’intéressent le plus souvent qu’aux états de plus basse énergie. De plus, on se rend compte que les matrices correspondant aux modèles d’électrons fortement corrélés avec des interactions à courte portée sont souvent très creuses (la plupart des éléments sont nuls). Ceci peut se voir facilement sur l’hamiltonien de Heisenberg pour lequel les termes hors-diagonaux S^+S^- vont générer pour chaque configuration au maximum $\#_{\text{liens}}$ termes (en notant $\#_{\text{liens}}$ le nombre de liens) soit pour toute la matrice un nombre d’éléments non nul de l’ordre de $\#_{\text{liens}}N_{\mathcal{H}} \ll N_{\mathcal{H}}^2$. Dans ce cas, il existe des méthodes de diagonalisation itérative très rapides qui permettent de traiter des espaces de Hilbert contenant près de 10^9 états. Ces méthodes itératives reposent sur une idée variationnelle simple qui est de regarder la quantité :

$$r(x) = \frac{\langle x | \mathcal{H} | x \rangle}{\langle x | x \rangle} \quad (\text{III.2})$$

pour un vecteur $|x\rangle$ quelconque de l’espace de Hilbert. Puisque la plus petite valeur propre E_{\min} de \mathcal{H} est telle que $E_{\min} \leq r(x)$, on cherche à construire un sous-espace de l’espace de Hilbert qui contienne des vecteurs qui se rapprochent le plus possible du fondamental. Pour cela, partons d’un vecteur quelconque $|x\rangle$ et agrandissons le sous-espace en suivant la direction donnée par le gradient³ (en notant que \mathcal{H} est hermitien⁴) :

$$\nabla r(x) = \frac{2}{\langle x | x \rangle} (\mathcal{H} | x \rangle - r(x) | x \rangle), \quad (\text{III.3})$$

²Sans compter les tableaux nécessaires aux routines.

³On a une convergence vers les valeurs extrêmes du spectre mais on ne s’intéresse qu’au bas du spectre en physique.

⁴Il existe aussi des méthodes itératives pour des matrices creuses non hermitiennes [196], ce dont on peut aussi avoir besoin dans certains problèmes physiques.

c'est-à-dire le sous-espace $\{|x\rangle, \mathcal{H}|x\rangle\}$. On trouve nécessairement des valeurs de $r(x)$ plus petites dans ce sous-espace. En continuant jusqu'à n itérations, on crée le sous-espace dit de Krylov $\{|x\rangle, \mathcal{H}|x\rangle, \dots, \mathcal{H}^n|x\rangle\}$. C'est dans ce sous-espace que les algorithmes recherchent le fondamental, le plus simple étant la méthode des puissances dans laquelle on ne conserve que le dernier état généré⁵ $(\mathcal{H} - \text{cste})^n|x\rangle$. Dans ce dernier état, c'est naturellement le poids sur le fondamental qui l'emporte et ce, exponentiellement vite avec le nombre d'itérations n . On voit également qu'il faut initialement un vecteur $|x\rangle$ non orthogonal à $|\psi_0\rangle$ si bien qu'on le choisit en général aléatoire. On présentera plus particulièrement dans cette section l'algorithme de Lanczos et celui de Davidson qui améliorent tous deux significativement la convergence de la méthode des puissances, en s'inspirant des très bonnes revues [191, 197, 198] et thèses en faisant usage [189, 199, 200]. L'algorithme de Lanczos est majoritairement utilisé en diagonalisation exacte tandis que celui de Davidson est préférentiellement utilisé en DMRG.

1.1 Algorithme de Lanczos

L'algorithme de Lanczos [201, 202] construit itérativement une base orthonormée de l'espace de Krylov dans laquelle l'hamiltonien a une représentation tridiagonale qui, on le verra, a de nombreux avantages pour le calcul des propriétés dynamiques. On peut montrer [201, 203] que la convergence vers le fondamental est exponentielle avec n et plus rapide que pour la méthode des puissances. L'algorithme est construit comme suit : on prend un vecteur aléatoire et normé $|0\rangle$ et on lui applique \mathcal{H} pour créer $\mathcal{H}|0\rangle$. L'état $|1'\rangle = \mathcal{H}|0\rangle - a_0|0\rangle$ est orthogonal à $|0\rangle$ si on choisit $a_0 = \langle 0|\mathcal{H}|0\rangle$. On peut ensuite le normer en posant $b_1^2 = \langle 1'|1'\rangle$ et $|1\rangle = 1/b_1|1'\rangle$. Ainsi, on a

$$\mathcal{H}|0\rangle = a_0|0\rangle + b_1|1\rangle. \quad (\text{III.4})$$

On construit ensuite $|2'\rangle = \mathcal{H}|1\rangle - b_1|0\rangle - a_1|1\rangle$ avec $a_1 = \langle 1|\mathcal{H}|1\rangle$. $|2'\rangle$ est donc orthogonal à $|0\rangle$ et $|1\rangle$. On le normalise en posant $b_2^2 = \langle 2'|2'\rangle$ et $|2\rangle = |2'\rangle/b_2$, ce qui donne

$$\mathcal{H}|1\rangle = b_1|0\rangle + a_1|1\rangle + b_2|2\rangle. \quad (\text{III.5})$$

Ainsi de suite, connaissant $|i\rangle, |i-1\rangle, a_i = \langle i|\mathcal{H}|i\rangle, b_i$ et \mathcal{H} , on peut construire

$$|i+1'\rangle = \mathcal{H}|i\rangle - a_i|i\rangle - b_i|i-1\rangle \quad (\text{III.6})$$

qui est orthogonal⁶ à $|i-1\rangle$ et $|i\rangle$. Enfin, on normalise $|i+1'\rangle$ en $|i+1\rangle = |i+1'\rangle/b_{i+1}$ avec le facteur de normalisation $b_{i+1}^2 = \langle i+1'|i+1'\rangle$. On en déduit aussi $a_{i+1} = \langle i+1|\mathcal{H}|i+1\rangle$, si bien qu'au bout de n itérations, la représentation \mathcal{H}_n de l'hamiltonien dans sous-espace engendré par les $\{|i\rangle\}_{0 \leq i \leq n}$ a la forme tridiagonale

$$\mathcal{H}_n = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & \dots & 0 \\ b_1 & a_1 & b_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & b_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1} & b_n \\ 0 & \dots & 0 & b_n & a_n \end{pmatrix}. \quad (\text{III.7})$$

⁵La constante sert à décaler le spectre vers le bas pour que E_{\min} domine en valeur absolue.

⁶On peut aussi vérifier que tous les vecteurs $\{|j\rangle\}_{0 \leq j \leq i+1}$ sont bien orthonormaux.

La diagonalisation de cette matrice \mathcal{H}_n est alors faite avec une librairie standard ce qui donne en particulier l'énergie variationnelle $E_0(n)$. En pratique, un nombre d'itérations $n \simeq 100 \ll N_{\mathcal{H}}$ est largement suffisant pour que l'énergie du fondamental $E_0(n)$ converge vers la valeur exacte E_0 à la précision de la machine (10^{-15}). On remarque aussi qu'à chaque itération, seuls trois vecteurs de dimension $N_{\mathcal{H}}$ sont nécessaires pour calculer les (a_i, b_i) , ce qui permet de traiter des espaces de Hilbert contenant jusqu'au milliard d'états.

La technique de Lanczos permet également d'obtenir la fonction d'onde du fondamental. En effet, notons $|\psi_0\rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i |i\rangle$ le vecteur propre du fondamental de \mathcal{H}_n obtenu lors de la dernière itération. Comme on ne stocke pas pour des raisons de mémoire les n états intermédiaires $|i\rangle = \sum_{c=1}^{N_{\mathcal{H}}} \gamma_c^i |c\rangle$, où $\{|c\rangle\}_{N_{\mathcal{H}}}$ est la base de l'espace de Hilbert, on les recalcule en repartant du même vecteur initial $|0\rangle$ pour reconstruire le fondamental

$$|\psi_0\rangle = \sum_{c=1}^{N_{\mathcal{H}}} \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \gamma_c^i \right) |c\rangle \quad (\text{III.8})$$

dans la bonne base. Le calcul du fondamental est important car il permet d'accéder aux corrélations statiques et dynamiques. De la même manière, on peut reconstruire les fonctions d'onde des états excités de basse énergie par cette méthode bien qu'elles seront déterminées moins précisément. Les détails sur la convergence numérique sont reportés à la section 1.8.

1.2 Algorithme de Davidson

On présente maintenant une variante [203, 204] de l'algorithme de Lanczos qui va être très utile pour le DMRG. En effet, bien que nécessitant plus de mémoire, il converge d'autant plus vite que les matrices sont à dominante diagonale comme c'est le cas des modèles Hubbard, t-J ou Heisenberg. D'autre part, il représente mieux les premiers états excités et n'a pas le problème des vecteurs fantômes (voir la section 1.8) comme l'algorithme de Lanczos. Ceci est possible grâce à la réorthogonalisation du sous-espace variationnel à chaque itération.

Voici brièvement les idées sur lesquelles il repose ainsi que ses étapes clés. Dans l'algorithme de Lanczos, au bout de la $i^{\text{ème}}$ itération on a construit une représentation approximative $|\psi_0^i\rangle$ du fondamental avec la valeur variationnelle $E_0^i > E_0$ pour l'énergie. Si $|\psi_0^i\rangle$ était le vrai fondamental, alors le vecteur résiduel

$$|R^i\rangle = \mathcal{H}|\psi_0^i\rangle - E_0|\psi_0^i\rangle \quad (\text{III.9})$$

serait nul. On peut montrer que l'algorithme de Lanczos va étendre le sous-espace variationnel selon la composante du vecteur $\mathcal{H}|\psi_0^i\rangle - E_0^i|\psi_0^i\rangle \simeq |R^i\rangle$ qui est orthogonale à ce sous-espace. Davidson proposa de construire un meilleur vecteur résiduel comme suit : le vrai vecteur résiduel $|R\rangle$ s'écrit

$$|R\rangle = |\psi_0\rangle - |\psi_0^i\rangle, \quad (\text{III.10})$$

avec $|\psi_0\rangle$ le fondamental exact. On a ainsi

$$(\mathcal{H} - E_0\mathbb{I})|R\rangle = -|R^i\rangle. \quad (\text{III.11})$$

Le problème est qu'il est difficile d'inverser numériquement cette relation (et ne connaît pas E_0) pour obtenir le vecteur résiduel $|R\rangle$. En revanche, si on approxime \mathcal{H} par sa partie diagonale \mathcal{D} et qu'on prend $E_0^i \simeq E_0$, on peut facilement fabriquer le vecteur

$$|\tilde{R}\rangle = -(\mathcal{D} - E_0^i \mathbb{I})^{-1} |R^i\rangle \quad (\text{III.12})$$

qui s'avère souvent être un meilleur vecteur résiduel que $|R^i\rangle$ pour étendre le sous-espace. On remarque d'ailleurs que le choix $\mathcal{D} = \mathbb{I}$ nous ramène à l'algorithme de Lanczos. Cet algorithme permet de viser de façon plus générale un état propre $|\psi_k\rangle$ autre que le fondamental associé à la valeur propre E_k . L'implémentation numérique comporte plus d'étapes que celui de Lanczos :

1. On part d'un sous-espace contenant $l \geq k$ vecteurs orthonormés $\{|v_1\rangle, \dots, |v_l\rangle\}$ et on appelle B la matrice rectangulaire qui contient ces vecteurs comme colonnes et H la matrice des vecteurs $\{\mathcal{H}|v_1\rangle, \dots, \mathcal{H}|v_l\rangle\}$.
2. On diagonalise alors la matrice $\langle v_i | \mathcal{H} | v_j \rangle$ pour en déterminer la valeur propre E_k^l et le vecteur propre $|\psi_k^l\rangle$ correspondant (obtenus avec l vecteurs).
3. Pour vérifier la convergence, on construit le vecteur

$$|\varepsilon^l\rangle = (H - E_k^l B) |\psi_k^l\rangle \quad (\text{III.13})$$

et on calcule sa norme. Si elle est inférieure à ε (un critère qu'on se fixe) alors on arrête et on considère que $|\psi_k^l\rangle$ donne une bonne représentation de l'état visé. Sinon, on agrandit la base.

4. Pour agrandir la base, on fabrique le vecteur résiduel

$$|R^l\rangle = (\mathcal{D} - E_k^l \mathbb{I})^{-1} |\psi_k^l\rangle \quad (\text{III.14})$$

et on l'orthonormalise par rapport aux vecteurs précédents $\{|v_1\rangle, \dots, |v_l\rangle\}$. Il en sort le nouveau vecteur $|v_{l+1}\rangle$ qu'on rajoute à la matrice B . On est alors ramené au 1. avec $l \rightarrow l + 1$.

Précisons enfin qu'en pratique, afin de limiter l'espace mémoire utilisé, on part d'un petit nombre de vecteurs aléatoires $\{|v_1\rangle, \dots, |v_l\rangle\}$ qu'on orthonormalise et on fait quelques itérations jusqu'à un nombre de vecteurs maximal qu'on se fixe. Si la convergence n'est pas atteinte, on reprend alors l'algorithme au début mais en se servant cette fois du résultat de la première série d'itérations.

1.3 Utilisation des symétries

Les hamiltoniens étudiés dans la physique des électrons fortement corrélés ont le plus souvent un grand nombre de symétries (cf tableau III.1). On distinguera parmi ces symétries celles qui sont continues (abeliennes ou non) et celles qui sont discrètes. Si $\hat{\mathcal{S}}$ est l'opérateur représentant une symétrie de l'hamiltonien, on aura $[\mathcal{H}, \hat{\mathcal{S}}] = 0$ et une quantité conservée associée caractérisée par un nombre quantique. L'hamiltonien sera alors diagonalisable par blocs dans chacun des secteurs. Bien qu'en pratique, on ne puisse pas toujours les utiliser toutes, elles permettent de réduire considérablement l'espace de Hilbert. D'autre part, elles

Symétrie	type	quantité conservée associée
rotation autour de z	U(1)	S_{tot}^z : spin selon z
inversion de spin ($S_{\text{tot}}^z = 0$)	discrète	r : parité du spin
invariance de gauge globale	U(1)	N_{tot}^e : nombre de particules
translations	discrète	$k = n \frac{2\pi}{L_x}$: impulsion
rotations du réseau	discrète	caractère associé

 TAB. III.1: *Symétries et quantités conservées souvent utilisées en diagonalisation exacte.*

apportent au travers de leurs nombres quantiques associés une information physique supplémentaire. Accessoirement, leur utilisation permet aussi de réduire la densité d'états à basse énergie et améliore d'autant la convergence de l'algorithme de Lanczos.

La plupart du temps on utilise les deux symétries U(1) associées à la conservation de la charge et du spin selon l'axe z . Il est en effet facile de travailler à nombre de particules et S_{tot}^z fixés. La symétrie de spin complète SU(2) est difficile à implémenter car elle est non abélienne. On peut cependant remonter au spin total S_{tot} d'un état en regardant s'il appartient à un multiplet (secteurs $S_{\text{tot}}^z = 0, 1, 2, \dots$) ou en filtrant le fondamental en appliquant un projecteur sur un secteur de S_{tot} donné ou même en ajoutant $\lambda \hat{S}^2$ à l'hamiltonien avec λ grand pour séparer les $S_{\text{tot}}^{\text{max}}$ multiplets. Enfin, lorsque que $S_{\text{tot}}^z = 0$, la symétrie discrète d'inversion de spin, qui consiste à retourner tous les spins, permet de diviser par deux $N_{\mathcal{H}}$ et de remonter à la parité de spin de l'état⁷. Notons enfin que la symétrie particule-trou est présente assez souvent et va contraindre ou non le signe de t dans le terme d'énergie cinétique, en particulier suivant la nature du réseau.

Lorsqu'on a des conditions aux bords périodiques, on peut utiliser les translations \mathcal{T} du réseau qui laissent invariants les couplages de l'hamiltonien. S'y ajoutent les symétries du groupe ponctuel du réseau \mathcal{G}_P comme les rotations, réflexions ou inversions. Si on appelle $\mathcal{G} = \mathcal{T} \times \mathcal{G}_P$ le groupe des symétries spatiales du réseau, la taille de l'espace de Hilbert est alors approximativement divisée par son nombre d'éléments $\text{card}(\mathcal{G})$. Enfin, précisons que pour une impulsion donnée \mathbf{k} , les symétries ponctuelles ne sont parfois pas toutes utilisables : elles doivent laisser \mathbf{k} invariant ce qui n'est pas toujours vrai avec les rotations.

À titre d'exemple, prenons le modèle de Heisenberg sur une échelle de $2 \times 16 = 32$ sites. Sans aucune symétrie, la taille de l'espace de Hilbert est $N_{\mathcal{H}} = 2^{32} \simeq 2 \times 10^9$. Si $S_{\text{tot}}^z = 0$, $N_{\mathcal{H}}$ est réduit à $C_{32}^{16} = 601 \times 10^6$. L'utilisation des $2L = 32$ translations et de l'inversion de spin permet d'avoir finalement pour le fondamental d'impulsion $k_x = k_y = 0$: $N_{\mathcal{H}} = 9\,395\,581 \simeq C_{32}^{16}/(2 \times 2 \times 16)$. Cette taille est tout à fait accessible à un PC de bureau récent. Les détails sur la construction de l'espace de Hilbert symétrisé se trouvent dans la section 1.7.

1.4 Calculs d'observables

1.4.1 Observables tirées du calcul de l'énergie

L'énergie est la mesure la plus rapide à obtenir. On va retrouver des quantités dont les définitions se transposent généralement d'un secteur de symétrie à un autre (essentiellement

⁷Rappelons qu'un singulet de deux spins a $r = -1$ alors que le triplet $S^z = 0$ aura $r = +1$.

dans les secteurs le spin, la charge et l'impulsion). Pour simplifier, on considérera une chaîne de longueur L dans ce qui suit.

C'est tout d'abord le cas des gaps. Ils renseignent sur la nature des excitations. On s'intéresse ainsi aux gaps de spin singulet et triplet, aux gaps de charge à 1, 2, ... particules. Pour l'impulsion, une dégénérescence associée à un gap indiquera une brisure de la symétrie de translation. On peut également tracer les énergies en fonction des nombres quantiques de façon astucieuse. Pour le spin, cela s'appelle les tours d'états dans lesquelles on trace les énergies en fonction de $S(S+1)$ [27]. La courbe de l'énergie en fonction du nombre de particules $E(N)$ nous renseignera sur la nature de la phase au travers de ces dérivées (qui sont reliées aux gaps). En particulier, on tire le potentiel chimique et la compressibilité inverse de

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N} \quad \text{et} \quad \kappa^{-1} = L \frac{\partial^2 E_0}{\partial N^2}. \quad (\text{III.15})$$

L'analogie est immédiate pour le secteur spin avec le champ magnétique et la susceptibilité

$$H = \frac{\partial E_0}{\partial M} \quad \text{et} \quad \chi = \frac{1}{L} \frac{\partial^2 E_0}{\partial H^2}. \quad (\text{III.16})$$

Pour l'impulsion, on tracera les relations de dispersion $E(k)$ qui permettent d'étudier modes et branches d'excitations. Si on a un mode linéaire avec l'impulsion, on pourra calculer sa vitesse

$$v = \frac{\partial E}{\partial k}. \quad (\text{III.17})$$

On peut même jouer sur la parité du nombre de site pour créer des excitations dans le système. Ainsi, pour une chaîne dimérisée de taille impaire, le spinon artificiellement libéré donnera accès à l'énergie de cette excitation. Notons enfin que les extrapolations de taille finie (voir la section 1.8) renferment de précieuses informations comme la charge centrale et les longueurs de corrélations associées aux gaps.

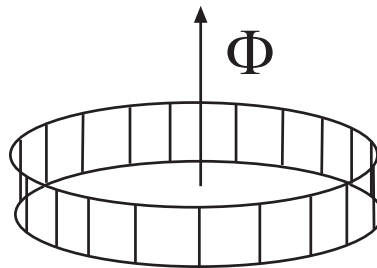


FIG. III.1: Un flux à travers une chaîne ou une échelle permet d'étudier sa réponse. C'est aussi le moyen modifier continûment les conditions aux limites en appliquant un twist $|\psi\rangle \rightarrow e^{i\Phi}|\psi\rangle$ sur la fonction d'onde.

Transformation de jauge et conditions aux limites. Une autre classe importante d'observables est obtenue en perturbant le système par la modification de ses conditions aux limites [205]. Pour perturber la partie charge, on va faire passer un flux Φ dans le système (voir

figure III.1). Le courant et la susceptibilité (ou rigidité de charge) s'écrivent au signe et à des constantes près

$$j = \frac{1}{L} \frac{\partial E_0}{\partial \Phi} \quad \text{et} \quad \chi = \frac{1}{L} \frac{\partial^2 E_0}{\partial \Phi^2}. \quad (\text{III.18})$$

Dans la limite $\Phi \rightarrow 0$, le courant est nul et la susceptibilité donne la raideur de charge. Elle est égale au poids de Drude de l'équation (II.27) à un facteur près : $D = L^2 \chi(0)/(8\pi^2)$. L'introduction du flux dans l'hamiltonien se fait par la transformation de jauge locale $c_{j\sigma} \rightarrow e^{i\theta_j} c_{j\sigma}$. Pour appliquer un twist à la fonction d'onde $|\psi\rangle \rightarrow e^{i\Phi} |\psi\rangle$ au passage du lien $(L, L+1 \equiv 1)$, on peut n'introduire le flux que sur ce lien de sorte que $\theta_L - \theta_1 = \Phi$ et pour $i \neq 1, L$, $\theta_i - \theta_{i+1} = 0$. Mais on préfère conserver l'invariance par translation et appliquer une différence de phase Φ/L constante sur chacun des liens. On fait ainsi varier continûment les conditions aux limites. Pour le spin, on peut tordre les spins en imposant une petite rotation par rapport à l'axe z dans la partie $S^+ S^-$ de l'hamiltonien, la réponse étant caractérisée dans ce cas par la rigidité de spin.

1.4.2 Observables tirées du calcul du fondamental

Lorsqu'on a calculé la fonction d'onde du fondamental $|\psi_0\rangle$, on peut s'en servir pour calculer la valeur moyenne d'une observable statique à température nulle⁸. C'est par exemple le cas des différents termes de l'hamiltonien pris séparément : on peut ainsi comparer la contribution de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle d'interaction. On peut également regarder un paramètre d'ordre local ou des fonctions de corrélations à temps égaux soit dans l'espace direct, soit dans l'espace réciproque

$$C(i-j) = \langle \psi_0 | A_j^\dagger A_i | \psi_0 \rangle \quad \text{ou} \quad C(\mathbf{k}) = \langle \psi_0 | A_{\mathbf{k}}^\dagger A_{\mathbf{k}} | \psi_0 \rangle. \quad (\text{III.19})$$

Cependant, ces deux fonctions ne se calculent pas de la même manière. Pour des corrélations dans l'espace réel comme $S_j^z S_i^z$ ou $c_j^\dagger c_i$, il est plus facile d'appliquer l'opérateur $A_j^\dagger A_i$ directement sur le fondamental avant de reprojeter sur $|\psi_0\rangle$. Dans l'espace réciproque, pour $S_{\mathbf{k}}^z$ par exemple, il faudra construire l'espace de Hilbert du secteur \mathbf{k} (en supposant que le fondamental est dans le secteur $\mathbf{k} = 0$), créer le vecteur intermédiaire $|\psi_1\rangle = A_{\mathbf{k}} |\psi_0\rangle$, puis utiliser $C(\mathbf{k}) = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle$.

Avec la connaissance des fonctions d'onde de fondamentaux entre des secteurs associés à des nombres quantiques différents, on peut avoir accès à des corrélations hors-diagonales (au sens des nombres quantiques). C'est le cas du paramètre d'ordre supraconducteur [207]

$$F(\mathbf{k}) = \langle \psi_0(N+2) | c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger | \psi_0(N) \rangle, \quad (\text{III.20})$$

qui est l'opérateur de création de paires singulet entre les fondamentaux à N et $N+2$ particules. Il faut dans ce cas construire $|\psi_1\rangle = c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger | \psi_0(N) \rangle$ et $|\psi_2\rangle = c_{\mathbf{k},\uparrow} | \psi_0(N+2) \rangle$ qui se trouvent dans l'espace à $N+1$ particules.

Les corrélations statiques vérifient souvent des règles de somme simples, reliées aux paramètres physiques comme la densité électronique, et qui sont utiles pour vérifier la cohérence

⁸Il existe des extensions à température finie de la diagonalisation exacte mais elles restent peu utilisées [206].

des résultats numériques. On peut aussi calculer des quantités plus complexes comme le cumulants de Binder associé à une paramètre d'ordre M

$$B = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}, \quad (\text{III.21})$$

très pratique pour déterminer les points critiques à partir de systèmes de taille finie comme on le verra au chapitre VI.

1.5 Calcul des propriétés dynamiques

Une application importante de la diagonalisation exacte est le calcul de propriétés dynamiques de par la bonne représentation du spectre de basse énergie qu'offre l'algorithme de Lanczos. Une fonction de corrélation dynamique⁹ $\mathcal{A}(z = \omega + i\epsilon)$ pour l'observable A correspond à la transformée de Fourier de la corrélation à temps différents $\mathcal{A}(t)$

$$\mathcal{A}(t) = \langle \psi_0 | A(t) A^\dagger(0) | \psi_0 \rangle \Leftrightarrow \mathcal{A}(z) = \langle \psi_0 | A \frac{1}{z - \mathcal{H} + E_0} A^\dagger | \psi_0 \rangle \quad (\text{III.22})$$

Physiquement, cela revient à regarder la propagation de l'excitation créée par A en $t = 0$ jusqu'à ce qu'elle soit détruite à t . On obtient le comportement fréquentiel qui définit la fonction spectrale $\mathcal{A}(\omega)$, mesurable expérimentalement (voir le tableau III.2), à l'aide du passage à la limite sur l'axe réel :

$$\mathcal{A}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \text{Im} \mathcal{A}(\omega + i\epsilon) \quad (\text{III.23})$$

La représentation de Lehmann s'obtient en insérant deux relations de fermeture sur les états propres et permet une interprétation simple de cette fonction spectrale :

$$\mathcal{A}(\omega) = \sum_p |\langle \psi_0 | A^\dagger | \psi_p \rangle|^2 \delta(\omega - (E_p - E_0)). \quad (\text{III.24})$$

Les excitations créées par A se décomposent sur les états excités d'énergie E_p avec un poids contrôlé par les éléments de matrice $\langle \psi_0 | A^\dagger | \psi_p \rangle$ qui suivent les règles de sélection associées aux symétries et à l'opérateur A . Il est facile de rajouter l'information spatiale soit dans l'espace réel, soit dans l'espace réciproque pour avoir la fonction spectrale $\mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega)$ résolue en impulsion. Enfin, les fonctions spectrales vérifient des règles de somme qui sont reliées aux corrélations statiques,

$$\langle \psi_0 | A A^\dagger | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \mathcal{A}(\omega) \quad (\text{III.25})$$

$$\langle \psi_0 | A [\mathcal{H}, A^\dagger] | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \mathcal{A}(\omega) \quad (\text{III.26})$$

$$\langle \psi_0 | [A, \mathcal{H}] [\mathcal{H}, A^\dagger] | \psi_0 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^2 \mathcal{A}(\omega) \quad (\text{III.27})$$

...

Expérience	fonction spectrale	opérateur A	corrélations
Arpes	$\mathcal{A}(\mathbf{k}, \omega)$	$c_{\mathbf{k}}$	fonction de Green
Neutrons	$\mathcal{S}(\mathbf{k}, \omega)$	$S_{\mathbf{k}}^z$	spin
Optique	$\sigma(\omega)$	j_x	courants

TAB. III.2: Différentes quantités expérimentales qui sondent la dynamique du système.

qui sont calculables indépendamment et donc utiles pour vérifier les résultats numériques.

Voici maintenant comment les calculer avec la diagonalisation exacte. On commence par extraire le fondamental $|\psi_0\rangle$, puis on lui applique A^\dagger pour obtenir le vecteur normalisé¹⁰ :

$$|\tilde{\psi}_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi_0|AA^\dagger|\psi_0\rangle}}A^\dagger|\psi_0\rangle. \quad (\text{III.28})$$

Il est alors important de remarquer que l'équation (III.22) se réécrit :

$$\mathcal{A}(z) = \langle\psi_0|AA^\dagger|\psi_0\rangle\langle\tilde{\psi}_0|\frac{1}{z - \mathcal{H} + E_0}|\tilde{\psi}_0\rangle \quad (\text{III.29})$$

On refait alors n itérations de Lanczos mais en partant cette fois de $|\tilde{\psi}_0\rangle$ pour obtenir une matrice tridiagonale du type de l'équation (III.7). Si on diagonalise cette matrice pour obtenir ses valeurs propres E_p et ses vecteurs propres $|\phi_p\rangle$, on a accès à tous les poids $|\langle\phi_p|\tilde{\psi}_0\rangle|^2$ en regardant la première ligne de la matrice des $|\phi_p\rangle$ puisqu'on est parti de l'état $|0\rangle = |\tilde{\psi}_0\rangle$. On réécrit alors (III.29) en représentation de Lehmann dans la base des $|\phi_p\rangle$:

$$\mathcal{A}(\omega) \simeq \langle\psi_0|AA^\dagger|\psi_0\rangle \sum_p |\langle\phi_p|\tilde{\psi}_0\rangle|^2 \delta(\omega - (E_p - E_0)), \quad (\text{III.30})$$

qui peut se représenter graphiquement par des lorentziennes de largeur ϵ centrées autour des pôles $E_p - E_0$. Le symbole \simeq rappelle que $|\phi_p\rangle \simeq |\psi_p\rangle$ car numériquement ces vecteurs ne sont qu'une approximation des véritables états propres excités de \mathcal{H} . Il existe une autre manière de représenter ces fonctions spectrales directement à partir des éléments (a_i, b_i) de la matrice tridiagonale (III.7) obtenue lors du deuxième Lanczos. L'élément $\langle\tilde{\psi}_0|(z - \mathcal{H} + E_0)^{-1}|\tilde{\psi}_0\rangle$ est simplement $[(z - \mathcal{H} + E_0)^{-1}]_{11}$ dans la même base. Cet élément de la matrice inverse se calcule par la formule du cofacteur et vaut $D_{11}/\det(z - \mathcal{H}_n)$ avec comme notation pour les déterminants des mineurs

$$D_i \equiv D_{ii} = \det(z - \mathcal{H}_n)_{ii} = \det \begin{pmatrix} z - a_i & -b_{i+1} & 0 & \dots & 0 \\ -b_{i+1} & z - a_{i+1} & -b_{i+2} & \ddots & \vdots \\ 0 & -b_{i+2} & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & z - a_{n-1} & -b_n \\ 0 & \dots & 0 & -b_n & z - a_n \end{pmatrix}. \quad (\text{III.31})$$

Ces déterminants se déduisent par récurrence, en notant $D_0 = \det(z - \mathcal{H}_n)$, on a

$$D_i = (z - a_i)D_{i+1} - (-b_{i+1})^2 D_{i+2}. \quad (\text{III.32})$$

⁹Les fréquences sont centrées autour de l'énergie du fondamental.

¹⁰On notera d'ailleurs que la norme au carré correspond à la fonction de corrélation à temps égaux (III.25).

On aboutit à un développement en fraction continue de $\mathcal{A}(z)$:

$$\mathcal{A}(z) = \frac{\langle \psi_0 | AA^\dagger | \psi_0 \rangle}{z - a_1 + E_0 - \frac{b_1^2}{z - a_2 + E_0 - \frac{b_2^2}{z - a_3 + E_0 - \dots}}} \quad (\text{III.33})$$

puis on utilise (III.23) avec un ϵ petit, ce qui donne une représentation graphique de la fonction spectrale légèrement différente de celle avec les lorentziennes autour des pôles. Des exemples de calculs de dynamique seront donnés au chapitre IV.

1.6 Évolution temporelle

On aborde ici la question de l'évolution d'un système isolé au cours du temps. Si on peut tirer des informations sur l'évolution en temps réel d'après les calculs dynamiques, on ne connaît pas la fonction d'onde $|\psi(t)\rangle$ au cours du temps. On voudrait également pouvoir traiter le cas où l'hamiltonien dépend du temps et de manière générale pouvoir décrire l'opérateur d'évolution $U(t) = e^{-i\mathcal{H}(t)t}$.

Une première méthode [198] consiste à utiliser la représentation approximative de \mathcal{H} dans la base des vecteurs de Lanczos dont on note $L_n(t)$ la matrice rectangulaire $n \times N_{\mathcal{H}}$ obtenue après n itérations Lanczos en partant de $|\psi(t)\rangle$ supposé connu à l'instant t

$$|\psi(t + dt)\rangle = L_n(t) e^{-i(\mathcal{H} - E_0)dt} L_n(t)^T |\psi(t)\rangle. \quad (\text{III.34})$$

Le calcul de l'exponentielle de l'hamiltonien se fait facilement en diagonalisant la forme tridiagonale de \mathcal{H} dans la base des vecteurs de Lanczos. Cette méthode est par construction unitaire ($U(t)^\dagger U(t) = \mathbb{I}$) mais exige de conserver en mémoire la matrice $L_n(t)$ des vecteurs Lanczos. En pratique, il faut calculer un recouvrement et le comparer à un critère ϵ pour décider ou non de poursuivre les itérations Lanczos.

On a essayé une méthode plus simple basée sur un développement en série tronqué de l'exponentielle

$$|\phi(t + dt)\rangle = \sum_{n=0}^{n_{\max}} \frac{(-idt)^n}{n!} (\mathcal{H} - E_0)^n |\phi(t)\rangle. \quad (\text{III.35})$$

Seulement trois vecteurs intermédiaires sont nécessaires pour construire $|\phi(t + dt)\rangle$ et aucun changement de base n'intervient. On choisit d'arrêter la troncation lorsque la norme est presque égale à 1, $|\sqrt{\langle \phi(t + dt) | \phi(t + dt) \rangle} - 1.0| < \epsilon$ pour ϵ fixé puis on normalise le $|\psi(t + dt)\rangle$ obtenu pour rendre la transformation artificiellement unitaire. Comme \mathcal{H} est exact, seules deux sources d'erreur sont à contrôler (voir figure III.2) : l'erreur issue de la détermination du vecteur initial¹¹ $|\psi(t = 0)\rangle$ (s'il s'agit par exemple du fondamental de $\mathcal{H}(t = 0)$), et l'erreur à chaque pas de temps issu de la troncation contrôlée par ϵ . La première donne lieu à une erreur systématique dans l'évolution de $|\psi(t)\rangle$ mais qui reste majorée au cours du temps. La seconde croît linéairement avec le temps et on observe numériquement une saturation de l'erreur à longs temps. On peut également évaluer le meilleur compromis

¹¹Si on part d'un état qu'on construit « à la main » (par exemple tous les spins up), cette erreur sera nulle.

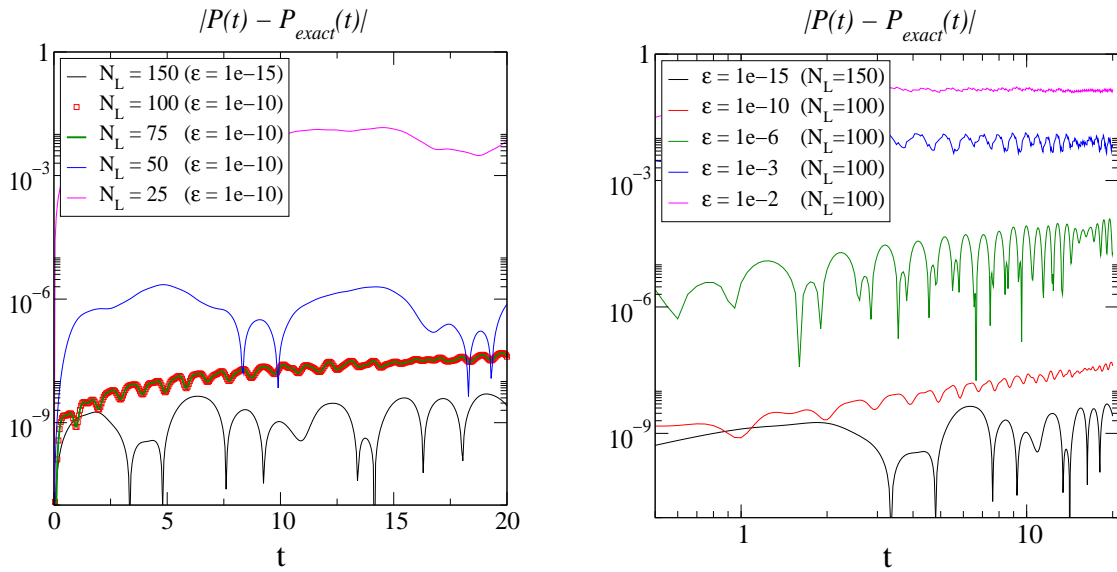


FIG. III.2: Erreur commise dans la méthode du développement en série en fonction du temps. À gauche, l'erreur initiale sur la détermination du fondamental est une erreur systématique approximativement constante dans le temps (N_L représente le nombre de pas Lanczos pour calculer le fondamental). Pour $N_L = 150$, l'erreur de troncature devient dominante et il faut diminuer ϵ pour retrouver l'erreur commise sur le fondamental. À droite, l'erreur de troncature de la série croît linéairement avec le temps.

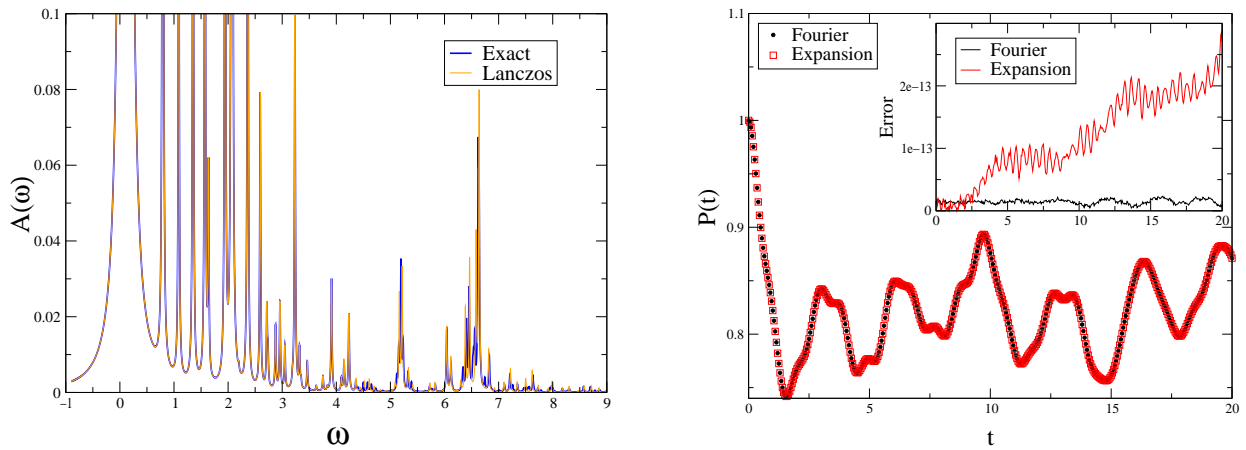


FIG. III.3: Calcul de la probabilité de retour à l'état initial $P(t)$ par deux méthodes. À gauche, $A(\omega)$ dans l'espace des fréquences par représentation de Lehmann : comparaison du Lanczos avec une diagonalisation complète. À droite, en fonction du temps : comparaison des méthodes par Lanczos et par le développement en série (III.35). Ce dernier a une erreur qui augmente linéairement avec le temps mais permet d'accéder à $|\psi(t)\rangle$ et de traiter les hamiltoniens dépendant du temps.

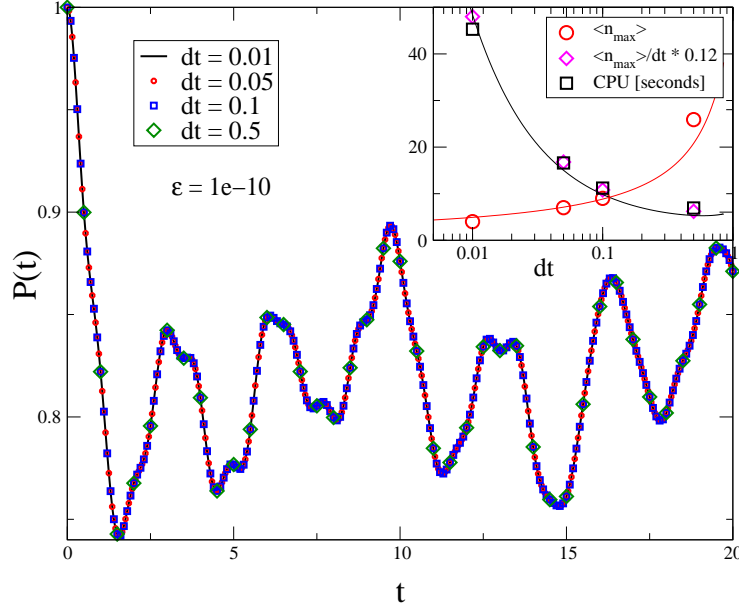


FIG. III.4: Probabilité $P(t)$ et temps CPU pour différents pas de temps dt . En encart, l'ajustement par la formule (III.37).

entre le pas de temps utilisé et le temps CPU nécessaire au calcul de l'évolution. En gros, la série s'arrêtera dès lors que $\epsilon \sim (\Delta E \times dt)^{n_{\max}}/n_{\max}!$ avec ΔE la largeur spectrale de l'hamiltonien si bien qu'on a

$$\frac{\ln \epsilon}{\Delta E dt} \sim \frac{n_{\max}}{\Delta E dt} \left(\ln \frac{n_{\max}}{\Delta E dt} - 1 \right). \quad (\text{III.36})$$

Pour le temps CPU total, qui varie comme n_{\max}/dt , on obtient pour $\epsilon = 10^{-p}$

$$n_{\max} \sim \frac{p \Delta E}{\ln(p/dt) - \ln(\ln 10) - 1}, \quad (\text{III.37})$$

qui est bien vérifiée numériquement (voir figure III.4).

Le calcul de l'erreur se fait en comparant les résultats à ceux obtenus avec une diagonalisation complète d'un petit système ou à ceux utilisant la dynamique dans l'espace de Fourier obtenu par Lanczos (voir figure III.3). Le modèle utilisé est un modèle de Hubbard de bosons de cœur dur sur une chaîne dans lequel on induit une dimérisation explicite des termes de sauts à $t = 0$. On peut calculer la probabilité de retour à l'état initial $P(t) = |\mathcal{A}(t)|^2 = |\langle \psi(t) | \psi_0 \rangle|^2$ par Lanczos avec la formule

$$\mathcal{A}(t) = \sum_n |\langle \psi_0 | u_n \rangle|^2 e^{-i(\omega_n - E_0)t} \quad (\text{III.38})$$

où l'on a accès aux poids et aux énergies ω_n de la même manière que pour (III.30) (mais avec $A = \mathbb{I}$). Cette méthode a une erreur sensiblement constante dans le temps car on fait le calcul dans l'espace de Fourier (voir figure III.3). Elle n'est cependant pas généralisable à toutes les formes d'évolution temporelle.

1.7 Quelques précisions sur l'implémentation

1.7.1 Réseaux utilisés (clusters)

Pour les systèmes quasi-unidimensionnels comme les chaînes ou les échelles, on peut utiliser des réseaux de longueurs différentes mais ayant tous le même découpage. On a de plus l'avantage d'avoir souvent des résultats généraux analytiques sur les effets de taille finie. En revanche, pour les réseaux bidimensionnels, on est par contre très vite limité dans les tailles du type $L_x \times L_y$. On utilise alors des clusters penchés avec $n^2 + m^2$ sites où n, m sont des entiers. Les effets de taille finie sont plus difficiles à appréhender mais certains cluster comme le $\sqrt{32} \times \sqrt{32}$ ont toutes les symétries d'un vrai réseau 2D.

1.7.2 Codage des états

Pour représenter les états en diagonalisation exacte, on utilise la seconde quantification : à chaque configuration électronique $|c\rangle$ créée par l'action des opérateurs de création $c_{i\sigma}^\dagger$ de l'électron portant un spin σ au site i sur l'état du vide $|\emptyset\rangle$, on associe un entier $\mathcal{N}(|c\rangle)$ dont des groupements de bits vont correspondre à l'état local sur site. Par exemple pour l'hamiltonien de Heisenberg, on a toujours un électron par site donc on prendra un seul bit pour coder les états \uparrow, \downarrow :

$$|c\rangle = c_{1\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger c_{3\downarrow}^\dagger c_{4\uparrow}^\dagger |\emptyset\rangle \Leftrightarrow |\uparrow_1, \downarrow_2, \downarrow_3, \uparrow_4\rangle \Leftrightarrow \mathcal{N}(|c\rangle) = 1001. \quad (\text{III.39})$$

Dans le cas de fermions qui peuvent s'échanger, il faut une convention dans l'ordre des opérateurs car ils anticommulent. Lorsqu'on applique un opérateur comme $c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ sur la configuration $|c\rangle$, il faut permuter les opérateurs fermioniques avec les relations d'anticommutation pour rétablir l'ordre juste. Cela se traduira par un facteur ± 1 dans l'application des opérateurs dont il faut tenir compte et qu'on appelle « signe fermionique ». Sans ça, on décrit des bosons de cœur dur qui n'ont, sauf cas exceptionnel, pas la même physique. Pour le modèle t-J (Hubbard), on devra utiliser des groupements¹² de bits pour décrire les trois (quatre) états sur site. On peut par exemple utiliser la convention $|0\rangle \leftrightarrow 00$, $|\uparrow\rangle \leftrightarrow 10$, $|\downarrow\rangle \leftrightarrow 01$ et $|\uparrow\downarrow\rangle \leftrightarrow 11$. L'application d'opérateurs sur ces états est réalisée grâce aux opérations de manipulations de bits qui dépendent du langage de programmation.

1.7.3 Construction d'un espace de Hilbert symétrisé

On donne ici le principe et les formules utiles pour symétriser l'espace de Hilbert. Construire un espace de Hilbert à nombre de particules et spin total fixés repose sur le génération d'entiers binaires à nombre de 1 fixé, ce qui se fait assez facilement. Commençons par introduire le vocabulaire de la théorie des groupes au travers de l'exemple le plus simple qui soit : deux spins 1/2 de Heisenberg. Dans le secteur $S_{\text{tot}}^z = 0$, il reste les deux états $|\uparrow\downarrow\rangle$ et $|\downarrow\uparrow\rangle$. Soit \hat{I} l'opérateur d'inversion de spin et $r = \pm 1$ le caractère associé à cette symétrie. On veut construire les états invariants par cette symétrie. On introduit alors les opérateurs symétrisant $\hat{\mathcal{S}}_r = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbb{I} + \hat{I}_r)$. On retrouve les états singulet $\hat{\mathcal{S}}_{-1}|\uparrow\downarrow\rangle = -\hat{\mathcal{S}}_{-1}|\downarrow\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$

¹²On travaille sur des entiers de 64 bits soit 64 sites au plus pour un modèle de Heisenberg, 32 sites au plus pour un modèle t-J ou Hubbard, ce qui n'est en général pas limitant.

et triplet $\hat{\mathcal{S}}_{+1}|\uparrow\downarrow\rangle = \hat{\mathcal{S}}_{+1}|\downarrow\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ à une normalisation près. Sachant appliquer $\hat{\mathcal{S}}_r$, on ne peut conserver que l'état $|\uparrow\downarrow\rangle$. Si on choisit $r = -1$, on travaillera dans l'état singulet et $r = +1$ correspondra à l'état triplet. Le calcul des éléments de matrice de l'hamiltonien $S^z S^z + \frac{1}{2}(S^+ S^- + S^- S^+)$ peut maintenant se faire dans la base restreinte à l'état $|\uparrow\downarrow\rangle$ en utilisant $\langle\uparrow\downarrow|\hat{\mathcal{S}}_r^{-1}\mathcal{H}\hat{\mathcal{S}}_r|\uparrow\downarrow\rangle = -1/4 + r \times 1/2$ qui sont bien les énergies des secteurs singulet et triplet. On n'a donc pas besoin de stocker en mémoire l'état $|\downarrow\uparrow\rangle$.

De façon plus générale, on va construire des états symétrisés en appliquant un opérateur symétrisant contenant toutes les symétries g du groupe \mathcal{G} . On note $\hat{\Gamma}_l(g)$ la représentation irréductible associée à l'élément g avec l comme nombre quantique et $\chi_l(g) = \text{Tr}[\hat{\Gamma}_l(g)]$ le caractère associé. Sous l'action d'une représentation $\hat{\Gamma}_l(g)$, une fonction d'onde $|\psi_i\rangle$ est transformée en $\hat{\Gamma}_l(g)|\psi_i\rangle = \sum_j \Gamma_l^{ij}(g)|\psi_j\rangle$. En pratique, seules les représentations unidimensionnelles (ou qui peuvent s'y ramener) sont utilisées de façon à ne pas générer plus d'une image par application d'une représentation¹³. La dernière relation sur une configuration $|c\rangle$ se réduit alors simplement à $\hat{\Gamma}_l(g)|c\rangle = \chi_l(g)|g(c)\rangle$, avec $|g(c)\rangle$ l'image de $|c\rangle$ par g . Un état invariant par symétrie peut être construit à partir d'une configuration $|c\rangle$ par application de l'opérateur symétrisant $\hat{\mathcal{S}}_l$ associé au jeu de nombres quantiques $l = (N_{\text{tot}}, S_{\text{tot}}^z, \mathbf{k}, \dots)$,

$$|\psi_l(c)\rangle = \hat{\mathcal{S}}_l|c\rangle = C_{l,c} \sum_{g \in \mathcal{G}} \chi_l(g)|g(c)\rangle, \quad (\text{III.40})$$

où $C_{l,c}$ est un facteur de normalisation qui dépend également de la configuration comme on va le voir. Or, parmi les états $|c\rangle$, certains conduisent au même état symétrisé $|\psi_l\rangle$: on dit qu'ils font partie de la même orbite car ils se déduisent les uns des autres par application des symétries g . Il suffit donc de n'en garder qu'un par orbite, appelé *représentant*, et qui est choisi suivant le critère arbitraire d'avoir le plus petit entier $\mathcal{N}(|c\rangle)$. Pour chaque configuration, on retrouve son représentant en lui appliquant les symétries. Dans une orbite, il y a environ $\mathcal{N}_l = \text{card}(\mathcal{G})$ configurations différentes. La base des représentants contient donc à peu près \mathcal{N}_l états de moins que l'espace non symétrisé. Cependant, il arrive que l'application des symétries génère peu de nouvelles configurations (on retombe sur les mêmes assez vite). L'orbite contient alors un plus petit nombre d'éléments. En effet, s'il existe une symétrie g' qui laisse invariant une configuration $|c\rangle$ ($|g'(c)\rangle = |c\rangle$), alors on générera plusieurs fois le même état lors de la symétrisation, entraînant le facteur de dégénérescence

$$d_{l,c} = \sum_{g' \in \mathcal{G}/|g'(c)\rangle=|c\rangle} \chi_l(g'). \quad (\text{III.41})$$

C'est la raison pour laquelle le facteur de normalisation $C_{l,c} = 1/\sqrt{\mathcal{N}_l d_{l,c}}$ dépend en fait de $|c\rangle$. Ce facteur de dégénérescence est important car il intervient dans les éléments de matrice du hamiltonien dans la base des représentants $\{|r\rangle\}$. Il arrive parfois que $d_{l,c} = 0$. Dans ce cas, il n'est pas nécessaire de conserver le représentant car il conduira à des éléments de matrice nuls.

Prenons l'exemple du groupe des translations sur une chaîne : il contient L éléments \mathbf{t} et les représentations irréductibles sont indicées par les vecteurs d'ondes \mathbf{k} : $\hat{\Gamma}_{\mathbf{k}}(\mathbf{t}) = \exp(-i\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{t})$. Le

¹³C'est pourquoi on n'utilise pas $\text{SU}(2)$.

caractère associé est le facteur de phase $\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{t}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{t})$ et l'onde de Bloch $|\mathbf{k}\rangle$ construite à partir d'une configuration $|c\rangle$ est

$$|\mathbf{k}\rangle = C_{\mathbf{k},c} \sum_{\mathbf{t}=0}^{L-1} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}} |\mathbf{t}(c)\rangle. \quad (\text{III.42})$$

Le plus souvent $C_{\mathbf{k},c} = 1/\sqrt{L}$ comme pour une transformée de Fourier, mais certains états, comme l'état de Néel $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \cdots \downarrow\rangle$ ou un état polarisé $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \cdots \uparrow\rangle$, vont avoir une grande dégénérescence.

1.7.4 Symétrisation des observables

Maintenant se pose la question de savoir comment calculer les éléments de matrice de \mathcal{H} (ou plus généralement d'un opérateur qui commute avec les symétries) dans un secteur de symétrie associé aux nombres quantiques l . On ne connaît a priori que les représentants ainsi que les symétries et leur caractères associés. On peut toujours décomposer l'hamiltonien en somme de termes élémentaires $\mathcal{H} = \sum_{\alpha} \hat{h}^{\alpha}$ qui ne génère qu'une seule nouvelle configuration $|n\rangle$ par représentant $|r\rangle$: $\hat{h}^{\alpha}|r\rangle = h^{\alpha}|n\rangle$. Soit $|r'\rangle$ le représentant de $|n\rangle$ et g la symétrie telle que $|g(n)\rangle = |r'\rangle$. Les éléments de matrice de \mathcal{H} dans le secteur l s'écrivent $\langle\psi_l(r')|\hat{h}^{\alpha}|\psi_l(r)\rangle$ ou $\langle r'|\hat{h}^{\alpha}|r\rangle$ dans la base des représentants. En utilisant les deux relations (III.40) pour $|r\rangle$ et $|n\rangle$, on obtient

$$\langle r'|\hat{h}^{\alpha}|r\rangle = \sqrt{\frac{d_{l,r'}}{d_{l,r}}} \chi_l(g) (-1)^{\gamma} h^{\alpha} \quad (\text{III.43})$$

où γ tient compte des signes fermioniques apparaissant dans les manipulations des configurations par le terme de l'hamiltonien et les opérations de symétries. Cette manière de calculer les éléments de matrices d'opérateurs est équivalente à leur symétrisation $\mathcal{O}^S = \mathcal{S}_l^{-1} \mathcal{O} \mathcal{S}_l$ dans le secteur l .

1.7.5 Récapitulatif

Un programme de diagonalisation exacte doit comporter comme structures principales :

1. une représentation de l'espace de l'Hilbert symétrisé : méthode pour appliquer les symétries, construction de la base des représentants et calcul des dégénérescences associées, méthode pour retrouver le représentant d'une configuration quelconque.
2. les règles d'application d'opérateurs sur une fonction d'onde, les plus importants étant les termes de l'hamiltonien : calcul des éléments matrices selon (III.43).
3. les algorithmes utilisant les deux structures précédentes : algorithme de Lanczos, de Davidson, de calcul de la dynamique, de l'évolution temporelle. . .

1.7.6 Ressources informatiques et optimisation

Si la diagonalisation exacte est rapide en comparaison du Monte-Carlo quantique, elle exige une gestion optimisée de la mémoire. L'information minimale nécessaire à tout instant

est celle des trois vecteurs Lanczos de taille $N_{\mathcal{H}}$. L'étape la plus coûteuse lors de l'application de \mathcal{H} est la recherche de l'index du représentant de la configuration $|n\rangle$ générée. La stratégie la plus simple est d'utiliser une table de hashing ou même de stocker en mémoire l'index du représentant de toutes les configurations de l'espace de Hilbert non symétrisé dans ce qu'on appelle une table de lookup. Cela est raisonnable pour des tailles d'espace de Hilbert non symétrisé $N_{\mathcal{H}}^{\text{non-sym}}$ pas trop grandes. Une optimisation consiste à décomposer l'entier $\mathcal{N}(|c\rangle)$ en deux sous-entiers. Deux tables de lookup de taille $\sqrt{N_{\mathcal{H}}^{\text{non-sym}}}$ peuvent être alors utilisées pour déterminer l'index. Cette décomposition en deux entiers permet aussi d'optimiser l'application des symétries si chaque entier correspond à un sous-réseau particulier (par exemple chacune des chaînes dans une échelle).

Pour ce qui est du calcul des éléments de matrice de l'hamiltonien (environ $\#\text{liens} \times N_{\mathcal{H}}$ termes), deux options sont possibles : soit on les calcule une fois pour toutes au début, soit on les recalcule à chaque fois qu'on en a besoin. Dans le premier cas, on peut choisir d'écrire les éléments de matrices sur disque puis de les relire à chaque fois. Pour les petits systèmes, on peut même les mettre en mémoire, ce qui n'est pas tellement plus gros que $N_{\mathcal{H}}^{\text{non-sym}}$. Dans le cas où ils sont recalculés au besoin, la recherche d'index devient le point crucial de l'optimisation.

1.8 Convergence et pratique de la Diagonalisation Exacte

L'efficacité de la diagonalisation exacte repose sur l'utilisation des symétries, l'implémentation optimisée du produit $\mathcal{H}|\psi\rangle$ et sur la rapidité de convergence de l'algorithme de Lanczos. Cette dernière est sensiblement exponentielle comme on peut le voir sur la figure III.5. On remarque que la convergence vers un état propre est d'autant plus rapide qu'il est bien séparé des autres. L'utilisation des symétries permet de diminuer la densité du spectre à basse énergie. De même, pour un système intégrable (avec un nombre de quantités conservées proportionnel à la taille de l'espace de Hilbert), la convergence sera pénalisée par la forte densité à basse énergie.

On note l'apparition de valeurs propres de basse énergie douteuses (entourées sur la figure) après un certain nombre d'itérations. Elles correspondent à l'apparition de vecteurs fantômes dans l'algorithme dus aux erreurs d'arrondis du calcul numérique. Ces vecteurs se développent et convergent ensuite vers l'état propre d'énergie plus basse le plus proche, entraînant des dégénérescences non physiques dans le spectre de basse énergie. En pratique, cela ne pose pas de problèmes pour la détermination de l'énergie fondamentale. Pour la dynamique, on observe numériquement que les dégénérescences non physiques contribuent aux poids spectraux mais de telle sorte de la somme des poids dans le multiplet artificiel reste égal à celle qu'on avait dans l'état non dégénéré. On peut vérifier sur des petits systèmes que le spectre exact est ainsi bien reproduit. Enfin, précisons que si on obtient une erreur relative ε sur l'énergie après n itérations, on s'attend à une erreur $\sqrt{\varepsilon}$ sur les coefficients du fondamental et donc sur les observables tirées du fondamental. Ainsi, on augmente le nombre d'itérations lorsqu'on étudie les propriétés du fondamental (cf figure III.6). Enfin, dans la situation où l'on fait varier un paramètre p dans l'hamiltonien, on peut utiliser, à la place d'un état aléatoire, le vecteur $|\psi(p)\rangle$ obtenu précédemment¹⁴ comme état de dé-

¹⁴Près d'un croisement de niveau en fonction de p , on peut craindre de rester bloqué dans un état métastable.

Cela peut être évité en ajoutant une contribution aléatoire qui entraînera l'état vers le bon fondamental.

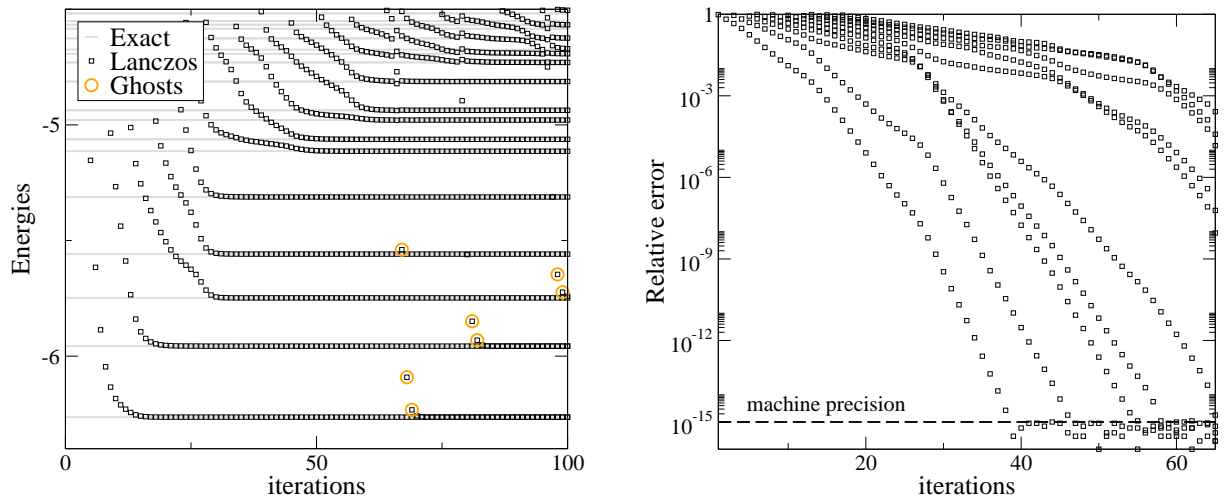


FIG. III.5: Convergence de l'algorithme de Lanczos. À gauche, la convergence de la partie basse énergie spectre de la matrice tridiagonale vers le spectre exact calculé indépendamment. Les cercles mettent en évidence les énergies douteuses associées à l'apparition de vecteurs fantômes. À droite, l'erreur relative $|E_{\text{lanczos}}^k(i) - E_{\text{exact}}^k|/|E_{\text{exact}}^k|$ après i itérations pour les $k = 1, \dots, 10$ plus petites valeurs propres. La convergence est sensiblement exponentielle jusqu'à la précision de la machine.

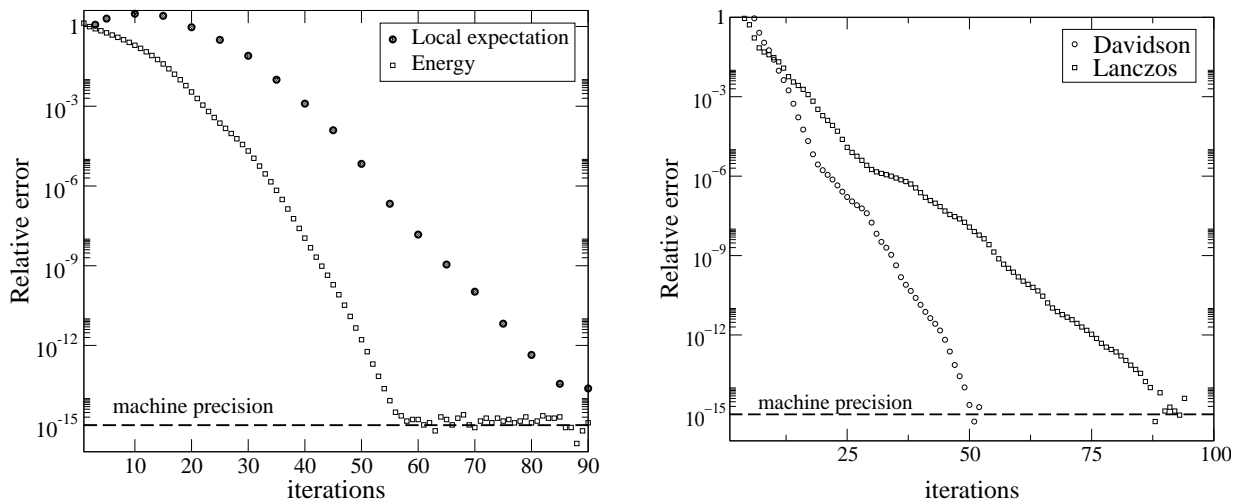


FIG. III.6: À gauche : convergence de l'algorithme de Lanczos pour une mesure locale qui traduit la convergence de la représentation du fondamental plus lente que celle de l'énergie. À droite : convergence plus rapide de l'algorithme de Davidson comparée à celle du Lanczos pour le modèle de Hubbard sur une chaîne avec $U/t = 8$. Dans d'autres cas, la convergence est similaire.

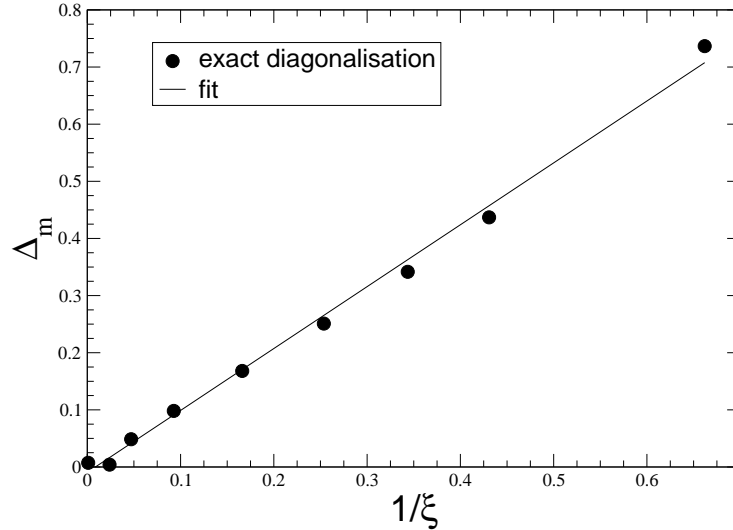


FIG. III.7: Relation entre le gap de spin calculé par différence d'énergie (extrapolé) et la longueur de corrélation tirée de la loi d'extrapolation (III.45) pour une échelle de spins avec échange cyclique (voir le chapitre IV pour le modèle étudié).

part du Lanczos calculant $|\psi(p + \Delta p)\rangle$. On gagne de l'ordre de 20 itérations Lanczos. Une comparaison avec l'algorithme de Davidson est donnée sur la figure III.6. Le problème de la gestion de la dégénérescence des états excités à cause des vecteurs fantômes est illustré par le tableau III.3.

Algorithm	iter	1 ^{er}	2 ^e	3 ^e	4 ^e
Exact		-5.0315434037424	-4.7773893337012	-4.5693744108054	-4.5693744108054
Davidson	105	-5.0315434037424	-4.7773893337012	-4.5693744108054	-4.5693744108054
Lanczos	58	-5.0315434037424	-4.7773893337012	-4.5693744108054	-4.2976885465600
	59	-5.0315434037424	-4.7773893337012	-4.5693744108054	-4.3442335795376
	60	-5.1643305416143	-5.0315434037424	-4.7773893337012	-4.5693744108054

TAB. III.3: Gestion des dégénérescences exactes lorsque toutes les symétries ne sont pas utilisées sur les 4 premiers états excités. Le Lanczos ne donne pas les dégénérescences exactes (et en donne certaines absurdes dues aux vecteurs fantômes) alors que le Davidson les résout correctement au prix d'un plus grand nombre d'itérations.

La question du passage à la limite thermodynamique est particulièrement pertinente en diagonalisation exacte compte-tenu du nombre de sites accessible relativement petit en comparaison du Monte-Carlo quantique et du DMRG (les plus gros systèmes étudiés comptant au plus 40 sites). Nous ne discuterons ici que le cas quasi-unidimensionnel abordé dans cette thèse. Dans le cas d'un système non gappé, les effets de taille finie de l'énergie par site du fondamental $E_0(L)/L$ ont pu être dérivés analytiquement et obéissent à la loi

$$e_0(L) = e_0^\infty - \frac{\pi c}{6} \frac{v}{L^2} + o\left(\frac{1}{L^2}\right), \quad (\text{III.44})$$

avec $v = \partial E / \partial k|_{k=0}$ la vitesse du mode collectif en $k = 0$ et c la charge centrale (voir cha-

pitre II). On calcule v et les paramètres de l'extrapolation pour en déduire c numériquement. Dans le cas d'un système ayant un spectre gappé, la loi empirique utilisée est

$$e_0(L) = e_0^\infty - \frac{A}{L^2} e^{-L/\xi}, \quad (\text{III.45})$$

avec A une constante et ξ la longueur de corrélation associée à l'inverse du gap $\xi \propto 1/\Delta$. Le coefficient en $1/L^2$ permet d'interpoler la loi avec le cas où le gap d'annule. La cohérence de cette approche peut être vérifiée sur un exemple (voir figure III.7). Notons enfin qu'on peut dans certains cas moyenner les résultats sur les conditions aux limites pour évaluer les effets de taille finie [205]. Pour ce qui est des corrélations, on peut dans ce cas améliorer le fit en utilisant la distance conforme (voir chapitre II) mais les distances sont souvent trop courtes.

2 Le Groupe de Renormalisation de la Matrice Densité (DMRG)

Cette présentation est largement inspirée des articles fondateurs [208, 209] et des meilleures revues sur le sujet [198, 210–212]. On ne discutera pas les nombreux développements récents de la méthode qui n'ont pas été utilisés au cours de cette thèse.

2.1 Présentation de l'algorithme

Comme on l'a évoqué en introduction de ce chapitre, le problème à N -corps quantique est confronté au « mur exponentiel » de la taille de l'espace de Hilbert avec le nombre de sites du réseau. C'est souvent une limitation de la diagonalisation exacte quant à la discussion de la limite thermodynamique. Pour contourner ce problème, une première idée simple est de n'échantillonner qu'en partie l'espace de Hilbert, ce que font les diverses méthodes de Monte-Carlo quantique. Le but est alors de trouver les algorithmes d'échantillonnage les plus efficaces. Le DMRG s'inscrit lui dans la continuité des méthodes de renormalisation numérique pour les systèmes quantiques imaginées par Wilson [213] dans sa résolution du problème Kondo.

L'idée de base est de faire une renormalisation dans l'espace réel, en agrandissant le réseau bloc par bloc. Face à la divergence du nombre d'états dans l'espace de Hilbert, on décide de n'en conserver qu'un nombre fixé noté M à chaque étape mais il reste à bien choisir ces états. Wilson et les personnes qui ont développé par la suite le groupe de renormalisation numérique [21] choisissent de ne conserver que les M états de plus basse énergie du spectre. Cela donne de très bons résultats pour les problèmes d'impureté quantique rencontrés dans les systèmes Kondo où l'interaction avec le site que l'on rajoute décroît exponentiellement avec les itérations si bien que le spectre de basse énergie converge lors de la procédure. Malheureusement, les résultats pour des systèmes plus généraux ne sont pas exploitables [212]. En particulier, le comportement d'une particule libre sur une chaîne, dont l'hamiltonien est diagonal dans l'espace réciproque, n'est pas correctement reproduit par ces méthodes dans l'espace réel. Une première idée de White et Noack [214] fut de jouer sur les conditions aux limites à l'interfaces de deux blocs pour représenter au mieux la fonction d'onde du superbloc, combinaison des deux blocs (voir figure III.8). Plus précisément, ils combinent les

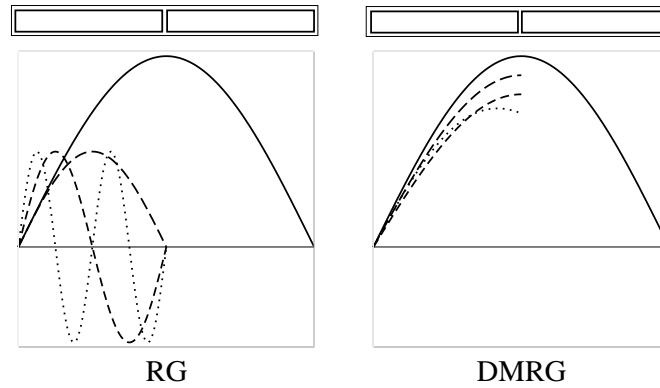


FIG. III.8: *Illustration qualitative du problème du groupe de renormalisation pour une particule libre sur une chaîne : à gauche, les états propres de plus basse énergie d'un bloc ne sont pas une bonne base pour décrire la fonction d'onde du superbloc. À droite, le DMRG cherche la base optimale du bloc pour décrire la fonction d'onde du superbloc.*

fonctions d'onde obtenues pour différentes conditions aux limites sur un bloc pour créer la base adéquate pour la description du superbloc. Les résultats furent très encourageants pour le système libre mais pas généralisables aux systèmes en interaction. Une des idées qui ressort de cette étude est que la base d'états propres sur un bloc n'est en général pas la plus pertinente pour décrire un sous-système du superbloc¹⁵ : il faut chercher des états comme ceux issus de la combinaison de plusieurs conditions aux limites et qui ne sont donc plus états propres d'un bloc. Très vite, White [208, 209] proposa un algorithme qui utilise la représentation particulière en deux blocs de la fonction d'onde du système mais avec comme critère de troncation des états leur poids dans la matrice densité réduite à un bloc. L'autre bloc jouant le rôle de bain qui va sélectionner la base optimale. L'algorithme est assez compliqué en pratique et exige une implémentation efficace et astucieuse mais il s'avère particulièrement robuste pour décrire quantitativement la plupart des systèmes quasi-unidimensionnels.

2.1.1 Représentation de la fonction d'onde du système lors de la renormalisation

La renormalisation dans l'espace réel consiste généralement à partir de blocs élémentaires et à les associer pour former un superbloc dont on ne va conserver que les degrés de liberté pertinents. On reproduit ce schéma de façon itérative en imposant de conserver toujours le même nombre de degrés de liberté à chaque étape. On va ici décrire comment l'algorithme fait croître le réseau au cours d'une itération DMRG et ses conséquences sur la représentation de la fonction d'onde. Le système S que l'on étudie est découpé en deux blocs L et R (pour gauche et droit) de sorte qu'on notera le superbloc $S = LR$ (voir figure III.9). On crée ainsi une interface au cœur du système et c'est à cet endroit qu'on va faire croître le réseau et non

¹⁵Dans le cas où la fonction d'onde du système est proche d'un produit d'états locaux sur des blocs, comme dans la chaîne Majumdar-Ghosh, cela peut rester une bonne approche. Précisons également qu'on ne discute ici que la renormalisation de la fonction d'onde (méthode variationnelle) pour résoudre le problème. D'autres méthodes développées à peu près à la même époque travaillent elles sur la détermination d'un hamiltonien effectif pour le superbloc : en plus du changement de base, de nouveaux termes d'interactions sont générés entre les blocs (méthode CORE) [215, 216].

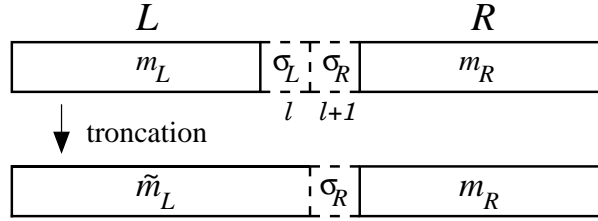


FIG. III.9: Évolution de la représentation du système au cours de la troncation.

à son extrémité comme dans le groupe de renormalisation numérique. Pour ne pas perdre de vue l'objectif : c'est bien le superbloc S (son énergie, ses fonctions d'onde de basse énergie...) qui constitue le système physique qui nous souhaitons résoudre¹⁶. Décrivons maintenant une itération.

Initialement (cf figure III.9), chaque bloc L (resp. R) est décrit par une base $\{|m_L\rangle\}$ (resp. $\{|m_R\rangle\}$) de dimension M_L (resp. M_R) avec de manière générale $M_R \neq M_L$. On suppose qu'on connaît les éléments de matrice dans ces bases des opérateurs dont on a besoin, comme ceux de l'hamiltonien. Pour faire croître le réseau, on ajoute un site au bloc de gauche et un site au bloc de droite si bien que le système devient $S = L \bullet \bullet R$. En notant $|\sigma\rangle$ les λ états locaux sur un site du réseau (typiquement $\lambda = 2, 3$ ou 4), une fonction d'onde de S s'écrit maintenant

$$|\psi_S\rangle = \sum_{m_L=1}^{M_L} \sum_{\sigma_L=1}^{\lambda} \sum_{\sigma_R=1}^{\lambda} \sum_{m_R=1}^{M_R} \psi_{m_L \sigma_L \sigma_R m_R} |m_L\rangle |\sigma_L\rangle |\sigma_R\rangle |m_R\rangle \quad (\text{III.46})$$

$$= \sum_{i=1}^{N_L} \sum_{j=1}^{N_R} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle, \quad (\text{III.47})$$

les nouveaux blocs $L \bullet$ et $\bullet R$ contenant $N_{L/R} = \lambda M_{L/R}$ états et leurs bases $\{|i\rangle \equiv |m_L \sigma_L\rangle\}$, $\{|j\rangle \equiv |m_R \sigma_R\rangle\}$. Au cours du processus de renormalisation, on peut choisir de déterminer une ou plusieurs fonction d'onde d'un état de basse énergie : on dit qu'on « vise » (ou « cible ») un ou plusieurs états. On considérera ici pour simplifier qu'on ne vise ici qu'un état, le fondamental. À ce stade, les ψ_{ij} optimaux pour décrire l'état visé sont calculés en utilisant l'algorithme de Davidson ou de Lanczos pour lesquels il faut savoir appliquer $\mathcal{H}_{L \bullet \bullet R}$ sur un vecteur $|\psi_S\rangle$ (discuté dans la section 2.2). Une fois déterminés, on obtient au passage l'énergie et les mesures locales sur les sites ajoutés. Afin d'éviter l'explosion du nombre d'états à l'itération suivante, on va devoir tronquer les bases de $L \bullet$ et $\bullet R$ pour ne conserver qu'au maximum M états avec un critère bien choisi (discuté ci-après). Cela correspond à un changement de base non unitaire matérialisé par une matrice rectangulaire de taille $M \times N$ et il faudra donc penser à effectuer ce changement de base sur l'hamiltonien et les observables que l'on souhaite évaluer (voir la section 2.2). On voit d'ailleurs qu'à la différence de la diagonalisation exacte, les éléments de matrice de l'hamiltonien ne sont ainsi qu'approximativement représentés. Après quoi, on est ensuite ramener au début d'une itération en prenant $L \bullet \rightarrow L$ et $R \leftarrow \bullet R$. Il est important de noter ici que ce découpage bipartite particulier de la fonction d'onde convient bien aux systèmes unidimensionnels mais on ne

¹⁶Dans la littérature, on parle souvent de système pour le bloc L et d'environnement pour le bloc R avec la désignation superbloc pour l'ensemble système+environnement.

s'attend pas à ce qu'il soit optimal pour un système bidimensionnel par exemple, ce qu'on observe numériquement.

2.1.2 Critère de troncation des états

Lors de la troncation des états des blocs $L\bullet$ et $\bullet R$, on veut ne conserver que les états qui décrivent le mieux ce que doivent être les futurs sous-systèmes L et R du système S . Lorsqu'on va passer de λM à M états, la majorité des états va être rejetée, si bien que le principe de troncation est d'autant plus efficace que la représentation des sous-systèmes va peu évoluer au cours des itérations. Autrement dit, la projection de l'état visé sur un bloc évoluera peu à mesure que la taille du système augmente. Ceci est légitime si les blocs L/R comportent déjà un nombre de sites appréciables si bien qu'en ajouter un à l'étape suivante (au centre de S qui plus est) modifiera peu la fonction d'onde du superbloc.

Pour comprendre qualitativement le choix du critère proposé par White [211], imaginons que l'on mesure une observable locale \hat{o} qui se trouve dans le bloc $L\bullet$, le résultat est

$$\langle \hat{o} \rangle = \langle \psi_S | \hat{o} | \psi_S \rangle = \text{Tr}_{L\bullet}(\hat{\rho}_{L\bullet} \hat{o}), \quad (\text{III.48})$$

où l'on a introduit la matrice densité réduite $\hat{\rho}_{L\bullet} = \text{Tr}_{\bullet R} |\psi_S\rangle \langle \psi_S|$ correspondant au bloc $L\bullet$ avec $\text{Tr}_{\bullet R}$ la trace partielle sur le bloc $\bullet R$ (et de même pour $\text{Tr}_{L\bullet}$). Soient $|\alpha\rangle$ les vecteurs propres de $\hat{\rho}_{L\bullet}$ et ω_α leurs valeurs propres associées, (III.48) se réécrit alors

$$\langle \hat{o} \rangle = \sum_{\alpha=1}^{N_L} \omega_\alpha \langle \alpha | \hat{o} | \alpha \rangle. \quad (\text{III.49})$$

Si on ne conserve que les M_L états propres $|\alpha\rangle$ qui ont les plus grands poids ω_α , l'erreur commise sur l'observable sera de l'ordre de

$$|\langle \hat{o}_L \rangle_{\text{tronqué}} - \langle \hat{o}_L \rangle| \leq \epsilon \times \max \langle \hat{o}_L \rangle, \quad (\text{III.50})$$

où $\max \langle \hat{o}_L \rangle$ est une majoration de l'observable \hat{o}_L . Cela introduit le *poids rejeté*

$$\epsilon = \sum_{\alpha=M_L+1}^{N_L} \omega_\alpha = 1 - \sum_{\alpha=1}^{M_L} \omega_\alpha, \quad \text{avec } 0 \leq \epsilon \leq 1. \quad (\text{III.51})$$

C'est une quantité essentielle dans le contrôle de la convergence de l'algorithme et qui est généralement très petite (cf figure III.10). Au final, on voit qu'on a intérêt à décrire le futur bloc L avec les états propres de $\hat{\rho}_{L\bullet}$ ayant les poids les plus grands.

Plus quantitativement [210], montrons que ce choix est optimal pour la représentation de la future fonction d'onde du système. Partant de l'expression (III.47) pour la fonction d'onde du système (supposée réelle pour simplifier), on veut trouver la base orthonormée $\{|\alpha\rangle = \sum_i u_{\alpha i} |i\rangle\}$ n'ayant que $M_L < N_L$ états et qui minimise l'erreur $\| |\psi_S\rangle - |\tilde{\psi}_S\rangle \|^2$ commise lors de la troncation avec

$$|\tilde{\psi}_S\rangle = \sum_{\alpha=1}^{M_L} \sum_{j=1}^{N_R} a_{\alpha j} |\alpha\rangle |j\rangle. \quad (\text{III.52})$$

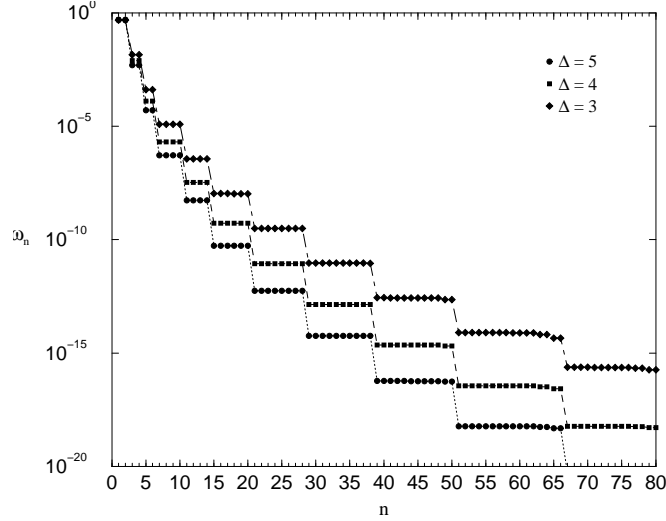


FIG. III.10: Illustration du comportement des n plus grandes valeurs propres ω_n de la matrice densité sur une chaîne XXZ (avec $\Delta = J_z/J_{xy} > 1$) : la plupart des états ont un poids négligeable si bien que n'en conserver qu'un nombre restreint est pertinent. D'après Peschel et al. [217].

Une fois faite la minimisation par rapport aux $a_{\alpha j}$, il reste à minimiser la quantité

$$1 - \sum_{\alpha i i'} u_{\alpha i} \left(\sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j} \right) u_{\alpha i'} = 1 - \sum_{\alpha i i'} u_{\alpha i} \rho_{i i'} u_{\alpha i'} = 1 - \sum_{\alpha i i'} \langle \alpha | i \rangle \langle i | \rho | i' \rangle \langle i' | \alpha \rangle \quad (\text{III.53})$$

par rapport aux $u_{\alpha i}$. Cette dernière étant minimale en choisissant les $\{|\alpha\rangle\}$ comme vecteurs propres de ρ avec les plus grands poids ω_α , on obtient pour l'erreur

$$\| |\psi_S\rangle - |\tilde{\psi}_S\rangle \|^2 = 1 - \sum_{\alpha=1}^{M_L} \omega_\alpha = \epsilon \quad (\text{III.54})$$

elle aussi contrôlée par le poids rejeté.

Dans le cas où l'on vise plusieurs états $|\psi_S^{1,\dots,v}\rangle$ décomposés sous la forme (III.47), on doit introduire les probabilités π_v (qui vérifient $\sum_v \pi_v = 1$) d'obtenir chacun des états. On va chercher une base $\{|\alpha\rangle\}$ qui soit optimale pour représenter toutes les fonctions d'onde $|\psi_S^{1,\dots,v}\rangle$. Ainsi, chacune des fonctions d'onde approximées se réécrit

$$|\tilde{\psi}_S^v\rangle = \sum_{\alpha=1}^{M_L} \sum_{j=1}^{N_R} a_{\alpha j}^v |\alpha\rangle |j\rangle, \quad (\text{III.55})$$

et l'erreur à minimiser est

$$\sum_{v=1}^v \pi_v \| |\psi_S^v\rangle - |\tilde{\psi}_S^v\rangle \|^2. \quad (\text{III.56})$$

On trouve alors [208] que la base optimale est celle des états propres de la matrice densité réduite

$$\hat{\rho} = \sum_{v=1}^v \pi_v \text{Tr}_{\bullet R} |\psi_S^v\rangle \langle \psi_S^v| \quad (\text{III.57})$$

correspondant à l'état mixte des v fonctions d'ondes du superbloc pondérées des poids π_v . Si l'on souhaite avoir une représentation également optimale pour toutes les fonctions d'onde, on prendra des π_v tous égaux. À M fixé, il est plus facile pour un sous-espace d'être optimal pour la description d'une seule fonction d'onde que de plusieurs si bien qu'un nombre d'états conservés M plus grand est généralement nécessaire pour une précision équivalente sur les observables.

2.1.3 Notion de décomposition de Schmidt et lien avec l'entropie d'intrication

En préambule, rappelons que toute matrice rectangulaire \mathbf{A} de taille $N_1 \times N_2$ peut être décomposée selon le produit

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \cdot \begin{pmatrix} \sqrt{\omega_1} & & & \\ & \sqrt{\omega_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sqrt{\omega_{N_2}} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{V}^T, \quad (\text{III.58})$$

avec \mathbf{U} une matrice rectangulaire $N_1 \times N_2$ dont les colonnes sont orthonormales, \mathbf{W} une matrice carrée diagonale dont tous les éléments $\sqrt{\omega_k}$ sont positifs ou nuls et \mathbf{V} une matrice $N_2 \times N_2$ orthonormale ($\mathbf{U}^T \mathbf{U} = \mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbb{I}$). Cette décomposition en « valeurs singulières » (les $\sqrt{\omega_k}$) est calculable numériquement et très utile dans les problèmes de résolution d'équations linéaires où l'on a justement des singularités [218]. Ce qui nous intéresse plus particulièrement ici est qu'elle permet de construire les meilleures approximations de la matrice \mathbf{A} au sens des moindres carrés comme dans (III.54). En effet, si on ne décide de conserver que $M \leq \min(N_1, N_2)$ vecteurs colonnes de \mathbf{U} et \mathbf{V} , il est démontré que la meilleure approximation pour les A_{ij} est alors

$$\tilde{A}_{ij} = \sum_{k=1}^M \sqrt{\omega_k} U_{ik} V_{jk}, \quad (\text{III.59})$$

où les indices k conservés ont les plus gros poids ω_k . Si les vecteurs rejetés sont tels que les ω_k sont négligeables, on aura une très bonne approximation de \mathbf{A} . On voit tout de suite le lien avec le DMRG si on prend comme matrice $A_{ij} = \psi_{ij}$ dans l'équation (III.47). Dans ce cas, la matrice densité réduite au bloc L est diagonalisée par la matrice \mathbf{U}

$$\rho = \left(\sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j} \right) = \mathbf{U} \cdot \mathbf{W}^2 \cdot \mathbf{U}^T \quad (\text{III.60})$$

et ses valeurs propres sont les ω_k . La meilleure approximation réduite à M états conservés $\tilde{\psi}_{ij}$ sera donnée par (III.59), c'est-à-dire les vecteurs propres de plus forts poids de ρ . C'est

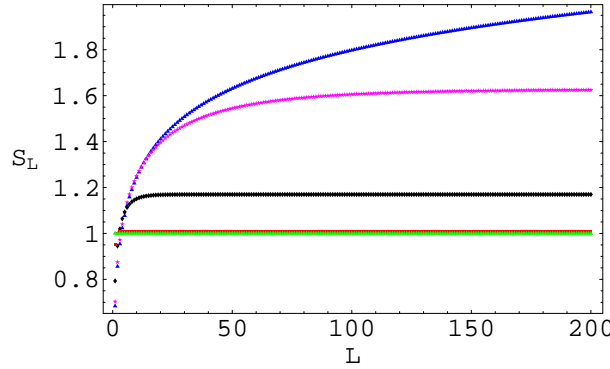


FIG. III.11: Mesure de l'entropie d'intrication entre les deux blocs en fonction de la taille du bloc : elle diverge pour un système critique (bleu) mais converge vers une constante pour un système gappé (autres courbes). D'après Latorre et al. [219].

l'argument initialement proposé par White [208, 209] pour démontrer la nature optimale du critère de troncature utilisé. En pratique, il n'est pas nécessaire de calculer numériquement la décomposition en valeur singulière de ψ_{ij} car on ne veut que les ω_k et la matrice de changement de base \mathbf{U} qui s'obtiennent beaucoup plus rapidement par la diagonalisation directe de ρ .

Utilisons maintenant la décomposition en valeur singulière (III.58) et (III.59) avec $M = N^{\text{Schmidt}} \equiv \min(N_L, N_R)$ (dans ce cas aucune approximation n'est faite), pour réécrire la fonction d'onde (III.47) du système sous la forme

$$|\psi^S\rangle = \sum_{k=1}^{N^{\text{Schmidt}}} \sqrt{\omega_k} \left(\sum_{i=1}^{N_L} U_{ik} |i\rangle \right) \left(\sum_{j=1}^{N_R} V_{jk} |j\rangle \right) = \sum_{k=1}^{N^{\text{Schmidt}}} \sqrt{\omega_k} |L_k\rangle |R_k\rangle. \quad (\text{III.61})$$

On est donc passé d'une double somme sur les (i, j) à une seule somme sur les indices k des états-produits entre partie gauche et droite. Ceci est important pour discuter la notion d'intrication dans les systèmes bipartites (en deux morceaux). On dit qu'un état $|\psi^S\rangle$ du système est séparable si on peut écrire sa fonction d'onde simplement comme le produit des fonctions d'ondes des deux sous-systèmes $|\psi^S\rangle = |L\rangle |R\rangle$. Dans le cas contraire, $|\psi^S\rangle$ n'est pas séparable et on dit qu'il y a alors intrication entre L et R . L'exemple le plus simple étant celui de deux spins couplés dont les états $S^z = 0$, $(|\uparrow\downarrow\rangle \pm |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ sont intriqués alors que les états $S^z = \pm 1$, $|\uparrow\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\downarrow\rangle$, sont séparables. Le nombre de Schmidt N^{Schmidt} dit simplement qu'il y a intrication si $N^{\text{Schmidt}} \geq 2$ si bien que l'algorithme, en choisissant de conserver les ω_k les plus grands va donc qualitativement tendre à maximiser l'intrication entre les blocs.

Une mesure plus quantitative de l'intrication entre deux sous-systèmes se fait à l'aide de l'entropie de von Neumann $S_{\text{ent.}} = -\text{Tr} \rho \ln \rho$ avec ρ la matrice réduite à un sous-système. Or, la décomposition de Schmidt (III.61) permet d'écrire les matrices densités réduites sur chacun des deux blocs d'une façon symétrique

$$\rho_L = \sum_{k=1}^{N^{\text{Schmidt}}} \omega_k |L_k\rangle \langle L_k| \quad \text{et} \quad \rho_R = \sum_{k=1}^{N^{\text{Schmidt}}} \omega_k |R_k\rangle \langle R_k|, \quad (\text{III.62})$$

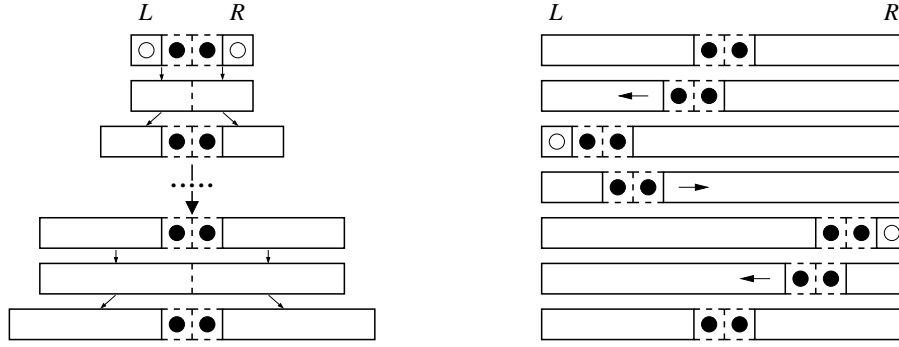


FIG. III.12: Algorithmes DMRG pour un système infini (*warm-up*) à gauche et pour système fini (un *sweep* représenté) à droite.

de telle sorte qu'on obtient finalement

$$S_{\text{ent.}} = - \sum_{k=1}^{N^{\text{Schmidt}}} \omega_k \ln \omega_k. \quad (\text{III.63})$$

Ainsi, l'algorithme va choisir les états qui maximisent l'entropie d'intrication de von Neumann entre les blocs. Cette entropie peut d'ailleurs se calculer par le DMRG (cf figure III.11) qui montre qu'elle diverge pour un système critique alors qu'elle tend vers une constante pour un système gappé. Il y a en fait des arguments théoriques [219–221] sur les systèmes critiques comme les liquides de Luttinger avec interaction à courte portée qui proposent une loi $S_{\text{ent.}}(L) \sim \ln L$ pour l'entropie d'un bloc de taille L . Bien qu'elle diverge avec la taille du bloc (et donc du système), ce n'est trop contraignant pour le DMRG car le préfacteur (de l'ordre de $c/6$ avec c la charge centrale) est petit. Les valeurs de l'entropie sont donc très faibles même pour un système de plusieurs centaines de sites (voir figure III.11) ce qui fait qu'on peut correctement décrire des systèmes *critiques* de taille finie. Pris à l'envers, ce résultat signifie que, très grossièrement, seul un petit nombre L d'états du bloc vont avoir une contribution non négligeable d'environ $1/L$ à l'entropie puisque $-L \times 1/L \ln 1/L \sim \ln L$. Cela justifie l'efficacité du DMRG pour les systèmes type liquide de Luttinger. Toutefois, l'entropie croîtrait en dimension deux au moins comme le périmètre L du bloc pour un système non gappé ce qui rend moins légitime une troncation aussi forte des états [210].

2.1.4 Algorithme DMRG de taille infinie (*warm-up*)

Sur la base de ces idées, le premier algorithme proposé consiste à partir de quatre sites $L = R \equiv \bullet$ pour lesquels on a une représentation exacte de S puis d'appliquer l'itération proposée ci-dessus. Une fois les états de $L\bullet$ tronqués pour donner le nouveau L , on remplace $\bullet R$ par la réflexion du nouveau L (voir figure III.12). On a ainsi toujours un nombre pair de sites et $M_L = M_R$. On arrête l'algorithme lorsque le système S atteint la taille voulue. En pratique, cet algorithme ne donne pas de bons résultats car lors des premières itérations, le bloc R qui joue le rôle de « bain » pour le bloc L est petit et ne permet pas une bonne description de ce que serait L dans un système S très grand. Les erreurs accumulées dès les premières itérations se répercutent sur les suivantes.

2.1.5 Algorithme de taille finie (sweeps)

Pour palier à ce problème, il a été immédiatement proposé par White d'arrêter l'algorithme de taille infinie lorsqu'une taille définie était atteinte. Cette première phase est alors appelée warm-up. On procède ensuite à des sweeps (balayages) de gauche à droite et de droite à gauche qui ont pour but d'améliorer les descriptions des blocs de différentes tailles obtenus lors du warm-up. Pour cela, lorsqu'on ajoute un site au bloc L , on en enlève un au bloc R (voir figure III.12). On ne tronque alors que les états du bloc $L\bullet$ et on utilise comme représentation de R celle issue du warm-up. Lorsqu'on atteint le bord (pour $R = \bullet$), on repart dans l'autre sens en optimisant cette fois seulement les représentations des blocs R . Lorsque les blocs L et R ont la même taille, on peut utiliser la réflexion pour mettre à jour les blocs les plus anciennement optimisés avec les représentations les plus récentes. On optimise ainsi la description des deux blocs de façon symétrique. En pratique, l'énergie diminue énormément lors des premiers sweeps puis converge rapidement. Cet algorithme correspond au véritable algorithme DMRG, le warm-up n'étant là que pour donner une première approximation de la fonction d'onde. On se rend d'ailleurs compte que cet algorithme de taille finie correspond à une optimisation variationnelle. Enfin, si on reprend les formules (III.62), on voit que lorsqu'on arrive sur les bords du système, à droite par exemple, on aura $N_R \sim \lambda^2 < M$ et donc au maximum N_R poids non nuls. Numériquement, les poids ne seront pas nuls mais on conservera $M - N_R$ états en trop qui vont faire légèrement remonter l'énergie variationnelle (voir les oscillations lorsqu'on atteint les bords du système dans la figure III.15).

2.2 Quelques précisions sur l'implémentation

On reprend ici les différents étapes qui reviennent à chaque itération en précisant un peu plus ce qu'il se passe. Pour la clarté, commençons par préciser les notations (voir figure III.9). Les états des blocs L/R précédemment obtenus sont notés $|m_{L/R}\rangle$. Les états sur site sont notés $|\sigma\rangle$. Les états de $L\bullet$ et $\bullet R$ sont notés $|i\rangle \equiv |m_L\rangle|\sigma_L\rangle \equiv |m_L\sigma_L\rangle$ et $|j\rangle \equiv |\sigma_R\rangle|m_R\rangle \equiv |\sigma_R m_R\rangle$ avec aussi $|ij\rangle = |i\rangle|j\rangle$. Après troncation $L\bullet \rightarrow \tilde{L}$ et $\tilde{R} \leftarrow \bullet R$, les états conservés sont notés $|\tilde{m}_{L/R}\rangle$; les kets $|\alpha\rangle$ représenteront eux tous les vecteurs propres de la matrice densité réduite à un bloc. Les primes ' seront réservés aux différents états d'une même base. Lors des sweeps dans l'algorithme de taille finie, on notera les indices des sites à l'interface des deux blocs $l + 1$ et $l + 2$ et par $\{|m_l\rangle\}$ la base du bloc L qui a la dimension l et par $\{|m_{L-l-2}\rangle\}$ celle du bloc R de taille $L - l - 2$ si L est la taille de la chaîne.

2.2.1 Construction de l'hamiltonien du superbloc et calcul de $\mathcal{H}_S|\psi_S\rangle$

Après avoir rajouté les sites, on doit construire la représentation de l'hamiltonien du système entier que l'on peut décomposer (en supposant des interactions seulement aux plus proches voisins pour simplifier) :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_S &= \mathcal{H}_L + \mathcal{H}_{L-\bullet} + \mathcal{H}_{\bullet-\bullet} + \mathcal{H}_{\bullet-R} + \mathcal{H}_R \\ &= \mathcal{H}_{L\bullet} + \mathcal{H}_{\bullet-\bullet} + \mathcal{H}_{\bullet R} \end{aligned} \quad (\text{III.64})$$

où $\mathcal{H}_{L/R}$ contient la représentation de l'hamiltonien sur chacun des blocs L/R et les autres termes correspondent aux nouveaux couplages introduits par l'ajout des sites. Prenons le cas

d'un terme de l'hamiltonien de Heisenberg. La décomposition (III.64) s'écrit

$$\begin{aligned} \langle i'j' | \mathcal{H}_S | ij \rangle &= \langle i' | \mathcal{H}_{L\bullet} | i \rangle \delta_{j'j} + \langle j' | \mathcal{H}_{\bullet R} | j \rangle \delta_{i'i} \\ &\quad + \langle i' | S_i^z | i \rangle \langle j' | S_{i+1}^z | j \rangle + \frac{1}{2} [\langle i' | S_i^+ | i \rangle \langle j' | S_{i+1}^- | j \rangle + \langle i' | S_i^- | i \rangle \langle j' | S_{i+1}^+ | j \rangle] , \end{aligned}$$

et on remarque qu'elle s'écrit donc de manière générale comme une somme de produits de termes de chacun des blocs

$$\langle i'j' | \mathcal{H}_S | ij \rangle = \sum_{\nu} \langle i' | h_L^{\nu} | i \rangle \langle j' | h_R^{\nu} | j \rangle , \quad (\text{III.65})$$

où les $h_{L/R}^{\nu}$ sont des opérateurs n'agissant que sur un seul des blocs. Notons que des termes à plus longue portée peuvent eux aussi se ramener à l'expression générale (III.65). Pour une meilleure efficacité numérique, le calcul de $|\bar{\psi}_S\rangle = \mathcal{H}_S |\psi_S\rangle$ intervenant dans l'algorithme de Davidson peut ainsi se décomposer en deux produits de matrices successifs :

$$\bar{\psi}_{i'j'} = \sum_{i,j} \psi_{ij} \langle i'j' | \mathcal{H}_S | ij \rangle = \sum_{\nu} \sum_i \langle i' | h_L^{\nu} | i \rangle \left(\sum_j \psi_{ij} \langle j' | h_R^{\nu} | j \rangle \right) . \quad (\text{III.66})$$

Reste à former les éléments de matrices de type $\langle i' | h_L^{\nu} | i \rangle$ à partir de la connaissance des représentations d'opérateurs issues de l'étape précédente.

2.2.2 Représentation des états et nombres quantiques

En raison de la décomposition particulière de la fonction d'onde du système en deux blocs, on voit que les symétries de \mathcal{H}_S additives entre blocs seront faciles à implémenter. Par exemple, le spin total selon z peut se fixer en ne conservant que les termes qui couplent les états tels que $S_{\text{tot}}^z = \hat{S}_{L\bullet}^z(|i\rangle) + \hat{S}_{\bullet R}^z(|j\rangle)$. De même, le nombre total de particules peut être maintenu fixe. Ainsi, on classera les états en fonction de leurs nombres quantiques à la différence de la diagonalisation exacte. L'information sur la nature des sites locaux sera quant à elle transportées par les opérateurs. Des développements récents par McCulloch [222] généralisent l'algorithme à des symétries non abélienne comme $SU(2)$ en utilisant le théorème de Wigner-Eckart. Outre le surplus d'information, cela permet une meilleure convergence grâce à la diminution de la densité d'états à basse énergie.

2.2.3 Détermination et diagonalisation de la matrice densité réduite

Pour obtenir les états conservés du futur bloc \tilde{L} , il faut former la matrice densité réduite au bloc $L\bullet$ (de taille N_L) en traçant sur le bloc $\bullet R$

$$\hat{\rho} \equiv \hat{\rho}_{L\bullet} = \text{Tr}_{\bullet R} |\psi_S\rangle \langle \psi_S| . \quad (\text{III.67})$$

Dans le cas où l'on vise plusieurs états $|\psi_S^{1,\dots,\nu}\rangle$, on utilise la formule (III.57). Une fois formée, on diagonalise $\hat{\rho}$ pour obtenir ses N_L vecteurs propres orthonormés et valeurs propres $\hat{\rho}|\alpha\rangle = \omega_{\alpha}|\alpha\rangle$. On ne garde que les M_L états propres de plus grand poids ω_{α} et notés $|\tilde{m}_L\rangle$ et on calcule le poids rejeté ϵ selon (III.51). Cela permet aussi de construire la matrice de changement de base rectangulaire d'éléments $\langle \tilde{m}_L | m_L \sigma_L \rangle$. Il est très facile à ce stade-là de calculer l'entropie de von Neumann à partir de (III.63).

2.2.4 Calcul d'observables

On peut calculer des observables à temps égaux connaissant la fonction d'onde de l'état visé via ses $\psi_{ij} = \langle ij | \psi_S \rangle$. Pour une observable locale O_s au site $s < l$ dans le bloc L (la décomposition pour le bloc R est symétrique), on a

$$\langle \psi_S | O_s | \psi_S \rangle = \sum_{ii'j} \langle \psi_S | ij \rangle \langle i | O_s | i' \rangle \langle i' j | \psi_S \rangle \quad (\text{III.68})$$

$$= \sum_{\substack{m_L m'_L \sigma_L \\ \sigma_R m_R}} \langle \psi_S | m_L \sigma_L \sigma_R m_R \rangle \langle m_L | O_s | m'_L \rangle \langle m'_L \sigma_L \sigma_R m_R | \psi_S \rangle. \quad (\text{III.69})$$

Pour une observable qui se trouve au site l , on aura

$$\langle \psi_S | O_l | \psi_S \rangle = \sum_{\substack{m_L \sigma_L \sigma'_L \\ \sigma_R m_R}} \langle \psi_S | m_L \sigma_L \sigma_R m_R \rangle \langle \sigma_L | O_l | \sigma'_L \rangle \langle m_L \sigma'_L \sigma_R m_R | \psi_S \rangle. \quad (\text{III.70})$$

En pratique, $\langle \sigma_L | O_l | \sigma'_L \rangle$ étant écrit exactement, on utilise (III.70) pour calculer une moyenne locale juste après la détermination des ψ_{ij} . On peut aussi utiliser (III.68) à la fin de la dernière itération DMRG mais cela suppose de connaître les $\langle m_L | O_s | m'_L \rangle$ et donc d'avoir suivi leur évolution au cours des sweeps.

Pour le calcul des fonctions de corrélations $O_s O_{s'}$ entre les sites s et s' , on procède de la même manière en distinguant le cas où s et s' sont sur des blocs différents (s sur L et s' sur R par exemple)

$$\langle \psi_S | O_s O_{s'} | \psi_S \rangle = \sum_{ii'jj'} \langle \psi_S | ij \rangle \langle i | O_s | i' \rangle \langle j | O_{s'} | j' \rangle \langle i' j' | \psi_S \rangle, \quad (\text{III.71})$$

et le cas où ils sont sur le même bloc (ici le bloc L)

$$\langle \psi_S | O_s O_{s'} | \psi_S \rangle = \sum_{ii'j} \langle \psi_S | ij \rangle \langle i | O_s O_{s'} | i' \rangle \langle i' j | \psi_S \rangle \quad (\text{III.72})$$

$$\neq \sum_{ii''j} \langle \psi_S | ij \rangle \langle i | O_s | i'' \rangle \langle i'' | O_{s'} | i' \rangle \langle i' j | \psi_S \rangle. \quad (\text{III.73})$$

L'inégalité (III.73) vient de ce que la base $\{|i\rangle\}$ est incomplète dans le sens où elle n'est pas adaptée à la description des états excités¹⁷ $O_{s'} | \psi_S \rangle$. Il faut donc suivre l'évolution de l'opérateur $O_s O_{s'}$ au cours des itérations DMRG et pas seulement celle de O_s et $O_{s'}$ séparément. Cette méthode se généralise aux calculs de corrélations à n -points quelconques $\langle O_{s_1} \cdots O_{s_n} \rangle$ pour lesquelles on différenciera le groupe d'opérateur sur le même bloc de ceux sur des blocs différents.

¹⁷Ce problème ne se poserait pas en diagonalisation exacte où les produits d'opérateurs sont exactement représentés dans les deux décompositions.

2.2.5 Évolution des opérateurs lors de la troncation

Il faut suivre les modifications de la base lors de la troncation. Si l'opérateur agit localement au site $s < l$, on aura dans la base tronquée

$$\langle \tilde{m}_L | O_s | \tilde{m}'_L \rangle = \sum_{m_L, m'_L, \sigma_L} \langle \tilde{m}_L | m_L \sigma_L \rangle \langle m_L | O_s | m'_L \rangle \langle m'_L \sigma_L | \tilde{m}'_L \rangle, \quad (\text{III.74})$$

s'il agit au site l , ce sera

$$\langle \tilde{m}_L | O_l | \tilde{m}'_L \rangle = \sum_{m_L, \sigma_L, \sigma'_L} \langle \tilde{m}_L | m_L \sigma_L \rangle \langle \sigma_L | O_l | \sigma'_L \rangle \langle m_L \sigma'_L | \tilde{m}'_L \rangle. \quad (\text{III.75})$$

De même pour la mise à jour des opérateurs du bloc R . On connaît la matrice de changement de base rectangulaire $\langle \tilde{m}_L | m_L \sigma_L \rangle$ après la troncation. Pour l'efficacité, ces opérations se décomposent en deux produits de matrices successifs.

2.2.6 Construction d'une fonction d'onde guess pour le Davidson

Lors de l'utilisation des algorithmes de Davidson ou Lanczos qui consomment la majeure partie du temps de calcul, on peut partir d'une fonction d'onde non pas aléatoire mais proche du fondamental et ce en utilisant l'information obtenue lors des dernières itérations DMRG [210, 212, 223]. Cela entraîne un gain considérable dans le nombre d'itérations Davidson nécessaires pour arriver à la convergence (typiquement quelques itérations suffisent) et par là un gain en temps CPU significatif (facteur 10-100). L'algorithme pour un système infini ne se prête pas facilement à cette optimisation [210]. Lors des sweeps, on connaît en revanche des représentations des bases tronquées sur des blocs de toutes tailles obtenues précédemment.

Imaginons que l'on effectue un sweep de la gauche vers la droite et que l'indice du dernier site du bloc L est l si bien qu'on aura $l + 1$ et $l + 2$ pour les deux sites du milieu ainsi que $l + 3$ pour le premier site du bloc de droite. On connaît de l'itération précédente la représentation de la fonction d'onde dans la base $\{|m_l \sigma_{l+1} \sigma_{l+2} m_{L-l-2}\rangle\}$. A l'itération suivante, on va développer $|\psi_S\rangle$ dans la base $\{|m_{l+1} \sigma_{l+2} \sigma_{l+3} m_{L-l-3}\rangle\}$ et on cherche donc une bonne approximation des $\psi_{m_{l+1} \sigma_{l+2} \sigma_{l+3} m_{L-l-3}}$ à partir de la connaissance des $\psi_{m_l \sigma_{l+1} \sigma_{l+2} m_{L-l-2}}$ et de celle des matrices de changement de base tronquée $\langle m_{l+1} | m_l \sigma_{l+1} \rangle$ obtenue lors de l'itération précédente et $\langle m_{L-l-3} \sigma_{l+3} | m_{L-l-2} \rangle$ obtenue lors d'un sweep précédent de la droite vers la gauche (ou du warm-up). On utilise donc

$$\begin{aligned} \psi_{m_{l+1} \sigma_{l+2} \sigma_{l+3} m_{L-l-3}}^{\text{guess}} &= \langle m_{l+1} \sigma_{l+2} \sigma_{l+3} m_{L-l-3} | \psi_S \rangle \\ &= \sum_{\substack{m_{L-l-2} \\ m_l, \sigma_{l+1}}} \langle m_{L-l-3} \sigma_{l+3} | m_{L-l-2} \rangle \langle m_{l+1} | m_l \sigma_{l+1} \rangle \langle m_l \sigma_{l+1} \sigma_{l+2} m_{L-l-2} | \psi_S \rangle \\ &= \sum_{m_{L-l-2}} \langle m_{L-l-3} \sigma_{l+3} | m_{L-l-2} \rangle \sum_{m_l, \sigma_{l+1}} \langle m_{l+1} | m_l \sigma_{l+1} \rangle \psi_{m_l \sigma_{l+1} \sigma_{l+2} m_{L-l-2}}, \end{aligned}$$

La dernière forme montre que la construction du guess peut se faire par deux produits de matrices successifs et au final cette étape est peu coûteuse en comparaison du gain obtenu dans l'algorithme de Davidson. Conserver les matrices de passage en mémoire n'est pas plus

coûteux que de garder la représentation des blocs et si besoin, on peut choisir de les écrire sur le disque. Il est important de noter, comme les changements de bases sont tronqués, que la base

$$|m_{l+1}\rangle = \sum_{m_l \sigma_{l+1}} \langle m_l \sigma_{l+1} | m_{l+1} \rangle |m_l \sigma_{l+1}\rangle, \quad (\text{III.76})$$

par exemple, ne vérifie qu'approximativement la complétude

$$\sum_{m_{l+1}} |m_{l+1}\rangle \langle m_{l+1}| \simeq \mathbb{I}, \quad (\text{III.77})$$

et de même pour $|m_{L-l-2}\rangle$. Si ce n'était pas le cas, la décomposition reviendrait simplement à faire un changement de base exact.

2.2.7 Correction de la méthode avec un seul site au milieu

Nous présentons succinctement une proposition de White [224] pour améliorer la convergence de l'algorithme et le temps de calcul qui a été utilisée à plusieurs reprises au cours de cette thèse. Cette amélioration repose sur l'observation qu'on pourrait très bien formuler l'algorithme DMRG en n'utilisant que deux blocs plus un site pour faire croître le bloc L comme représenté dans la figure III.13. En effet, jusqu'à présent, nous avons considéré que les deux blocs comportaient chacun un site exactement décrit au niveau de l'interface de L et R (cf figure III.9). Cette configuration semble naturelle dans le warm-up où l'on utilise une configuration en miroir pour les deux blocs. Cependant, cela a pour conséquence que le temps CPU varie comme λ^2 puisqu'on a deux sites décrits exactement (cf section 2.3) alors qu'on aurait seulement λ avec un seul site. En fait, l'algorithme similaire à ce qui a été présenté avec seul site (on a alors simplement $|m_R\rangle$ comme base de R et non $|\sigma_R m_R\rangle$) fonctionne mais converge moins bien que celui avec deux sites et a tendance à rester bloqué dans des états métastables. Pour expliquer cela, White pointa le fait qu'il arrivait que la base du bloc R soit trop restreinte pour décrire toutes les transitions virtuelles associées à l'hamiltonien entre les deux blocs et ainsi, qu'il manque certaines contributions à la matrice densité réduite sur L , erreurs qui se retrouveront dans la base tronquée. Autrement dit, si l'environnement n'est pas suffisamment bien décrit, l'optimisation de la base pour L est moins efficace. Prenons l'exemple du modèle de Heisenberg dans lequel on vise un état ayant $S_{\text{tot}}^z = 0$: chacun des blocs comprend des états de spin total $S_{L/R}^z$ repartis autour de zéro mais pouvant prendre des valeurs relativement grandes (cf figure III.13). Le couplage entre les blocs par l'hamiltonien peut générer des transitions entre états $S_L^z = -S_R^z$. Or, si certains états dans la base tronquée de R manquent pour ces transitions, on ne va pas avoir une bonne représentation des fluctuations induites par l'hamiltonien. Le cas le pire serait celui où S_R^z serait nul pour tous les états de la base de R . On voit que dans ce cas, la méthode avec deux sites permet d'élargir l'espace de Hilbert de R d'un facteur λ et y introduit naturellement des états avec de nouveaux nombres quantiques non initialement présents dans la base tronquée de R . C'est pourquoi cette dernière converge mieux. On peut restorer artificiellement des fluctuations supplémentaires en ajoutant à R des états avec d'autres nombres quantiques mais cela entraîne une nouvelle source d'erreur difficile à contrôler.

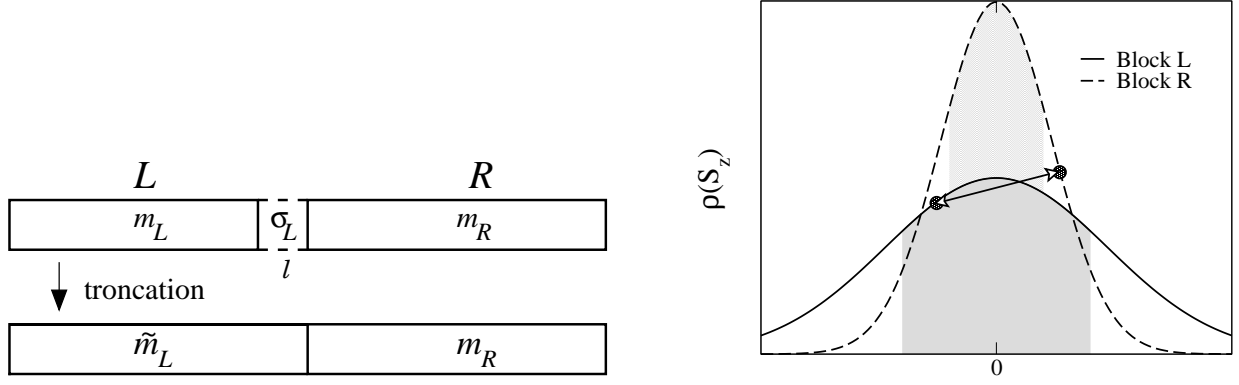


FIG. III.13: *Algorithme DMRG avec un seul site au milieu.* À gauche, le représentation de la fonction d'onde. À droite, sans correction à la matrice densité, certaines transitions virtuelles entre blocs ne sont pas correctement reproduites si les bases tronquées ne contiennent pas suffisamment de nombres quantiques différents. En grisé sont représentées très schématiquement les densités d'états des deux blocs en fonction d'un nombre quantique (ici S^z) par rapport à ce qu'on attendrait pour l'espace de Hilbert complet (lignes).

La proposition de White est de trouver les meilleurs états à ajouter dans les fluctuations associées à l'hamiltonien. Cela correspondrait à viser en plus du fondamental $|\psi^S\rangle$, l'état $\mathcal{H}|\psi^S\rangle$. Comme il n'est pas intéressant numériquement de viser deux états au lieu d'un (d'autant que si $|\psi^S\rangle$ est proche d'un état propre, $\mathcal{H}|\psi^S\rangle$ ne sera pas très différent), il faut exprimer les corrections à la matrice densité qu'apporterait le fait de viser cet état. On peut justifier que les termes les plus importants seront du type

$$\sum_{ii'j} \langle i | \hat{h}_L^\nu | i' \rangle \psi_{i'j} | i \rangle | j \rangle \quad (\text{III.78})$$

où le terme \hat{h}_L^ν de l'hamiltonien, avec la notation de (III.65), est tel qu'il couple le site ajouté à L . Si on prend en compte tous les termes du même type, la matrice densité qui correspondra à cette fonction d'onde visée sera de la forme

$$\Delta\rho = \sum_{\nu} a_{\nu} \hat{h}_L^{\nu} \cdot \rho_L \cdot \hat{h}_L^{\nu\dagger} \quad (\text{III.79})$$

avec a_{ν} un poids perturbatif qu'on choisit de tel sorte que cette perturbation à la matrice densité apporte un gain de convergence sans pour autant nuire à la précision numérique (typiquement $a_{\nu} \equiv a \sim 10^{-3} - 10^{-6}$). Par exemple, pour une chaîne de Heisenberg, on ajoutera un terme

$$a(S_l^+ \rho S_l^- + S_l^- \rho S_l^+ + S_l^z \rho S_l^z) \quad (\text{III.80})$$

où l'indice l correspondra aux sites de L à l'interface avec R (donc un site si conditions aux bords ouvertes, deux si fermées). On voit que les termes S^{\pm} correspondent à des transitions entre nombres quantiques différents. Cette solution s'avère prometteuse en particulier pour les conditions aux bords périodiques. Les résultats avec cette méthode sont illustrés sur la figure III.14.

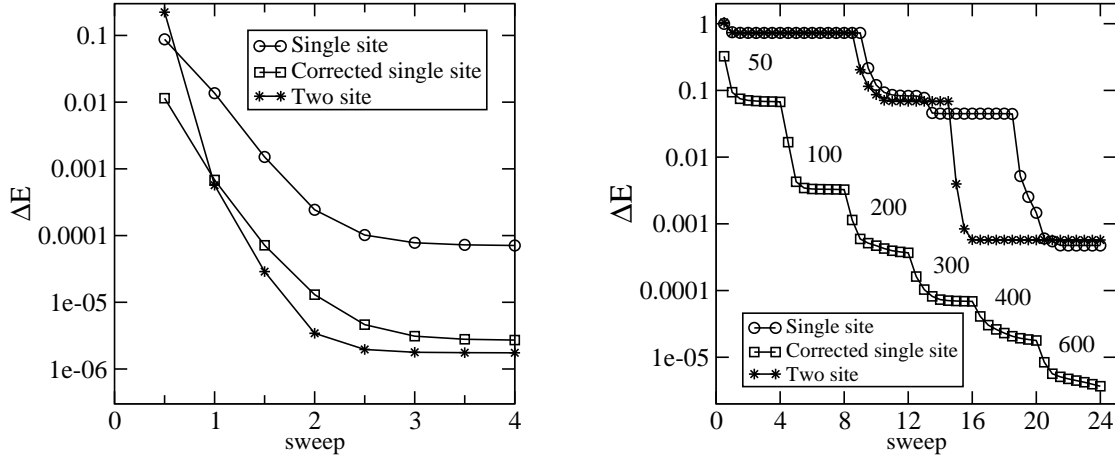


FIG. III.14: Tests de la méthode avec un seul site sur une chaîne de Heisenberg de spins 1 de 100 sites. À gauche, pour des conditions aux bords ouvertes. À droite, pour des conditions aux bords fermées avec $a = 10^{-4} - 10^{-6}$. D'après White [224].

2.2.8 hamiltoniens et fonctions d'onde complexes

Avec le DMRG, la plupart des hamiltoniens habituels sont réels. Avec la diagonalisation exacte, même pour un hamiltonien réel, on doit utiliser une fonction d'onde complexe dès lors qu'on utilise par exemple les translations qui font intervenir des facteurs de phase. Au cours de la thèse, nous avons implémenter l'utilisation d'hamiltoniens complexes dans le programme en utilisant deux hamiltoniens et deux fonctions d'onde pour décrire les parties réelle et imaginaire. Si de manière générale, on devrait donc utiliser une matrice densité réduite complexe, on peut en fait utiliser l'algorithme en considérant qu'on vise deux fonctions d'onde avec comme matrice densité réduite *réelle*

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{\rho}_{\text{Re}} + \hat{\rho}_{\text{Im}}), \quad (\text{III.81})$$

qui permet un gain de temps de calcul mais nécessite un M plus grand (à poids rejeté constant) compte-tenu qu'on vise plusieurs états. L'information physique qui fait que les deux états sont les parties réelle et imaginaire d'une même fonction d'onde complexe n'intervient qu'au niveau de l'algorithme de Davidson, c'est-à-dire lorsqu'on applique l'hamiltonien : à cette étape, les ψ_{ij} correspondent bien à la fonction d'onde complexe. Les bases tronquées, elles, sont optimisées en utilisant (III.81).

2.3 Convergence et pratique du DMRG

On présente dans cette section quelques résultats empiriques sur la convergence et l'utilisation du DMRG au travers d'exemples simples. Pour ce qui est du calcul des observables, on peut évaluer la plupart des observables discutées dans la partie 1.4 sauf celles qui font intervenir des nombres quantiques non présents dans le DMRG (comme l'impulsion k). Le calcul des propriétés dynamiques et de l'évolution temporelle sont également des choses qui se font grâce aux dernières avancées mais ne sont pas utilisées dans cette thèse.

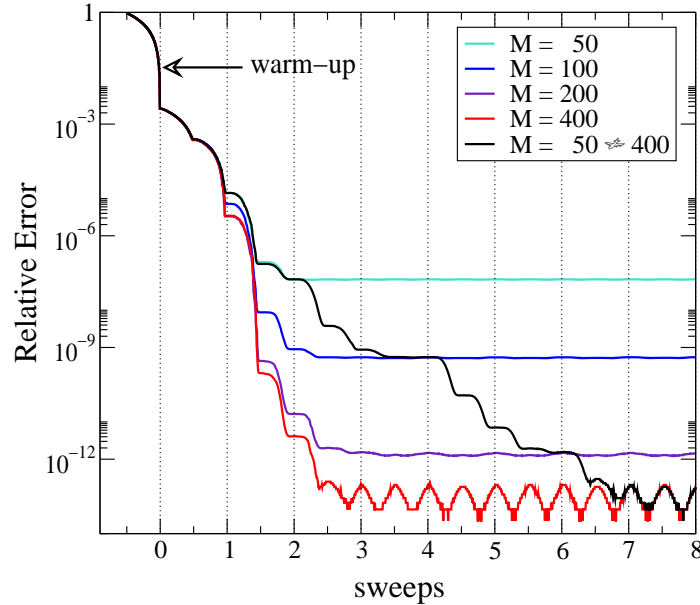


FIG. III.15: *Convergence de l'énergie au cours des sweeps de l'algorithme de taille finie. À nombre d'états gardés fixés M , la précision maximale est atteinte après quelques sweeps seulement. Si on incrémente M par tranches de deux sweeps ($M = 50, 50, 100, 100, 200, 200, 400, 400$), on atteint la même précision que pour quatre sweeps avec $M = 400$ mais en un temps CPU d'un facteur plus petit.*

2.3.1 Contrôle de l'erreur et convergence des observables

Un point fort de l'algorithme DMRG est qu'il est contrôlé dans le sens où il converge dans la limite $M \rightarrow \sqrt{N_{\mathcal{H}}}/\lambda$ où $N_{\mathcal{H}}$ est la taille de l'espace de Hilbert du système. Dans ce cas, on ne rejette pas d'états et le poids rejeté devient nul. On peut donc résoudre exactement de petits systèmes ce qui toujours satisfaisant et utile pour comparer les résultats avec les résultats exacts. D'autre part, lorsqu'on traite des systèmes plus grands, M est limité par les ressources informatiques à la fois pour la mémoire et le CPU car les opérations comme le produit $\mathcal{H}|\psi\rangle$ et la diagonalisation de ρ deviennent alors prohibitives. Typiquement, $M \sim 1000$ et on peut monter jusqu'à $M = 10000$ avec beaucoup d'efforts mais guère plus. Le poids rejeté est le critère de convergence de l'algorithme : il diminue avec M . Cependant, on ne connaît pas précisément l'erreur commise sur les observables car les préfacteurs dans la formule (III.50) sont difficiles à évaluer. À titre de comparaison, les méthodes de Monte-Carlo non variationnelles convergent elles aussi dans une limite où l'on échantillonne tout l'espace de Hilbert, mais ont l'avantage de donner une mesure statistique précise des erreurs sur les observables¹⁸. Enfin, la dernière critique que l'on peut faire au DMRG est qu'en tant que méthode variationnelle, elle peut converger vers un état métastable qui n'est pas le bon état visé.

En pratique, on utilise quelques observations empiriques pour se convaincre de la bonne convergence du DMRG et il n'y a que deux paramètres à ajuster pour étudier la convergence qui sont le nombre d'états M et le nombre de sweeps que l'on effectue. Il est d'ailleurs

¹⁸Pour les méthodes qui n'ont pas d'erreur systématique comme l'erreur de Trotter.

satisfaisant de n'avoir que deux paramètres de contrôle et ce, quel que soit le modèle étudié. D'autre part, on observe généralement qu'à M fixé, l'énergie converge vers une énergie variationnelle $E(M)$ au bout de seulement quelques sweeps si bien qu'en pratique, on augmente M par tranches de deux sweeps (voir figure III.15) et regarde l'évolution de $E(M)$. Cela donne un gain de temps CPU très appréciable par rapport à faire les mêmes sweeps avec le M maximal pour une précision équivalente. On peut également se convaincre de la convergence de l'énergie en traçant $E(\omega)$ où ω est le poids rejeté maximal obtenu au cours du deuxième sweep des groupes de deux. Il ne reste alors qu'un seul paramètre pour juger de la convergence. Il est en général utile et peu coûteux de calculer les observables locales au cours de l'algorithme qui donnent une sorte de « photo » de l'état visé (densités locales de particules, S^z local, énergie cinétique sur les liens, ...). Cela permet aussi d'évaluer les effets de bords (voir ci-après). Ces mesures locales semblent converger linéairement avec le poids rejeté ce qui en fait des mesures particulièrement précises [225]. Quant aux fonctions de corrélation, elles sont particulièrement sensibles au poids rejeté. On verra au chapitre V que l'exposant critique des corrélations algébriques semble diminuer comme M^{-1} en accord avec de précédents résultats [210].

2.3.2 Effets de taille finie et de conditions aux bords ouvertes

La convergence du DMRG est bien meilleure avec des conditions aux bords ouvertes. Si cela semble poser problème à première vue car on préfère souvent travailler avec des conditions aux limites fermées, en pratique, les numériciens ont su tirer profit de ces conditions particulières. Tout d'abord, les quantités tirées de l'énergie comme les gaps convergent généralement en loi de puissance

$$\Delta(L) = \Delta^\infty + \frac{a}{L} + \frac{b}{L^2} + \dots, \quad (\text{III.82})$$

y compris pour des systèmes gappés. Cela est relié au fait qu'on n'a pas la symétrie de translation et qu'interviennent donc les harmoniques du système dans l'unité d'impulsion $2\pi/L$. Cela n'est pas un problème compte-tenu des nombreuses tailles accessibles et qu'il est plus facile, pour les petits gaps, de fitter une loi de puissance qu'une loi exponentielle. Un des problèmes des conditions ouvertes peut être la présence d'excitations aux bords des chaînes qui faussent la détermination de certaines mesures. Par exemple, si on prend une chaîne dimérisée de taille impaire, une obtiendra un gap de spin nul en raison de spins libres en bout de chaîne. Ce type d'effets peut être souvent décelé en regardant les mesures locales dans le fondamental. Ces effets de bords peuvent aussi être limités en utilisant des conditions aux bords évanescents (les paramètres de l'hamiltonien décroissent jusqu'aux bords). D'un autre côté, les bords libres permettent d'étudier la physique d'une impureté dans la chaîne : de la décroissance exponentielle de $\langle S_x^z \rangle$ dans la chaîne de spin 1, on peut en tirer le gap. Les oscillations de Friedel de la densité de charge renseignent sur l'exposant de Luttinger correspondant au mode de charge (voir chapitre II). Enfin, si le système s'ordonne, on peut mesurer le paramètre d'ordre local jusque dans le bulk. Bien que le système ne soit pas invariant par translation, on peut malgré tout prendre la transformée de Fourier de quantités locales ou de corrélations qui renseignent souvent sur les vecteurs d'onde dominants (par exemple à $2k_F, 4k_F, \dots$).

En ce qui concerne les corrélations, elles dépendent à la fois de x et x' puisqu'il n'y a plus d'invariance par translation. Il faudrait donc les tracer pour x fixé et en fonction de $x - x'$. On s'attend à ce que les effets de bords soient d'autant plus grands que x ou x' en sont proches. En pratique, dans la plupart des figures de cette thèse montrant des fonctions de corrélations, elles ont été obtenues en moyennant les résultats sur les distances $x - x'$ (la moyenne se fait sur les couples de points dont un des deux n'est pas « trop près » d'un bord, typiquement quelques pas de réseau). Cela donne un comportement correct pour $a \ll |x - x'| \ll L$ sur une large plage de distance. En particulier, cela permet de distinguer entre un comportement algébrique et exponentiel assez efficacement pour de petits systèmes. L'effet des conditions ouvertes est de faire chuter les corrélations lorsque x' atteint un bord. La prise en compte de ces effets par les résultats de théorie conforme (voir chapitre II) n'a été effectuée qu'au chapitre VII car on a pris connaissance de ces résultats juste avant la fin de la thèse. La détermination des paramètres de Luttinger par les fonctions de corrélations en est grandement améliorée, d'autant que pour le système qui a été étudié, le poids rejeté était très faible.

Enfin, s'il est coûteux de calculer des fonctions de corrélations, il est possible et plus simple de mettre un champ sur un bord, et de regarder la réponse de la chaîne à ce champ ce qui donnera une information comparable à une fonction de corrélation. Cela est d'autant plus intéressant que les mesures locales sont plus précises. Dans le même ordre d'idées, ayant un système ouvert, on peut regarder le transport dans ce système en le couplant par exemple à deux bords supraconducteurs pour y étudier le courant Josephson et se mettre dans des configurations proches de celles rencontrées dans les expériences [226]. Enfin, pour des chaînes ou des échelles, bien qu'on ne puisse traiter correctement que de petits systèmes, on peut utiliser les conditions aux bords périodiques avec le DMRG.

2.3.3 Systèmes faciles et systèmes difficiles ?

Malgré ses grands succès dans les systèmes unidimensionnels, le DMRG ne marche pas toujours. Les classes de fonctions d'onde qu'il génère et optimise ne peuvent être adaptées à toutes les situations physiques. De manière générale, les systèmes avec interactions à longue portée, que ce soit des chaînes 1D avec couplage à longue portée ou des réseaux de type bidimensionnel, sont difficiles à aborder. Le poids rejeté est grand et diminue peu avec M et le nombre de sweeps. Les systèmes ayant peu de symétrie (non conservation du nombre de particules, de S_{tot}^z) requièrent de grosses ressources informatiques. Lorsque le spectre de basse énergie contient de nombreux états, la convergence va être plus lente (comme pour le Lanczos et le Davidson). Enfin, si l'on veut viser plusieurs états, il faudra un M d'autant plus grand qu'on essaie de représenter plusieurs fonctions d'onde différentes. Les systèmes contraints comme les modèles de dimères semblent se prêter difficilement à l'algorithme compte-tenu du caractère non local des contraintes entre états.

2.3.4 Ressources informatiques et optimisation

Les trois paramètres qui vont entrer en jeu dans l'évaluation des ressources informatiques sont le nombre d'états sur site λ , le nombre d'états gardés M dans les blocs et la taille linéaire du système L . Comme on l'a observé à de nombreuses reprises, les opérations élémentaires sur la fonction d'onde $|\psi_S\rangle$ et sur les opérateurs peuvent se ramener à des produits de matrices successifs. Les matrices de changement de bases sont de taille $O(M^2)$ et le produit

de deux matrices $M \times M$ est en $O(M^3)$. Une autre étape qui consomme de la mémoire et du temps CPU est la diagonalisation de la matrice densité réduite qui a une taille $(\lambda M)^2$. L'optimisation de ces produits et de la diagonalisation se fait en utilisant systématiquement les bibliothèques d'algèbre linéaire BLAS/Lapack. Si L est la taille du système, on a environ L opérateurs dans l'hamiltonien qu'il va falloir suivre et appliquer lors du calcul de $\mathcal{H}|\psi_S\rangle$ et le nombre d'itérations DMRG varient aussi comme L si bien qu'au final l'algorithme est en $O(L^2)$. Si on calcule toutes les corrélations à deux points dans le système, il y a alors environ L^2 opérateurs à suivre soit, en rajoutant les sweeps, un algorithme en $O(L^3)$. Toutefois, on notera que cette dépendance avec la taille est en loi de puissance et moins contraignante qu'une dépendance exponentielle.

3 Conclusion partielle

Ce chapitre présentait les méthodes numériques utilisées au cours de cette thèse et qui seront illustrées par les chapitres qui suivent. La diagonalisation exacte est un outil très puissant qui permet d'aborder tous les modèles et de mesurer presque n'importe quelle observable. Un de ses points forts est l'utilisation des symétries qui, outre la réduction de l'espace de Hilbert, fournit une information physique supplémentaire et donne accès à des quantités expérimentales comme les fonctions spectrales. Toutefois, la limitation des tailles de réseau accessibles fait qu'il est parfois difficile de conclure sur la nature du système dans la limite thermodynamique, ou encore de faire ces mêmes extrapolations à densité électronique fixée. Lorsqu'on étudie les systèmes quasi-unidimensionnels, le DMRG offre une alternative de premier choix qui permet de calculer les observables indispensables à la compréhension de la physique comme l'énergie, les gaps, les densités locales, les fonctions de corrélations... Si la méthode est variationnelle au sens où elle optimise une certaine classe de fonctions d'onde, elle fonctionne néanmoins de façon très efficace pour la plupart des systèmes 1D et ce, en raison des principes très généraux qui gouvernent sa convergence ainsi que des propriétés particulières d'intrication de ces systèmes.

Chapitre IV

Échange cyclique dans les échelles dopées

Ce chapitre présente les résultats obtenus sur la physique des échelles dopées lorsqu'on prend en compte un terme d'échange cyclique dans la partie magnétique de l'hamiltonien t-J. On explique tout d'abord l'origine de ce terme et son importance pour l'interprétation des données expérimentales. On présente ensuite les conséquences de sa prise en compte sur les propriétés des échelles dopées.

1 L'échange cyclique

1.1 Origine

On décrit le magnétisme de fermions de spin 1/2 localisés en considérant les processus élémentaires d'interactions entre particules voisines. Compte-tenu de leur localisation sur les sites d'un réseau, les processus les moins coûteux énergétiquement correspondent aux permutations de particules. En utilisant la correspondance entre opérateurs de permutation et opérateurs de spins, on montre que l'hamiltonien se ramène alors à une description ne faisant intervenir que les degrés de liberté de spin [22, 227, 228]. Les intégrales d'échange donnant l'amplitude de l'interaction peuvent être évaluées par la chimie quantique ou déduites de la comparaison entre calculs théoriques et expériences. Par exemple, l'opérateur de permutation à deux particules P_{ij} peut s'écrire en fonction du terme d'échange de Heisenberg selon :

$$P_{ij} = 2(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) + \frac{1}{2}, \quad (\text{IV.1})$$

puisque $P_{ij} = S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+$ si les spins sont opposés et l'identité sinon. Le terme de Heisenberg est toujours dominant car il ne fait intervenir que les particules sur deux sites voisins. Les termes avec plus de deux particules vont eux dépendre de la géométrie du réseau. Pour le réseau carré, l'échange à quatre corps autour d'une plaquette sera important. C'est ce dernier qui est donc particulièrement pertinent pour décrire le magnétisme des échelles. Il agit sur les états des plaquettes en autorisant les permutations dans les sens horaire et anti-horaire pour ne pas briser l'invariance par renversement du temps

$$P_{ijkl}^{\circlearrowleft} \left| \begin{array}{cc} \sigma_i & \sigma_j \\ \sigma_l & \sigma_k \end{array} \right\rangle = \left| \begin{array}{cc} \sigma_l & \sigma_i \\ \sigma_k & \sigma_j \end{array} \right\rangle \quad \text{et} \quad P_{ijkl}^{\circlearrowright} \left| \begin{array}{cc} \sigma_i & \sigma_j \\ \sigma_l & \sigma_k \end{array} \right\rangle = \left| \begin{array}{cc} \sigma_j & \sigma_k \\ \sigma_i & \sigma_l \end{array} \right\rangle. \quad (\text{IV.2})$$

Comme toute permutation peut se décomposer en produits de permutation à deux corps, l'échange cyclique peut se réexprimer en fonction de produits de termes de Heisenberg $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$

$$\begin{aligned} P_{ijkl}^{\circlearrowleft} + P_{ijkl}^{\circlearrowright} &= \frac{1}{4} + [\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k + \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l + \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_i] \\ &+ [\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k + \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_l] \\ &+ 4[(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)(\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l) + (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_l)(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k) - (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k)(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_l)] . \end{aligned}$$

Cette décomposition montre clairement que l'hamiltonien reste invariant par $SU(2)$. Le premier terme renormalise simplement les couplages sur les liens de la plaquette. Le second engendre des couplages le long des diagonales de la plaquette. Le dernier contient des termes biquadratiques d'interactions de type dimères-dimères. Comme Thouless [229] a montré que le coefficient devant le terme cyclique devait être positif, les deuxième et troisième termes introduisent de la frustration dans le système. S'il est difficile de définir de façon générale ce que l'on entend par frustration, ce terme désigne une compétition entre interactions (le système est frustré car il ne peut les satisfaire simultanément d'un point de vue classique) qui fait que plusieurs, voire un nombre macroscopique, d'états vont avoir une énergie voisine. Par exemple, trois spins sur un triangle ont deux états dégénérés. Des interactions antiferromagnétiques sur la diagonale sont aussi frustrantes. Pour les termes biquadratiques, qui regroupent les processus faisant appel à quatre corps, ils favorisent les états antisymétriques sur la plaquette (voir ci-dessous). En particulier, un état triplet seul sera stabilisé sur une plaquette tandis que deux états triplets se repousseront.

1.2 Diagramme de phase des échelles non dopées

L'hamiltonien du système non dopé se réduit à des constantes près aux deux termes de permutation P_{ij} et $[P_{ijkl}^{\circlearrowleft} + P_{ijkl}^{\circlearrowright}]$. Malgré l'apparente simplicité de l'hamiltonien, de nombreuses phases exotiques sont observées dans les échelles à deux montants [230–232] et dans le réseau carré [233]. L'hamiltonien s'écrit alors

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + K \sum_{ijkl \in \square} [P_{ijkl}^{\circlearrowleft} + P_{ijkl}^{\circlearrowright}] \quad (\text{IV.3})$$

et il n'y a qu'un paramètre libre K/J que l'on peut parcourir en suivant l'angle θ défini par $K = \sin \theta$ et $J = \cos \theta$. Ce diagramme de phase est représenté sur un cercle sur la figure IV.1. Afin d'avoir une idée plus précise de l'action du terme d'échange cyclique, on peut diagonaliser l'hamiltonien ci-dessus sur une plaquette. Comme la permutation de l'échange cyclique est alors une symétrie du système (rotation autour de la plaquette), il suffit de diagonaliser l'hamiltonien de Heisenberg puis de regarder la symétrie des états propres pour inclure le terme cyclique. En écrivant $\mathcal{H} = J/2[\mathbf{S}_{\text{tot}}^2 - \mathbf{S}_{13}^2 - \mathbf{S}_{24}^2]$ avec comme notation $\mathbf{S}_{ij}^2 = (\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j)^2$ et $\mathbf{S}_{\text{tot}}^2$ pour le spin total, les énergies sont alors $E = J/2[S_{\text{tot}}(S_{\text{tot}} + 1) - S_{13}(S_{13} + 1) - S_{24}(S_{24} + 1)]$. Les niveaux d'énergie et leur dégénérescence sont rapportés dans le tableau IV.1.

On voit que lorsque $K > 0$, l'énergie du fondamental (symétrique) est augmentée tandis qu'un niveau triplet et un état singulet (antisymétriques) sont stabilisés. On s'attend donc à la fermeture du gap de spin pour $K/J = 0.25$ dans la plaquette. Le fondamental et le premier

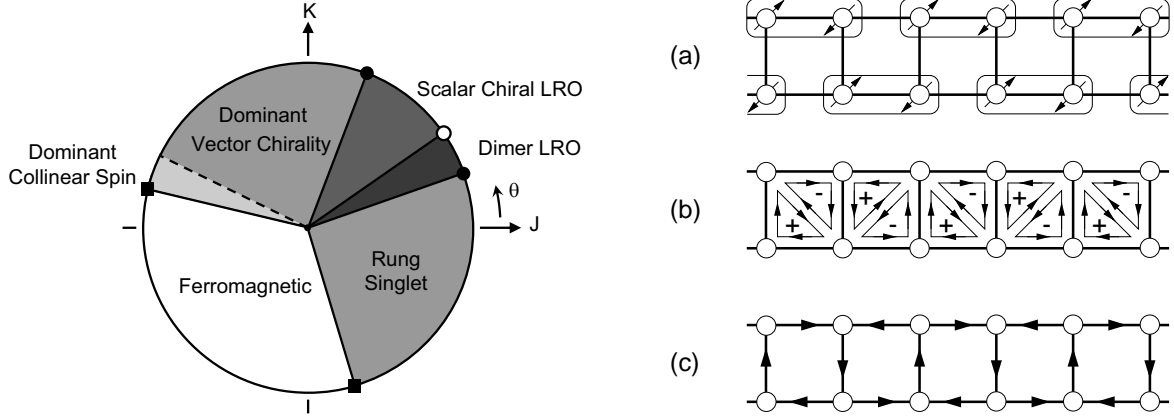


FIG. IV.1: À gauche : diagramme de phase des échelles non dopées obtenu par diagonalisation exacte. À droite, image qualitative des fondamentaux des phases exotiques : (a) phase dimérisée, (b) phase avec chiralité scalaire, (c) corrélations dans la phase à chiralité vectorielle dominante. D'après Läuchli et al. [232].

énergie	S_{tot}	S_{13}	S_{24}	dég.
$-2J + 2K$	0	1	1	1
$-J - 2K$	1	1	1	3
$-2K$	0	0	0	1
0	1	1	0	3
0	1	0	1	3
$J + 2K$	2	1	1	5

TAB. IV.1: Énergies des différents secteurs sur une plaquette avec échange cyclique.

état excité singulet, dans l'image RVB, peuvent être vus comme une combinaison respectivement symétrique et antisymétrique des dimères selon les côtés opposés $[|00\rangle \pm |\Xi\rangle]/\sqrt{3}$. Lorsque $K/J = 0.5$, les deux états sont dégénérés favorisant ainsi les états dimérisés plutôt que RVB. L'approche qualitative sur une plaquette donne des résultats étonnamment proche de la valeur de la véritable transition de phase qui se produit pour $K/J \simeq 0.2$ à la limite thermodynamique. Le gap de spin se ferme avec une transition du deuxième ordre vers un état dimérisé où la dimérisation est alternée selon les montants. Cependant, les fonctions d'onde sur une plaquette ne sont pas affectées par K contrairement à ce qu'il se passe dans un système plus grand. Une plaquette seule ne peut non plus décrire une dimérisation alternée selon les montants. On retiendra que l'échange cyclique va modifier particulièrement le magnétisme et la description en états RVB de l'échelle, rendant son étude particulièrement intéressante dans la perspective du mécanisme RVB des échelles dopées. On notera également l'analogie avec la chaîne de spin-1 bilinéaire-biquadratique où l'on a un terme frustrant similaire $(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2$ [234].

Le diagramme de phase a été obtenu numériquement par Läuchli *et al.* [232] et montre une grande richesse des phases observées (voir figure IV.1). Sans entrer dans le détail de la discussion des phases à fort K/J ou à $J < 0$, on retiendra seulement qu'il y a une transition du second ordre pour $K_c/J \simeq 0.2$ vers une phase dimérisée où les dimères sont alternés sur

les montants. Cette dernière a donc un gap triplet fini, mais très petit et brise l'invariance par translation (deux états dégénérés à la limite thermodynamique). La localisation et la nature du point critique quantique autour de $K_c/J \simeq 0.2$ ont été étudiées par différentes méthodes [230–232, 235–244]. Il ressort que la transition est du second ordre avec une charge centrale $c = 3/2$ à la transition [237]. La détermination numérique de la charge centrale en calculant la vitesse v et les corrections à l'énergie par site avec la formule (II.29) est sûrement la méthode la plus fiable pour déterminer la transition (voir figure IV.2). En effet, la charge centrale est maximale à la transition puisqu'elle est finie à la transition et devrait s'annuler dans les deux phases gappées à la limite thermodynamique.

Notons enfin qu'en raison de la répulsion entre triplets induite par l'échange cyclique, un plateau d'aimantation à $m = 1/2$ (un triplet par plaquette) a été stabilisé dans les échelles à deux montants dès $K/J \simeq 0.05$ [245].

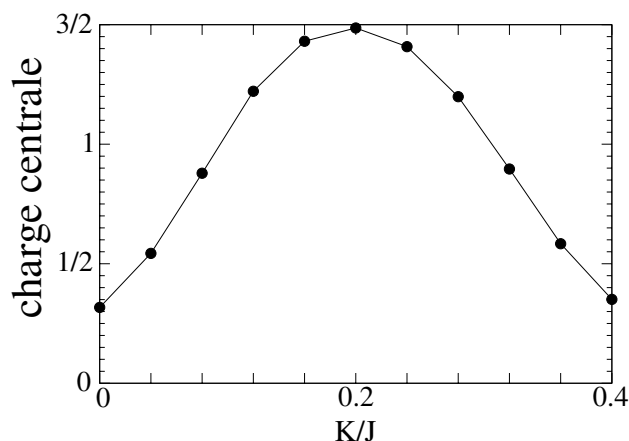


FIG. IV.2: La charge centrale permet de déterminer précisément la localisation de la transition. D'après des calculs de diagonalisation exacte. Résultats similaires à ceux de Hiji et al. [237].

1.3 Pertinence expérimentale dans les cuprates

L'échange cyclique peut aussi être obtenu par théorie des perturbations en t/U à partir du modèle de Hubbard [9, 246, 247]. On obtient alors un modèle t-J étendu avec $J \simeq 4t^2/U$ et $K \simeq 20t^4/U^3$ [248]. Les termes d'ordre trois s'annulent en raison de la symétrie $t \rightarrow -t$ dans le réseau carré. J et K ne peuvent donc en toute rigueur être pris comme paramètres indépendants. Cependant, il semble souvent plus précis de déterminer ces constantes expérimentalement en utilisant un modèle magnétique avec ces paramètres libres plutôt qu'un modèle de Hubbard qui sera moins adapté à la description de la physique de basse énergie. Les calculs de chimie quantique permettent aussi d'évaluer ces intégrales d'échange. Les résultats (voir tableau IV.2) montrent un terme environ deux fois plus important dans les échelles que dans les réseaux bidimensionnels.

Ces termes d'échanges multiples ont été introduits initialement pour décrire le magnétisme de l'Hélium 3 adsorbé sur des surfaces de graphite où les particules occupent un réseau

	J_{\parallel}	J_{\perp}	$4K$	$4K/J_{\perp}$
SrCu_2O_3	203	157	34	0.22
$\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$	195	177	39	0.22
CaCu_2O_3	147	15	4	0.26
La_2CuO_4	124	124	14	0.11

TAB. IV.2: Résultats de chimie quantique pour les intégrales d'échange dans les composés à échelles de spins données en meV. La_2CuO_4 est le composé parent d'un cuprate à haute température critique. D'après Calzado et al. [246].

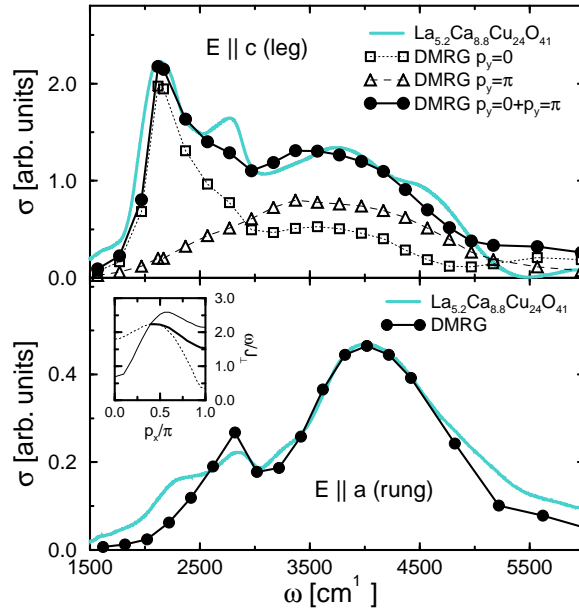


FIG. IV.3: Comparaison du spectre Raman et d'un calcul dynamique numérique par DMRG avec la méthode du vecteur corrigé sur le composé à échelle de spin $\text{La}_{5.2}\text{Ca}_{8.8}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. D'après Nunner et al. [242].

triangulaire [228]. Dans les cuprates à haute température critique, l'échange cyclique a permis une meilleure compréhension des spectres d'excitations magnétiques étudiées par INS [41, 249–251]. Les expériences de diffusion Raman et INS sur les composés en échelles non dopés ont évalué la valeur de K dans une fourchette de $0.025 \leq K/J \leq 0.075$ [242, 252–255] (voir par exemple la figure IV.3).

2 Résultats dans les échelles dopées

L'influence de l'échange cyclique sur le magnétisme des échelles et sur l'image RVB du fondamental motive donc son inclusion dans le modèle t-J. On se propose donc d'étudier l'hamiltonien t-J-K

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \mathcal{P}_G [c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}] \mathcal{P}_G + J \sum_{\langle i,j \rangle} [\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j] + K \sum_{ijkl \in \square} [P_{ijkl}^\circ + P_{ijkl}^\circ] \quad (\text{IV.4})$$

sur une échelle isotrope. On choisit $J/t = 0.5$ de sorte qu'on est dans la région du diagramme de phase de la figure II.17 où les fluctuations supraconductrices dominent. On choisit ensuite de faire varier K dans la fenêtre $-0.2 \leq K/J \leq 0.2$ qui inclue les valeurs expérimentales et le point critique séparant la phase dimérisée. Les valeurs de K légèrement négatives, bien que non physiques, assurent la continuité des résultats dans la phase RVB. Le dopage de la phase dimérisée a montré beaucoup d'effets de taille finie sur la diagonalisation exacte (non montrés) et son étude par DMRG nécessiterait une modification des conditions aux limites pour adapter le fondamental au caractère alterné de la dimérisation et s'affranchir de spinons libres aux bords [232].

2.1 Excitations élémentaires

Commençons par discuter les excitations magnétiques dans le modèle de Heisenberg. La première excitation est un magnon gappé qui disperse avec une loi $E(k) = J_{\perp} + J_{\parallel} \cos k$ dans la limite $J_{\perp} \gg J_{\parallel}$. La figure IV.4 montre que cette image survit bien dans la limite isotrope avec une branche magnon ayant son minimum à $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ pour un gap de spin $\Delta_M \simeq 0.5J$. Si on crée deux magnons dans le système avec un moment q et $k - q$, ils vont engendrer un continuum d'excitations dont le minimum est à $\mathbf{k} = (\pi + \pi, \pi + \pi) = (0, 0)$ pour une énergie d'environ $2\Delta_M$. La limite inférieure du continuum est représentée sur la figure IV.4. La branche magnon rentre dans le continuum pour une valeur $k \sim \pi/2$. Pour une valeur de $K > 0$, le gap magnon diminue ainsi que le gap du continuum en accord avec l'analyse qualitative sur une plaquette qui montrait une stabilisation du triplet et du premier état singulet excité tandis que l'énergie du fondamental augmentait. C'est bien ce que l'on retrouve numériquement dans la limite isotrope jusqu'à avoir au point critique disparition des gaps à $k = 0$ et $k = \pi$. On a alors une dispersion pour le continuum triplet qui rappelle celle de la chaîne de spin 1/2 [256] :

$$E_q(k) = \frac{\pi}{2} J [\cos q + \cos(k - q)].$$

Pour le système dopé avec deux trous, le spectre des excitations est montré sur la figure IV.6. Le dopage induit la présence d'un mode de charge de basse énergie avec une dispersion linéaire $E(k) = uk$ typique d'un liquide de Luttinger ou de Luther-Emery. Le spectre contient également des excitations de type quasi-particules correspondant à briser la paire de trous. Cette dénomination est assez légitime dans les échelles car dans la limite $J_{\perp} \gg J_{\parallel}$, un trou est accompagné d'un spin libre sur un barreau si bien que charge et spin sont associés lors de la dispersion. L'énergie d'appariement peut être calculée de façon indépendante (voir ci-après) et l'on peut reporter cette énergie sur le spectre (voir figure IV.6). Le continuum des états de quasi-particules démarre juste au-dessus de cette énergie. L'excitation magnétique de type magnon demeure gappée dans le système et on distingue, aux effets de taille finie près assez importants, la persistance de la branche magnon. En dehors du demi-remplissage, le minimum de la branche magnon se situe au vecteur incommensurable $\mathbf{k}_{\delta} = (\pi(1 - \delta), \pi)$ car il s'agit d'une excitation à $2k_F$ avec $k_x = \pi(1 - \delta)$ d'après le chapitre II et antisymétrique ($k_y = \pi$). Dans la figure précédente, on fixe le nombre de trous à 2 et on augmente L , on a alors à la limite thermodynamique $\mathbf{k}_{\delta} \rightarrow \pi$. Si on augmente K/J , les énergies du continuum et du gap de spin sont abaissées à l'approche du point critique.

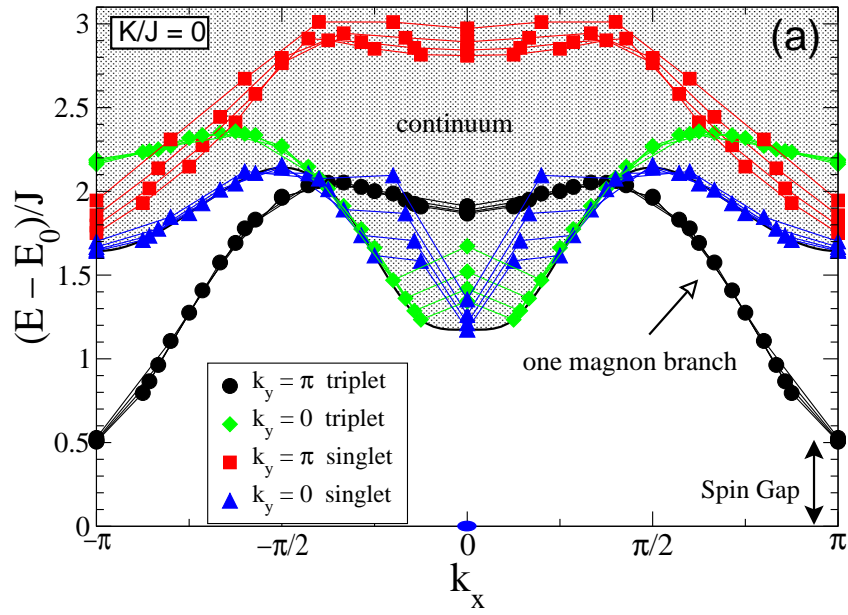


FIG. IV.4: Spectre des excitations du système non dopé obtenu par superposition des résultats de diagonalisation exacte sur des systèmes avec $L = 10, 12, 14$ et 16 . Toutes les énergies montrées sont les fondamentaux dans le secteur $S^z = 0$ (les états excités dans les mêmes secteurs ne sont pas montrés). Les secteurs triplet et singlet sont obtenus à partir de la symétrie d'inversion de spin. Extrait de la publication [1].

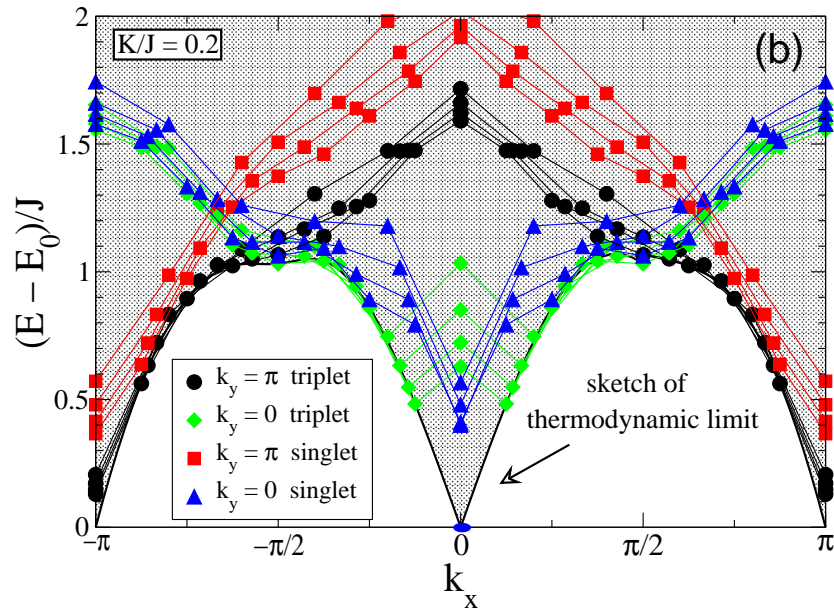


FIG. IV.5: Même spectre que la figure IV.4 mais au voisinage du point critique $K_c/J \simeq 0.2$. Extrait de la publication [1].

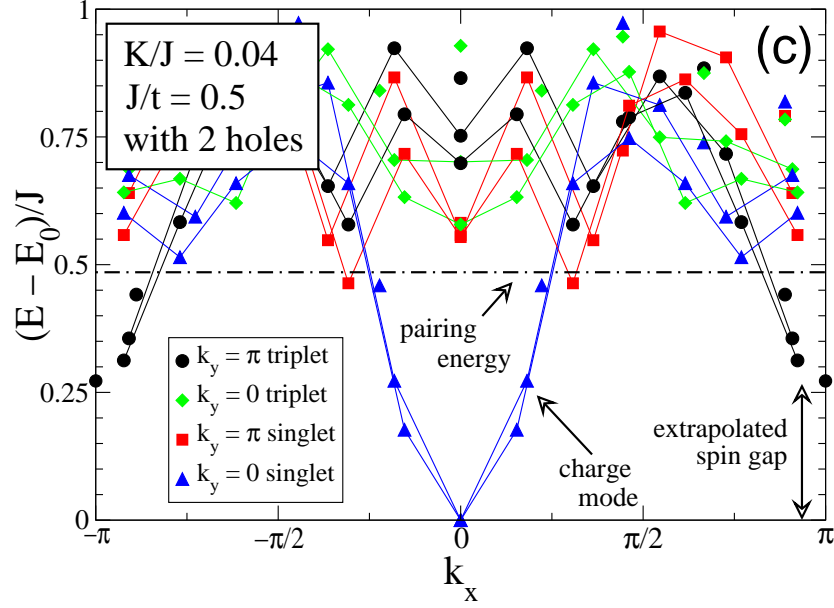


FIG. IV.6: Spectre du système dopé obtenu à partir de résultat de diagonalisation exacte sur des systèmes de tailles $L = 9, 11$ et 13 avec 2 trous. Extrait de la publication [1].

Pour évaluer plus précisément ces énergies caractéristiques dans la limite $\delta \rightarrow 0$ (deux trous sur un système infini), on utilise les définitions [257]

$$\Delta_M = E(n_h = 0, S = 1) - E(n_h = 0, S = 0) \quad (\text{IV.5})$$

$$\Delta_S = E(n_h = 2, S = 1) - E(n_h = 2, S = 0) \quad (\text{IV.6})$$

$$\Delta_p = 2E(n_h = 1, S = 1/2) - E(n_h = 2, S = 0) - E(n_h = 0, S = 0), \quad (\text{IV.7})$$

avec $E(n_h, S)$ l'énergie du fondamental avec n_h trous et de spin total S . Ces trois énergies représentent respectivement le gap de spin dans le système non dopé (ou gap magnon Δ_M), le gap de spin dans le système avec 2 trous Δ_S , et enfin l'énergie d'appariement Δ_p . Ces gaps ont été calculés par diagonalisation exacte et par DMRG¹ sur des systèmes de taille $L = 16, 32, 48$ et 64 puis extrapolés dans la limite thermodynamique. Les résultats sont donnés sur la figure IV.7. Ces énergies caractéristiques doivent vérifier (i) $\Delta_S \leq \Delta_M$ puisqu'on peut a priori toujours créer un magnon très loin de la paire de trous (ii) $\Delta_S \leq \Delta_p$ puisqu'en brisant la paire de trous en deux quasi-particules, on peut créer des états de spin $S = 1$. Cela est vérifié numériquement. On remarque aussi que $\Delta_S(\delta \rightarrow 0) \neq \Delta_M$, c'est-à-dire que le gap de spin est discontinu avec le dopage. C'est la manifestation d'un état lié entre la paire de trou et le magnon [175, 257] et se traduit pour un mode magnétique résonnant dans la fonction spectrale $S(k, \omega)$ [258]. L'énergie de cet état lié est donc $\min(\Delta_p, \Delta_M) - \Delta_S$ en vertu des remarques précédentes. Sur la figure IV.7, le gap magnon diminue avec K jusqu'au point critique. Lorsque $\Delta_M > \Delta_p$ pour $K/J \leq -0.05$, on s'attend à ce que l'excitation « magnon libre » soit moins bien définie du fait de son entrée dans le continuum des excitations (ligne en pointillés). Pour $K/J > 0$, on observe que l'énergie de l'état lié diminue et s'annule avant

¹...avec la méthode avec un seul site au milieu en gardant $M = 1600$ états ce qui donnait des poids rejetés inférieurs à 10^{-6} .

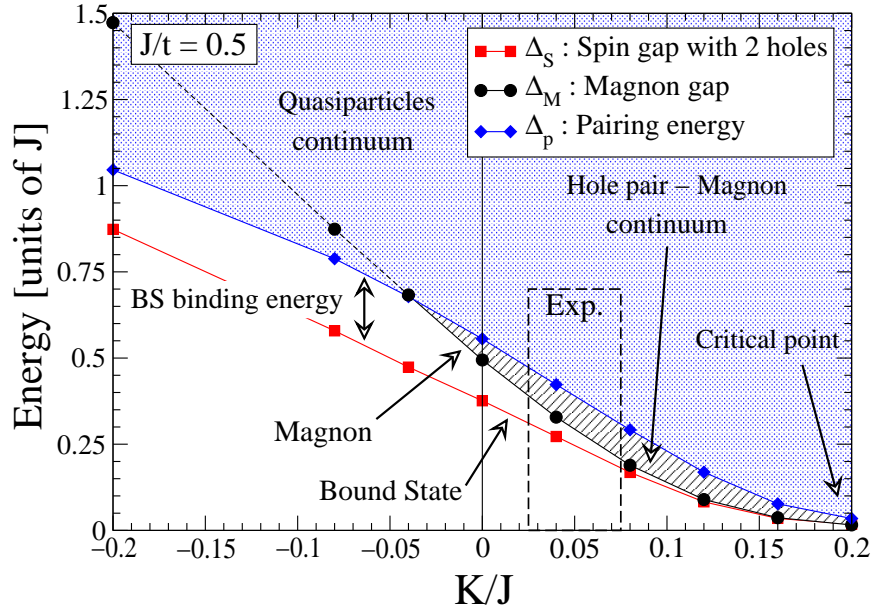


FIG. IV.7: Énergies caractéristiques des excitations élémentaires dans le système en fonction de K/J . La fenêtre représente les valeurs obtenues expérimentalement. Extrait de la publication [1].

le point critique pour $K/J \simeq 0.1$. Le mode résonnant est donc particulièrement sensible à l'échange cyclique.

On voit également que Δ_p s'annule au point critique mettant en résonance le lien entre appariement et gap de spin. En effet, l'appariement des trous s'interprète simplement dans le langage RVB. Les trous induisent des défauts sur les plaquettes interdisant ainsi les résonances RVB. Deux trous sont donc séparés par une ligne de défaut dont l'énergie est grosso-modo proportionnelle à la distance. Une image similaire explique le confinement des spinons dans la phase RVB non dopées des échelles [65]. La déstabilisation de l'état RVB par le terme cyclique entraîne donc un affaiblissement du pairing. Cette image qualitative est en bon accord avec les fonctions de corrélation de trou calculées numériquement (voir figure IV.8) qui montrent une augmentation de la distance moyenne trou-trou à mesure que K/J augmente. De même, le mode résonnant se traduit par une localisation des spins autour des trous (voir figure IV.9 et le chapitre V pour plus de précisions sur l'origine de cet état lié) qui est de moins en moins nette à mesure que K/J augmente.

2.2 Influence de l'échange cyclique et du dopage sur le mode magnétique résonnant

Après avoir étudié comment la modification de l'environnement magnétique influait sur la supraconductivité, l'étude à dopage fini permet d'aborder la compétition entre énergie magnétique et énergie cinétique. On a ainsi calculé l'évolution du gap de spin en fonction du dopage en trou δ qui est rapportée sur la figure IV.10. Lorsque $K = 0$, le gap de spin diminue avec le dopage, passe par un minimum pour $\delta \simeq 0.25$ puis augmente de nouveau. Le minimum est probablement relié à la présence de la commensurabilité $\delta = 0.25$ à petits

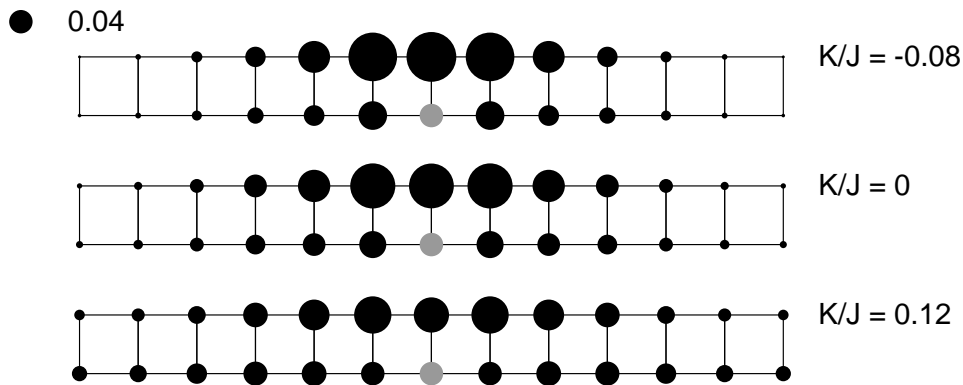


FIG. IV.8: Fonctions de corrélation trou-trou dans le fondamental d'une échelle de taille $L = 13$ avec 2 trous obtenues par diagonalisation exacte. L'aire des cercles est proportionnelle à la valeur de la corrélation. Le maximum de la corrélation s'obtient lorsque les trous sont sur la diagonale. Extrait de la publication [1].

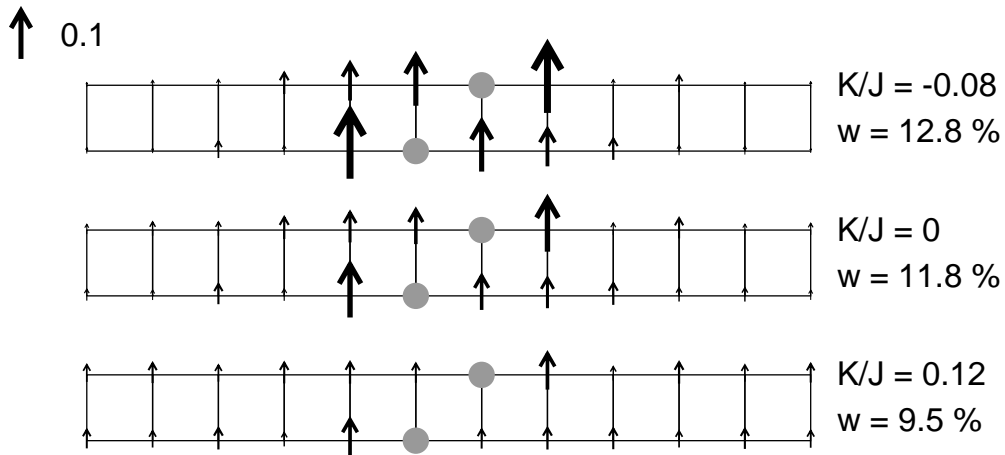


FIG. IV.9: Corrélations trou-spin dans le mode magnétique résonnant obtenues par diagonalisation exacte. La taille des spins est proportionnelle à la corrélation. w représente le poids des configurations avec des deux trous sur la diagonale dans le fondamental (voir corrélations trou-trou de la figure IV.8). Extrait de la publication [1].

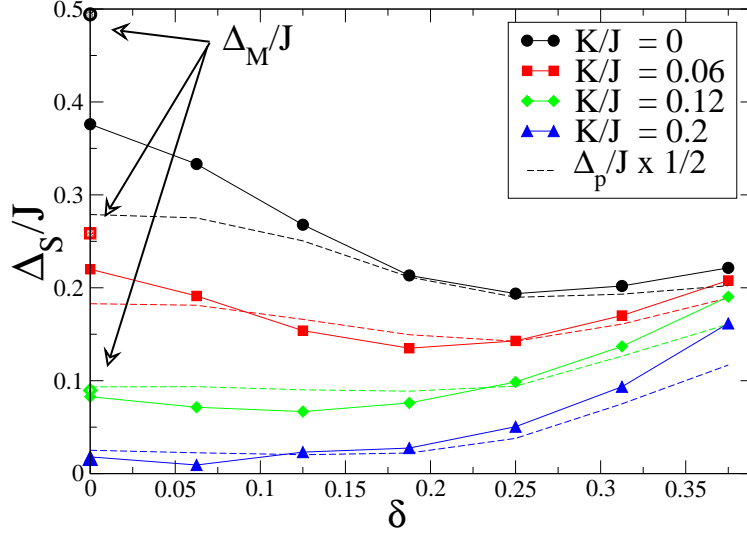


FIG. IV.10: Évolution du gap de spin avec le dopage en trous δ . Les symboles grisés sur la ligne $\delta = 0$ représentent le gap magnon. L'énergie d'appariement est divisée par 2 pour montrer sa corrélation avec le gap de spin. Résultats extrapolés à partir de calculs DMRG. Extrait de la publication [1].

J/t pour laquelle un gap de spin très petit a été trouvé [137]. Lorsque K est présent, le gap de spin est robuste à dopage fini. À l'approche du point critique, le gap de spin, très proche de 0 pour $K/J = 0.2$ s'ouvre avec le dopage. À plus fort dopage, l'échange cyclique n'affecte finalement que peu le gap de spin. Il y a une explication relativement simple à cela qui est que les configurations avec des plaquettes contenant 4 électrons sont d'autant moins probables que le dopage est important. Il est également légitime de remettre en cause le modèle utilisé à fort dopage puisque le modèle t-J correspond plutôt à la limite d'un isolant de Mott faiblement dopé. Quoi qu'il en soit, le dopage repousse le point critique magnétique à de plus fortes valeurs de K à faible dopage.

D'autre part, il est intéressant de suivre le comportement de l'énergie d'appariement pour la comparer au gap de spin (voir figure IV.10). On trouve en effet qu'elle suit remarquablement le gap de spin en fonction du dopage. Cela étend donc la pertinence du mécanisme RVB à dopage fini.

Enfin, d'un point de vue expérimental, il est important d'étudier le poids du mode résonnant dans le facteur de structure de spin qui serait par exemple mesuré par INS. Pour cela, les facteurs de structure statique $\mathcal{S}(\mathbf{k})$ et dynamique $\mathcal{S}(\mathbf{k}, \omega)$ ont été calculés par diagonalisation exacte par la méthode de la décomposition en fraction continue (voir chapitre III) avec les définitions usuelles

$$\mathcal{S}(\mathbf{k}) = \langle S_{-\mathbf{k}}^z S_{\mathbf{k}}^z \rangle_0 = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle S^z(0) S^z(\mathbf{r}) \rangle_0. \quad (\text{IV.8})$$

$$\mathcal{S}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \langle \psi_0 | S_{-\mathbf{k}}^z \frac{1}{\omega + i\epsilon - (\mathcal{H} - E_0)} S_{\mathbf{k}}^z | \psi_0 \rangle. \quad (\text{IV.9})$$

Le facteur de structure statique doit converger vers une constante pour ces corrélations exponentielles et diverger pour les corrélations critiques. La figure IV.11 montre un exemple

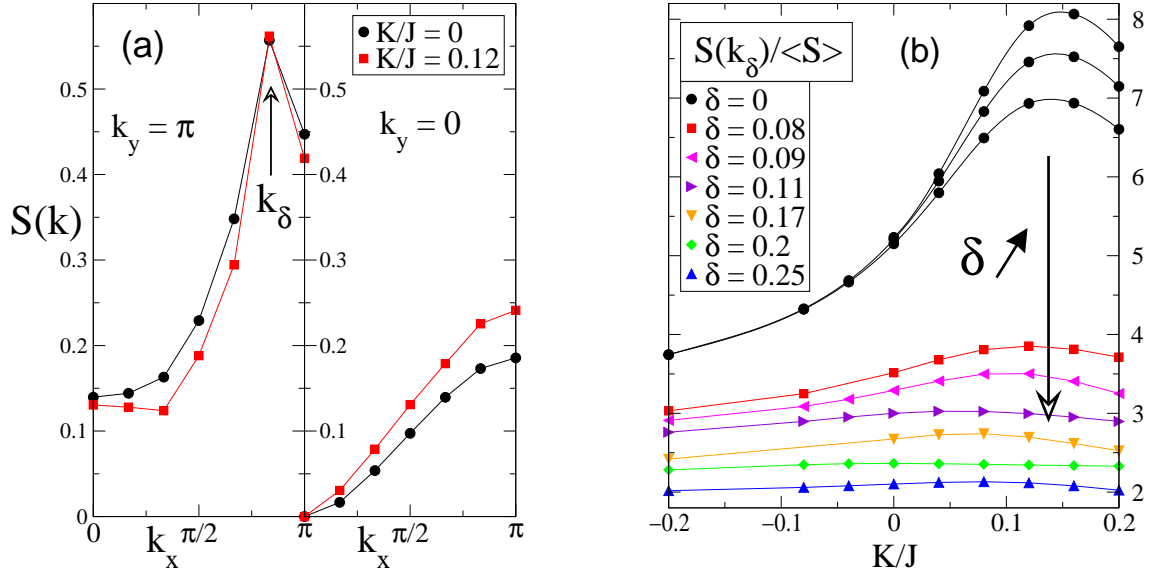


FIG. IV.11: Facteur de structure statique calculé par diagonalisation exacte. À gauche, en fonction de \mathbf{k} pour un système 2×12 avec 4 trous montrant le maximum du poids à $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\delta$. À droite, le poids du pic $\mathcal{S}(\mathbf{k}_\delta)/\langle \mathcal{S} \rangle$ pour différents dopages en fonction de K/J (à partir de systèmes avec L entre 8 et 16). $\mathcal{S}(\mathbf{k}_\delta)$ est normalisé par rapport au facteur de structure moyen $\langle \mathcal{S} \rangle = (2L)^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{S}(\mathbf{k}) = \frac{1}{4}(1-\delta)$. Extrait de la publication [1].

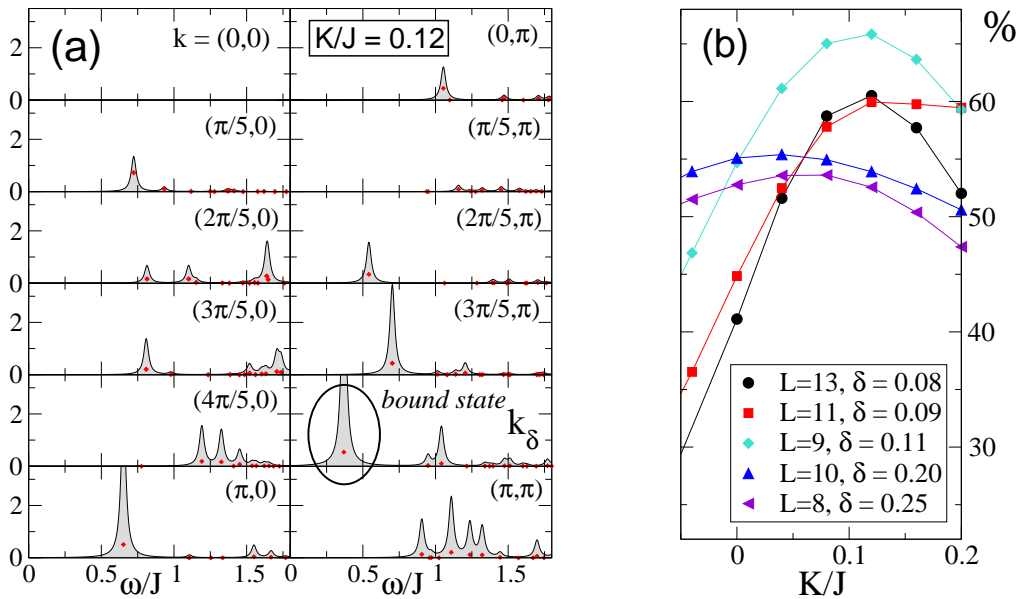


FIG. IV.12: À gauche, le facteur de structure dynamique calculé par diagonalisation exacte en fonction de \mathbf{k} met en évidence l'état lié pour un vecteur d'onde $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\delta$ et une énergie $\omega = \Delta_S$. Les losanges rouges signalent la position et le poids relatif de chacun des pics. À droite, le poids relatif du mode magnétique résonnant pour différents dopages. Extrait de la publication [1].

de facteur de structure en fonction de \mathbf{k} . Le maximum est atteint pour le vecteur incommensurables \mathbf{k}_δ correspondant au mode magnétique résonnant. Le poids de ce pic en fonction de K/J et du dopage est donné sur la figure IV.11. Il montre une divergence à l'approche de la transition dans le système non dopé². On ne peut faire d'extrapolation de taille finie en diagonalisation exacte à dopage fixé. Malgré cela, les courbes montrent une moindre augmentation du poids $\mathcal{S}(\mathbf{k}_\delta)$ normalisé à mesure que le dopage augmente, en accord avec les résultats de la figure IV.10.

Le mode magnétique résonnant se manifeste par un pic bien défini dans le facteur de structure dynamique pour un vecteur d'onde $\mathbf{k} = \mathbf{k}_\delta$ et une énergie $\omega = \Delta_S$ (voir figure IV.12). Une quantité particulièrement importante quant à la visibilité de ce mode dans les expériences de dynamique est le poids intégré sous ce pic relativement au poids total $\mathcal{S}(\mathbf{k}_\delta)$ à ce vecteur d'onde particulier. Si on note $|\psi_{\text{Res}}\rangle$ la fonction d'onde du mode résonnant, ce poids relatif s'écrit également $|\langle\psi_{\text{Res}}|S_{\mathbf{k}_\delta}^z|\psi_0\rangle|^2/\mathcal{S}(\mathbf{k}_\delta)$. L'évolution de ce poids relatif du mode résonnant en fonction de K/J est donnée sur la figure IV.12. On voit que, là encore aux effets de taille finie près, ce poids augmente légèrement jusque vers $K/J \simeq 0.1$ avant de diminuer à proximité du point critique. Cela laisse penser que ce mode reste pertinent pour les valeurs de l'échange cyclique expérimentalement observées. On s'attend à ce que la proximité du continuum au-delà de $K/J \simeq 0.1, 0.12$ (cf figure IV.7) diminue significativement le poids de ce mode à la limite thermodynamique.

3 Conclusion partielle

L'échange cyclique, au delà de raffiner la description et la compréhension du magnétisme des cuprates, permet d'étudier le mécanisme d'appariement des échelles en jouant sur la nature de l'environnement magnétique. La compétition entre énergie magnétique et énergie cinétique a montré d'une part la possibilité de détruire l'appariement au point critique quantique mais aussi de rouvrir le gap de spin avec le dopage à partir de ce même point critique. Dans les deux cas, on a vu que l'existence de la phase supraconductrice était intimement liée à la nature RVB ou non de l'isolant de Mott dont elle est issue. Enfin, cela nous a permis de mieux comprendre et de tester la robustesse du mode magnétique résonnant qui apparaît dans la dynamique de spin. Cet état de basse énergie provient d'arguments phénoménologiques que nous allons retrouver dans la physique sous champ magnétique. D'autre part, certaines questions particulières n'ont pas été abordées mais pourraient faire l'objet d'investigations ultérieures comme le dopage de la phase dimérisée ou même de la phase à chiralité scalaire qui, bien que loin des paramètres physiques réalisables, brise l'invariance par renversement dans le temps. Assez peu de modèles exhibent cette brisure spontanée de symétrie.

²Le maximum n'est pas pour $K/J = 0.2$ car pour un système de taille finie, le maximum déterminera un point critique $K_c(L)$ qui convergera vers K_c à la limite thermodynamique. Ce déplacement du maximum se voit sur le comportement pour les tailles $L = 12, 14$ et 16 de la figure IV.11.

Chapitre V

Effet Zeeman dans les échelles dopées

Cette partie discute le comportement des échelles de spins dopées en présence d'un champ magnétique qui se couple aux spins par effet Zeeman. Cette situation correspond expérimentalement au cas où l'on peut négliger les effets orbitaux en prenant un champ suffisamment fort dans le plan des échelles [259] (cf figure V.1). Comme discuté au chapitre I, les supraconducteurs quasi-unidimensionnels présentent des propriétés remarquables sous champ magnétique. Dans les échelles de spins dopées, les expériences montrent un probable dépassement de la limite de Pauli [124, 126]. D'autre part, les plateaux d'aimantation ont été assez peu abordés dans les systèmes dopés malgré la possibilité de plateaux d'aimantation contrôlés par le dopage étudiés dans les modèles de chaîne t-J [260] et Hubbard dimérisées [261, 262]. Un plateau d'aimantation pour $m = \delta$ a été prédit sur les échelles de spin sur la base de calculs de bosonisation [263].

Les résultats sont obtenus par comparaison systématique des résultats de DMRG aux résultats de bosonisation, tout en les complétant par des considérations phénoménologiques. On présente d'abord la modélisation et les résultats dans les cas limites qui permettent de se familiariser avec l'effet Zeeman dans les systèmes dopés. On aborde ensuite le cas plus réaliste du modèle t-J isotrope avec une étude exhaustive des propriétés magnétiques et supraconductrices sous champ. Cela permettra d'établir le diagramme de phase sous champ en fonction du dopage en trous. Les résultats obtenus seront finalement discutés en regard des expériences dans les échelles de spins et plus généralement dans les composés quasi-unidimensionnels évoqués au chapitre I. Si la plupart des études sur les supraconducteurs non conventionnels sous champ magnétique sont basées sur une approche type champ moyen (théorie BCS), nous abordons ici le problème avec des méthodes plus adaptées aux systèmes quasi-unidimensionnels. Dans le même esprit, citons un article sur la chaîne t-J sous champ magnétique [264] montrant des oscillations dans les corrélations supraconductrices (voir ci-après pour la discussion physique) et un article de bosonisation sur le modèle de Hubbard attractif [265] décrivant un gaz d'atomes froids piégés dans un réseau optiques (voir chapitre VII pour plus de détails sur ces dispositifs expérimentaux).

1 Warm-up : modélisation et cas limites

1.1 hamiltonien

Le champ magnétique \mathbf{H} se couple par effet Zeeman à chaque spin selon un terme $-g\mu_B\mathbf{H}\cdot\mathbf{S}$ qui impose naturellement l'axe de quantification du spin. Le champ est pris uniforme si bien

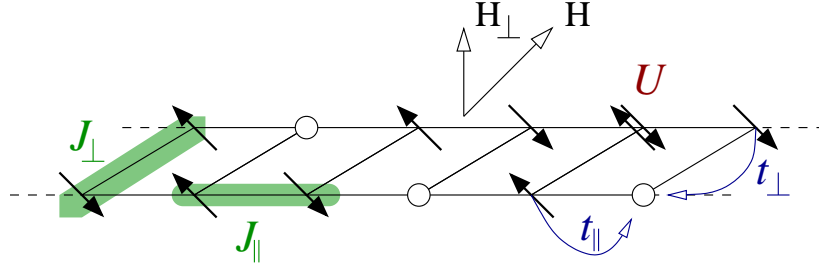


FIG. V.1: *Modèle de l'échelle sous champ magnétique. Lorsque le champ magnétique est dans le plan de l'échelle et suffisamment fort on peut négliger l'effet orbital et ne conserver que le terme d'effet Zeeman.*

qu'il s'agit finalement d'un terme constant¹ $-g\mu_B \mathbf{H} \cdot S_{\text{tot}}^z$. Dans cette section, on considère que les termes de sauts le long des montants (\parallel) et sur les barreaux (\perp) peuvent être différents. L'hamiltonien de Hubbard du système s'écrit donc

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -t_{\parallel} \sum_{i,p=1,2,\sigma} [c_{i+1,p,\sigma}^{\dagger} c_{i,p,\sigma} + h.c.] - t_{\perp} \sum_{i,\sigma} [c_{i,2,\sigma}^{\dagger} c_{i,1,\sigma} + h.c.] \\ & + U \sum_{i,p=1,2} n_{i,p,\uparrow} n_{i,p,\downarrow} - \sum_{i,p=1,2} \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_{i,p} \end{aligned}$$

en absorbant la constante $g\mu_B$ dans la définition de \mathbf{H} . Les énergies des bandes liantes et anti-liantes de la partie cinétique sont dans ce cas

$$\mathcal{E}_{k_y,\sigma}(k) = -2t_{\parallel} \cos(k) - t_{\perp} \cos(k_y) - H \frac{\sigma}{2}, \quad (\text{V.1})$$

et sont représentées sur la figure V.2. En notant k_{F,k_y}^{σ} les vecteurs de Fermi qui dépendent maintenant explicitement de l'état du spin, on a d'après le théorème de Luttinger

$$n = \frac{1}{2\pi} \sum_{(k_y,\sigma) \text{ occ.}} k_{F,k_y}^{\sigma}, \quad (\text{V.2})$$

avec $n = N^e/(2L) = 1 - \delta$ la densité électronique qui sera prise fixe comme dans les composés. De la même manière, l'aimantation par site $m = (N^{\uparrow} - N^{\downarrow})/(2L)$ peut se réécrire

$$m = \frac{1}{2\pi} \sum_{(k_y,\sigma) \text{ occ.}} \sigma k_{F,k_y}^{\sigma}, \quad (\text{V.3})$$

les deux dernières relations étant toujours vraies en présence d'interactions.

Les remplissages n et m permettent d'établir le théorème de Yamanaka-Oshikawa-Affleck pour les échelles dopées à aimantation finie en regardant les conditions sur les électrons \uparrow et \downarrow . On obtient ainsi $\mathcal{N}_{\sigma} = 1 - \delta + \sigma m$ pour les échelles à deux montants [263]. Il est important de

¹Numériquement, on calcule les énergies $E(n_h, S^z)$ à nombre de trous n_h et aimantation S^z fixés et on déduit le champ magnétique avec $H(S^z) = E(n_h, S^z + 1) - E(n_h, S^z)$. Les effets de taille finie donne des marches de l'ordre de $1/L$ en aimantation. On peut interpoler les champs magnétiques de ces marches à m fixé en utilisant $[H(S^z) + H(S^z - 1)]/2$.

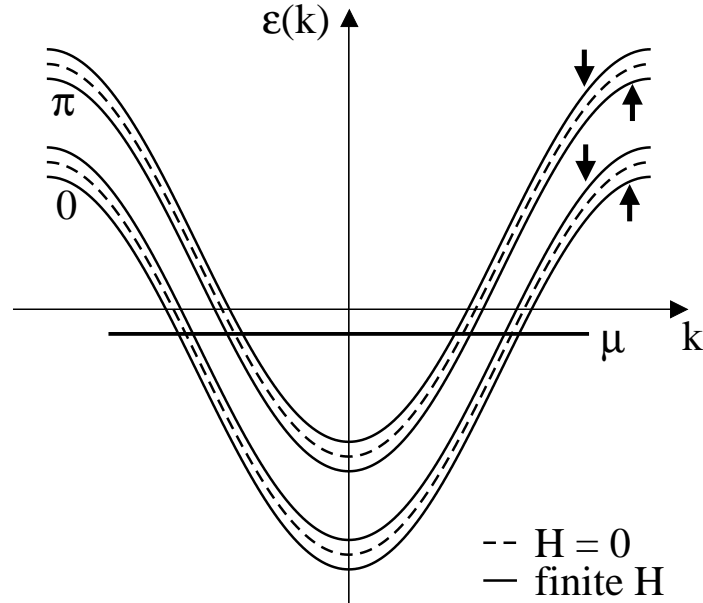


FIG. V.2: Les bandes liantes et anti-liantes de l'échelle sont séparées par l'effet Zeeman. Extrait de la publication [3].

noter que les conditions de commensurabilité concernent de manière différente les électrons \uparrow et \downarrow . Un secteur σ peut être gappé tandis que l'autre ne l'est pas. C'est par exemple le cas si $m = \delta$, le secteur \uparrow peut être gappé avec \downarrow qui ne l'est pas. Il n'y a donc plus la séparation spin-charge existante à $m = 0$. L'existence du gap de spin à $m = 0$ n'est d'ailleurs pas en contradiction avec le théorème YOA puisque dans ce cas, la condition de commensurabilité ne porte plus que sur δ (voir discussion du chapitre II). On s'attend donc à la *possibilité* d'avoir un plateau d'aimantation à $m = 0$, $m = \delta$ et $m = 1 - \delta$, le dernier étant simplement le plateau de saturation. Le plateau $m = \delta$ correspond à une commensurabilité de n_{\uparrow} . Celle-ci peut avoir lieu soit si la bande des électrons \uparrow est complètement remplie, soit si elle est à un remplissage commensurable, $n_{\uparrow} = 1/2$ par exemple. Il s'agit de deux situations différentes dans la mesure où la première apparaît naturellement dans le système sans interaction tandis que la deuxième nécessite la présence d'interaction forte et par conséquent est moins triviale.

1.2 Système sans interaction

Commençons donc par le cas sans interaction $U = 0$. Le décalage entre les bandes induit par l'effet Zeeman va entraîner le vidage ou le remplissage complet de certaines d'entre elles. Deux cas sont à distinguer suivant qu'il existe ou non un gap à champ nul entre les deux bandes, c'est-à-dire suivant que $t_{\perp} > t_{\parallel}(1 - \cos \pi n)$ ou $t_{\perp} < t_{\parallel}(1 - \cos \pi n)$.

Dans le premier cas, seules les bandes $(0, \uparrow)$ et $(0, \downarrow)$ sont partiellement remplies à faible champ (voir les figures V.3 et V.4 (a)) induisant une susceptibilité finie. L'aimantation augmente alors jusqu'à ce que la bande $(0, \uparrow)$ soit complètement remplie (cf figure V.3 et figure V.4 (b)). Au-delà de ce champ critique, un plateau d'aimantation à $m = \delta$ apparaît. Cette valeur est donc directement contrôlée par le dopage en trous [261, 262]. La largeur de ce plateau est $2(t_{\perp} - 2t_{\parallel})$ d'après des arguments énergétiques [262]. Le plateau se termine

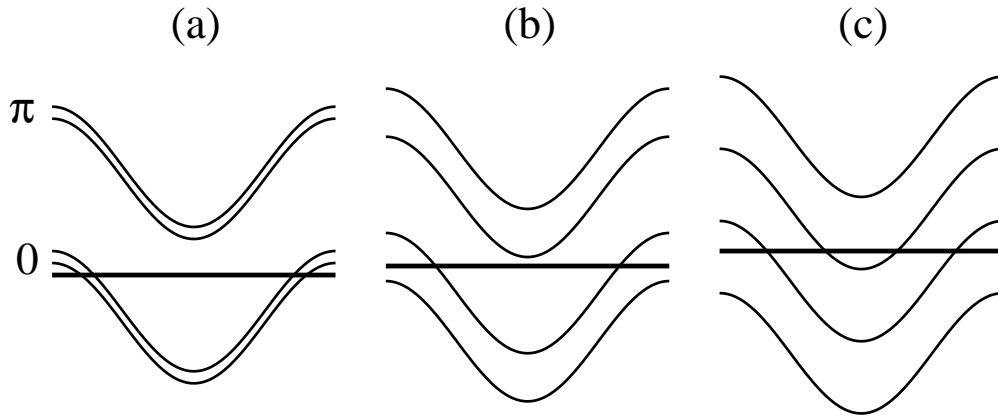


FIG. V.3: Évolution du remplissage des bandes avec le champ magnétique pour $t_{\perp} > t_{\parallel}(1 - \cos \pi n)$. La courbe d'aimantation associée à cette évolution est donnée à la figure V.4. (a) à faible champ, les deux bandes inférieures \uparrow et \downarrow sont partiellement remplies : l'échelle a une susceptibilité finie. (b) la bande \uparrow du bas est complètement remplie, seule la bande \downarrow est partiellement remplie : augmenter le champ ne change pas le remplissage respectif des bandes \uparrow et \downarrow ce qui se manifeste par un plateau. (c) lorsque le champ est assez fort pour commencer à remplir la bande (π, \uparrow) , l'échelle retrouve une susceptibilité finie et l'aimantation augmente de nouveau. Extrait de la publication [3].

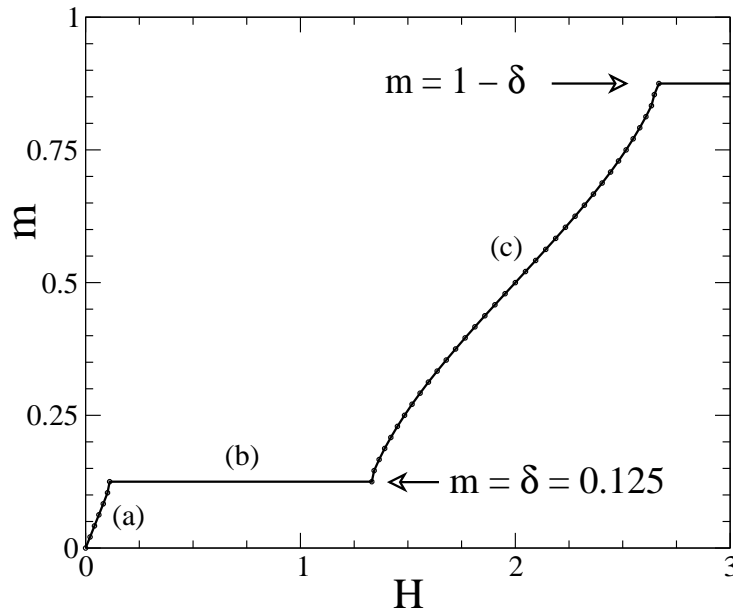


FIG. V.4: Courbe d'aimantation du système sans interaction calculée par DMRG pour $t_{\perp} = 1$ et $t_{\parallel} = 0.2$ mettant en évidence un plateau à $m = \delta$ dû aux effets de remplissage. Voir figure V.3 pour les explications. Extrait de la publication [3].

lorsqu'on commence à remplir la bande (π, \uparrow) (figure V.3 et figure V.4 (c)). Le système s'aimante de nouveau jusqu'à ce que la bande $(0, \downarrow)$ se vide, là où commence le plateau de saturation.

Dans le deuxième cas, les quatre bandes sont initialement remplies. Il n'y a pas de plateau d'aimantation dans ce cas car il y a toujours une bande \uparrow partiellement remplie. En revanche, les remplissages et vidages successifs des bandes \uparrow et \downarrow vont induire des points singuliers dans la courbe d'aimantation aux champs critiques correspondant. La susceptibilité va naturellement diminuer après avoir rempli ou vidé complètement une bande puisque de moins en moins d'électrons vont y contribuer. Un exemple de cette courbe d'aimantation est donné plus loin sur la figure V.25 où elle est comparée à la courbe avec de fortes interactions.

1.3 Interactions fortes dans la limite de grande anisotropie

On donne ici quelques remarques sur le comportement dans le système en interaction forte mais très anisotrope. On décrit dans ce cas le système par un modèle t-J avec des couplages différents selon les montants et les barreaux (cf figure V.1)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -t_{\parallel} \sum_{i,p=1,2,\sigma} \mathcal{P}[c_{i+1,p,\sigma}^{\dagger} c_{i,p,\sigma} + h.c.] \mathcal{P} - t_{\perp} \sum_{i,\sigma} \mathcal{P}[c_{i,2,\sigma}^{\dagger} c_{i,1,\sigma} + h.c.] \mathcal{P} \\ & + J_{\parallel} \sum_{i,p=1,2} [\mathbf{S}_{i,p} \cdot \mathbf{S}_{i+1,p} - \frac{1}{4} n_{i,p} n_{i+1,p}] + J_{\perp} \sum_i [\mathbf{S}_{i,1} \cdot \mathbf{S}_{i,2} - \frac{1}{4} n_{i,1} n_{i,2}] - \sum_{i,p=1,2} \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_{i,p}. \end{aligned}$$

En toute rigueur, les couplages magnétiques ne sont pas indépendants des termes de sauts puisqu'ils sont issus de la limite $U \gg t$ du modèle de Hubbard avec $J \sim 4t^2/U$ mais on les fera varier librement pour mieux caractériser les différentes situations.

La première limite à considérer est celle d'un couplage prédominant selon les barreaux $J_{\parallel}, t_{\parallel}, t_{\perp} \ll J_{\perp}$. L'énergie d'appariement de deux trous est alors approximativement $J_{\perp} - 2t_{\perp} - 2t_{\parallel}$ [266]. Avec le champ magnétique, cette dernière évoluera peu en prenant la définition de l'Eq. (V.18) que l'on discutera plus en détails par la suite. On se convainc assez facilement que dans cette limite ou les trous sont relativement « statiques », deux fondamentaux sont en compétition sous champ magnétique² : celui avec les trous appariés sur les barreaux pour lequel l'aimantation sera due à des triplet sur les barreaux et celui où les trous sont associés à un spin libre sur un barreau, ce dernier portant préférentiellement l'aimantation puisqu'il n'en coûte rien. On peut évaluer la différence d'énergie moyenne par barreau entre ces deux états en utilisant la formule précédente pour l'appariement des trous et les énergies en fonction des couplages et des remplissages. Deux cas sont possibles suivant que tous les trous sont associés à des spins polarisés ou non :

$$\begin{aligned} m < \delta : \quad \Delta e & \sim (J_{\perp} - 2t_{\perp} - 2t_{\parallel})\delta - J_{\perp}m \\ m > \delta : \quad \Delta e & \sim (2J_{\perp} - 2t_{\perp} - 2t_{\parallel})\delta - 2J_{\perp}m. \end{aligned}$$

Le cas intéressant est $J_{\perp}/(t_{\perp} + t_{\parallel}) > 2$: une transition de l'état avec appariement vers l'état sans appariement a alors lieu pour une aimantation critique $m_c = [1 - 2(t_{\perp} + t_{\parallel})/J_{\perp}]\delta$ qui reste toujours plus petite que δ . Qu'en est-il de la courbe d'aimantation ? Le fondamental

²Les états avec une partie des trous appariés et l'autre non sont toujours plus haut en énergie que ces deux états.

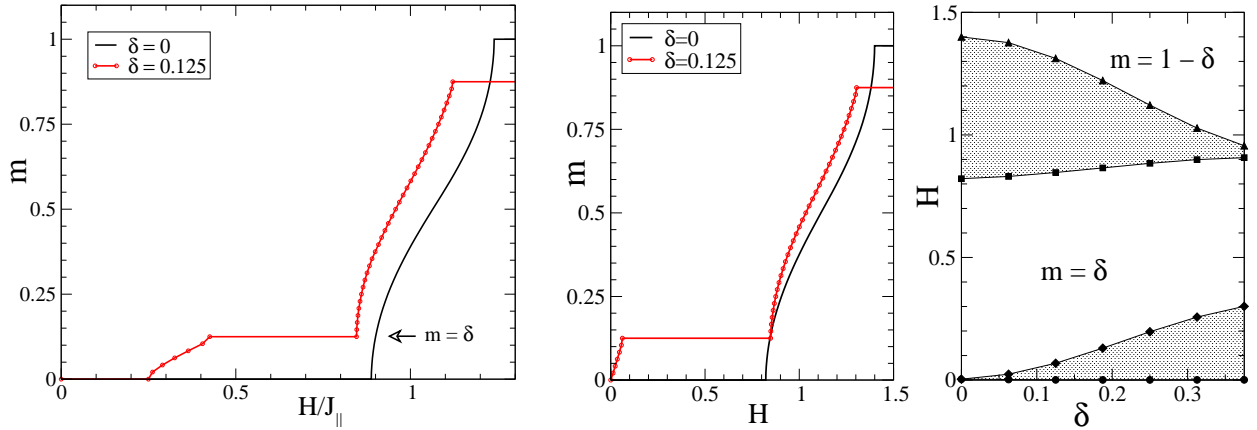


FIG. V.5: À gauche, plateaux $m = 0$ et $m = \delta$ dans la limite fortement anisotrope où $J_{\perp} = 2.5$ est l'énergie dominante, $J_{\parallel} = 0.3$ et $t_{\perp} = t_{\parallel} = 1.0$. Il n'y a pas d'appariement au niveau du plateau. À droite, plateau d'aimantation $m = \delta$ mais pas $m = 0$ avec les paramètres anisotropes $J_{\perp} = t_{\perp} = 1.0$ et $J_{\parallel} = t_{\parallel} = 0.2$. Extrait de la publication [3].

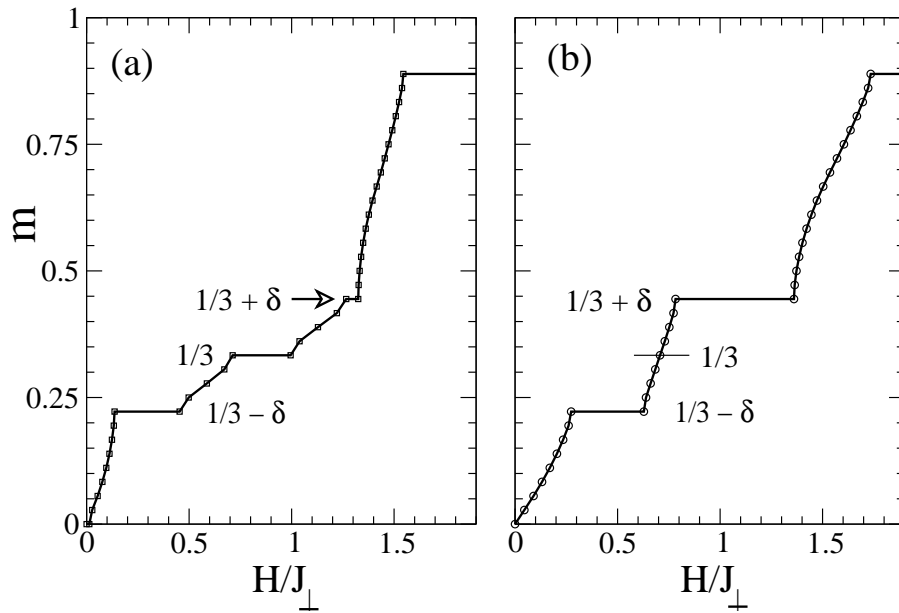


FIG. V.6: Plateaux dans les mêmes limites que la figure V.5 mais dans les échelles à trois montants. Le plateau à $m = 1/3$ présent au demi-remplissage est séparé en plateaux à $m = 1/3 \pm \delta$. À gauche, le plateau à $m = 1/3$ correspondrait à une phase avec de l'appariement.

avec appariement aura un gap de spin et donc un plateau d'aimantation avec $m = 0$. Elle donne également un mécanisme simple de formation d'un plateau $m = \delta$ dans le système. En effet, l'aimantation croît continûment de 0 à m_c au delà du champ critique du gap de spin. Les trous se séparent alors et les spins qui leur sont associés se polarisent tous lorsque $m = \delta$. L'excitation magnétique suivante sera de retourner un singulet en triplet sur un barreau ce qui coûte de l'ordre de J_\perp et on aura ainsi un plateau d'aimantation dont la largeur est contrôlée par J_\perp . Les calculs numériques de la figure V.5 montrent que cette approche qualitative donne une bonne description de ce qu'il se passe dans ce système. Les plateaux ne sont cette fois-ci dus qu'à la présence de fortes interactions. On peut donc avoir un plateau irrationnel plus grand que le plateau à $m = 0$.

Dans le cas sans appariement à champ nul, l'aimantation croît jusqu'au plateau $m = \delta$ qui a la même origine que celui ci-dessus. Le dopage tue immédiatement le gap de spin au demi-remplissage mais celui-ci se retrouve par continuité au niveau du plateau $m = \delta$ (voir figure V.5). Un tel scénario pourrait être pertinent pour des composés de dimères dopés où les interactions sur les barreaux sont dominantes comme discuté dans les matériaux à échelles organiques au chapitre I.

Dans ces limites, l'algorithme DMRG converge très bien compte-tenu de la « dimérisation » et de la physique plutôt locale des fondamentaux étudiés. On a donc été tenté de regarder les échelles dopées à trois montants. Le théorème YOA donne ici une possibilité de plateau pour $m = 1/3 \pm \delta$. Le cas non dopé a été étudié en détails [81, 82] et montre l'apparition d'un plateau d'aimantation $m = 1/3$ pour $J_\perp \gtrsim J_\parallel$. Celui-ci se comprend qualitativement par l'argument vu au chapitre I sur la différence entre échelles à deux et trois montants. Dans la limite $J_\perp \gg J_\parallel$, on forme un dimère plus un spinon sur chaque barreau et le système est équivalent à une chaîne de spin 1/2. Sous champ magnétique, cette « sous-chaîne » va se polariser entièrement pour $m = 1/3$ où il faut alors faire une excitation magnétique dans la « sous-échelle » à deux montants pour augmenter l'aimantation. Or, celle-ci est gappée et on a donc un plateau. En présence de dopage, on observe sur la figure V.6 une séparation du plateau $m = 1/3$ en deux plateaux $m = 1/3 \pm \delta$ lorsqu'on a un grand J_\perp . Microscopiquement, les fondamentaux peuvent être vus avec l'image de la chaîne polarisée au milieu du système. Pour $m = 1/3 - \delta$, on met des dimères sur chaque barreau et le site restant est occupé soit par un spinon soit par un trou. Pour $m = 1/3 + \delta$, on met la chaîne polarisée dans le système plus un spinon associé à chaque trou dans la « sous-échelle » à deux montants. Enfin, il semble qu'un plateau se forme pour $m = 1/3$ pour des interactions particulières (voir figure V.6). Il pourrait correspondre à une phase où l'on polarise la chaîne si bien qu'on se retrouve avec la physique de l'échelle à deux montants dans le système, avec un gap de spin et de l'appariement. Il s'agirait donc d'un mécanisme d'appariement sous champ magnétique assez simple mais pour des paramètres peu réalistes et nous n'avons malheureusement pas eu encore le temps d'approfondir cette discussion en calculant par exemple les gaps de charge. La limite isotrope est beaucoup plus difficile numériquement dans les échelles dopées à trois montants. Les calculs tests effectués n'ont pas été très concluants et ne montrent pas de plateau. À noter qu'il a été proposé l'ouverture d'un gap de spin dans les échelles à trois montants pour un dopage critique en trous [267–269] qui correspondrait à l'apparition d'un plateau $m = 0$ induit par le dopage.

Revenons aux échelles à deux montants. Un point important et non trivial est la possibilité que l'appariement subsiste dans la limite isotrope dans la phase plateau. On a vu que dans la

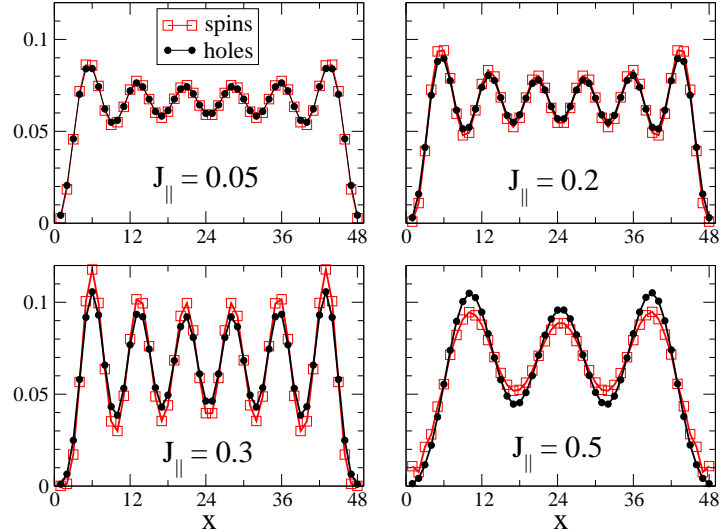


FIG. V.7: Densités locales de trous et de spins calculées par DMRG montrant l'existence d'appariement dans la phase plateau $m = \delta$ seulement dans la limite isotrope du modèle t - J . Extrait de la publication [3].

limite fortement anisotrope, l'état dans le plateau est toujours constitué de quasi-particules. Si on part de l'hamiltonien t - J avec $J_{\perp} = 0.5$ et $t_{\perp} = t_{\parallel} = 1.0$, ce qui est plus réaliste, on observe une transition à mesure que J_{\parallel} augmente de 0 à J_{\perp} entre l'état non apparié et l'état apparié (voir figure V.7). C'est un des résultats surprenants de la limite isotrope que nous allons discuter plus en détails.

2 Propriétés magnétiques : plateau d'aimantation contrôlé par le dopage

2.1 Courbes d'aimantation

La limite isotrope en présence d'interactions fortes a été étudiée en utilisant le modèle t - J . Une brève discussion du modèle de Hubbard est donnée en fin de chapitre. On choisit tout d'abord de se placer au cœur de la phase supraconductrice en prenant $J/t = 0.5$ d'après le diagramme de phase de la figure II.17. La courbe d'aimantation obtenue numériquement³ est montrée sur la figure V.8. La courbe du système dopé (en bleu) se caractérise par une plus grande richesse de transitions de phase que la courbe de référence non dopée (en noir). On retrouve le plateau $m = 0$ qui n'est autre que le gap de spin. On trouve ensuite un plateau à $m = \delta$ qui ne peut être dû qu'aux interactions d'après les considérations précédentes sur le système libre. Ensuite la courbe a une discontinuité de sa dérivée pour un champ critique H_c dont on verra qu'il s'identifie au champ critique supraconducteur de l'échelle. Les mêmes plateaux irrationnels se retrouvent pour des valeurs continues du dopage si bien qu'il s'agit de plateaux contrôlés par le dopage en trous (voir plus loin les diagrammes de phase des figures V.23 et V.22).

³...avec la méthode avec un seul site en gardant 1600 états, ce qui donne un poids rejeté inférieur à 10^{-6} .

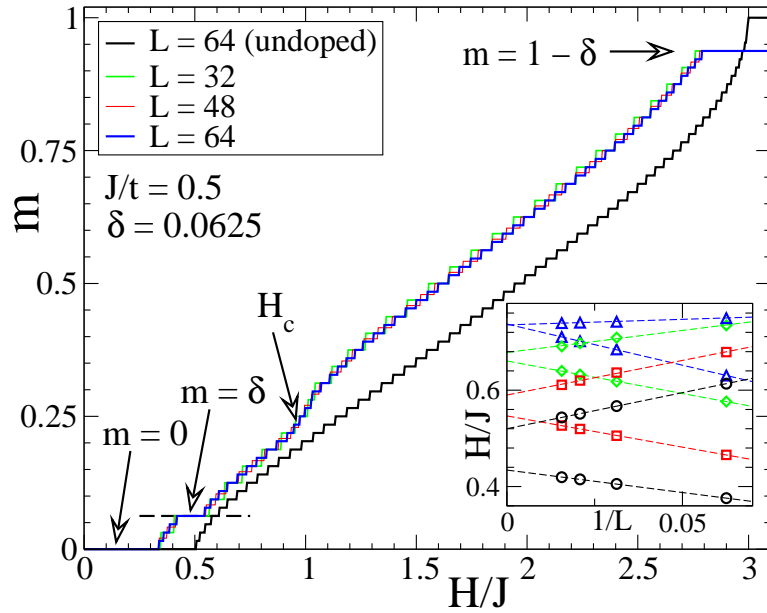


FIG. V.8: Courbe d'aimantation dans les échelles supraconductrices. Les plateaux à $m = 0$ et $m = \delta$ sont clairement visibles. En insert, les extrapolations de taille finie des limites inférieure et supérieure du plateau pour $\delta = 0.0625$ (\circ), 0.125 (\square), 0.1875 (\diamond), 0.25 (\triangle). H_c est le champ critique supraconducteur. Extrait de la publication [2].

2.2 Origine du plateau

Comme évoqué dans la section 1.3, le plateau a pour origine phénoménologique la stabilisation des électrons polarisés par un gain d'énergie cinétique qui était t_{\perp} dans la limite anisotrope. Cette phénoménologie est en lien direct avec l'effet Nagaoka [191] qui provient du théorème de Nagaoka [270]. Ce dernier démontre que pour le modèle de Hubbard bidimensionnel dans la limite $U/t = \infty$, le fondamental avec un trou est ferromagnétique. Cela est illustré très qualitativement sur la figure V.9 qui montre que le déplacement d'un trou dans un environnement anti-ferromagnétique est frustrant pour les interactions magnétiques. Il en coûte grosso-modo une énergie proportionnelle à $J \times l$ où l est la longueur de la chaîne dans le sillage du trou. Si le couplage J est assez important (U petit mais suffisant pour avoir un isolant de Mott au demi-remplissage), cela aura tendance à défavoriser l'énergie cinétique des trous au profit de l'énergie magnétique. Si J est très petit (U très grand), un environnement ferromagnétique peut permettre d'abaisser l'énergie totale grâce à un gain d'énergie cinétique. On retiendra donc simplement que les trous gagnent de l'énergie cinétique dans un environnement ferromagnétique. C'est ce qui explique l'état lié du mode magnétique résonnant dans les échelles de spins ainsi que les plateaux contrôlés par le dopage.

Regardons maintenant l'évolution des densités locales de la figure V.10 à mesure que l'aimantation augmente dans le système. À aimantation nulle, le système contient six trous et les trois bosses dans la densité locale de trous traduisent la présence des paires de trous. Lorsqu'on rajoute un magnon dans le système ($m = 0.021$), il se lie préférentiellement à une paire de trous en raison de l'effet Nagaoka. Si on en rajoute deux, ils se lient chacun avec une paire de trous. Lorsqu'on a autant de magnons que de paires de trous ($m = \delta$),

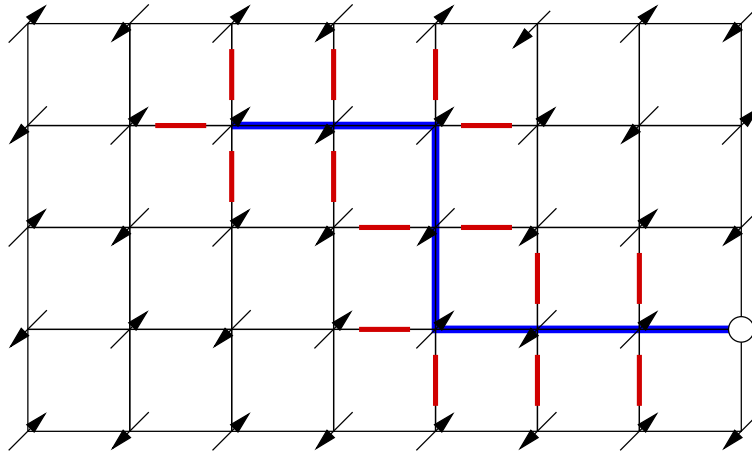


FIG. V.9: Vue d'artiste de l'effet Nagaoka : un trou dans un système antiferromagnétique « frustre » les interactions magnétiques en se déplaçant (les liens frustrés sont en rouge). Lorsque J/t est grand, les trous sont peu mobiles et le fondamental antiferromagnétique. Lorsque J/t est petit, le fondamental est ferromagnétique afin de favoriser l'énergie cinétique des trous.

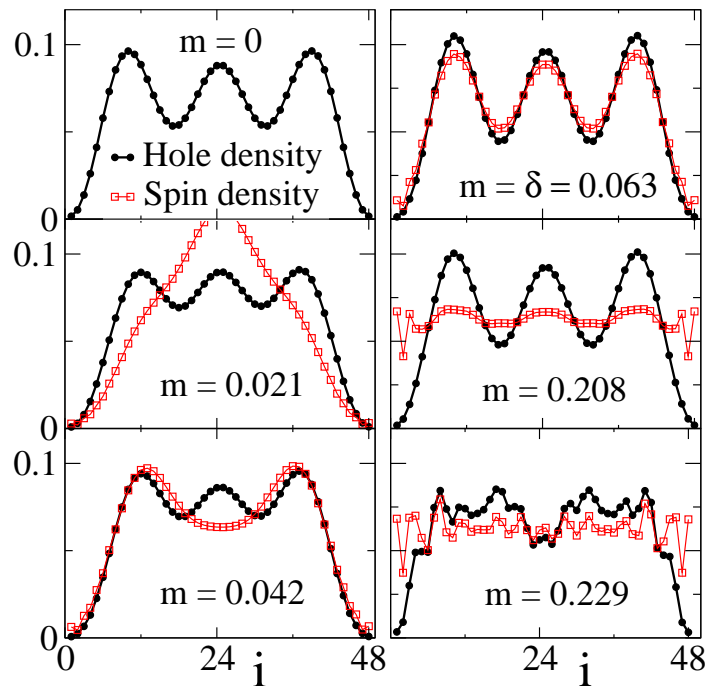


FIG. V.10: Densités locales de trous et de spins calculées par DMRG dans une échelle avec $L = 48$ et 6 trous (trois paires de trous). Voir le texte pour la discussion. Extrait de la publication [2].

chaque paire de trou « résonne » avec un magnon et il faut une énergie finie pour rajouter un magnon dans le système, donnant lieu à la formation du plateau d'aimantation. Lorsque l'aimantation augmente de nouveau, on voit que l'appariement subsiste au-delà du plateau contrairement à ce qu'il se passe dans le cas anisotrope. Entre les figures avec $m = 0.208$ et $m = 0.229$, il n'y a qu'un magnon d'écart. On voit dans la seconde que l'appariement est détruit au profit d'un gaz d'électrons et de spinons ayant des densités presque uniformes. On verra que cette aimantation correspond de fait au champ critique supraconducteur du système.

L'ouverture du plateau peut être justifiée également par bosonisation. Tout d'abord, la description des échelles faite au chapitre II en termes des modes de charge et de spin $\phi_{c/s,\pm}$ reste valable. On supposera pour la description de la physique à faible aimantation que la différence des vitesses de Fermi des bandes 0 et π n'est pas pertinente. Le champ magnétique se couple au mode de spin symétrique (l'aimantation) selon

$$\mathcal{H} = \frac{H}{\pi} \int dx \partial_x \phi_{s+}. \quad (\text{V.4})$$

En présence d'interactions répulsives, d'après le terme de diffusion vers l'avant de l'Eq. (II.91) et le dernier terme de l'Eq. (II.92) ne contenant que les champs antisymétriques, on aura $\langle \theta_{c-} \rangle = 0$ et $\langle \phi_{s-} \rangle = \pi/2$. En revanche, le terme ϕ_{s+} aura une transition commensurable-incommensurable dès que le champ magnétique est plus grand que le gap de spin. À aimantation non nulle (mais sous le champ supraconducteur critique), on s'attend donc à avoir un liquide de Luttinger C1S1. Il y a de plus un effet de commensurabilité pour les électrons \uparrow qui peut se produire pour $m = \delta$ d'après le théorème YOA. Du point de vue de la bosonisation [263], il faut réintroduire des champs différents suivant l'indice de spin

$$\phi_{\sigma}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{c,\pm} + \sigma \phi_{s,\pm}). \quad (\text{V.5})$$

Dans ce cas, une interaction densité-densité de type Hubbard $U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ contiendra des termes

$$(c_{0\uparrow}^{\dagger} c_{\pi\uparrow} + c_{\pi\uparrow}^{\dagger} c_{0\uparrow})(c_{0\downarrow}^{\dagger} c_{\pi\downarrow} + c_{\pi\downarrow}^{\dagger} c_{0\downarrow}), \quad (\text{V.6})$$

qui, une fois bosonisés, introduit des termes de umklapp

$$\int dx \cos \left[2(k_{F,0}^{\uparrow} + k_{F,\pi}^{\uparrow})x - 2(\phi_{0,\uparrow} + \phi_{\pi,\uparrow}) \right]. \quad (\text{V.7})$$

Avec les définitions des champs précédentes et l'utilisation des Eqs. (V.2) et (V.3), ils se réécrivent

$$\int dx \cos \left[2\pi(n + \sigma m)x - 2\sqrt{2}\phi_{\sigma}^{\uparrow} \right]. \quad (\text{V.8})$$

On retrouve bien que ce terme peut être pertinent pour $m = \delta$, gelant alors le mode $\phi_{\uparrow}^{\dagger}$ et ouvrant un plateau d'aimantation. Une approche perturbative en U mais également dans la limite de couplage fort soutenait fortement la possibilité d'ouverture de ce gap [263].

3 Propriétés supraconductrices : phase FFLO et corrélations triplet émergentes

3.1 Corrélations supraconductrices

Après l'étude des propriétés magnétiques, nous abordons maintenant les propriétés associées à la charge avec notamment l'évolution de l'état supraconducteur sous fort champ magnétique. En présence de champ magnétique, la symétrie SU(2) du spin est brisée et il convient de calculer toutes les corrélations possibles dans les canaux triplet et singulet. On définit donc les opérateurs de création de paire $\Delta_{\sigma\sigma'}^\lambda(x)$:

$$\text{singulet : } \Delta_{\uparrow\downarrow}^s(x) = \sum_{\sigma} \sigma c_{r\sigma} c_{r'-\sigma} \quad (\text{V.9})$$

$$\text{triplet : } \begin{cases} \Delta_{\uparrow\downarrow}^t(x) = \sum_{\sigma} c_{r\sigma} c_{r'-\sigma} \\ \Delta_{\uparrow\uparrow}^t(x) = c_{r\uparrow} c_{r'\uparrow} \\ \Delta_{\downarrow\downarrow}^t(x) = c_{r\downarrow} c_{r'\downarrow} \end{cases} \quad (\text{V.10})$$

avec comme convention pour les positions sur les sites $r = (x, 1)$ and $r' = (x, 2)$ pour les paires sur les barreaux et $r = (x, p)$ et $r' = (x + 1, p)$ pour les paires sur le montant $p = 1, 2$. On a calculé numériquement $\langle \Delta_{\sigma\sigma'}^\lambda(x) \Delta_{\sigma\sigma'}^{\lambda\dagger}(0) \rangle$ dans tous les canaux λ . La figure V.11 montre la différence entre les résultats à aimantation nulle et les résultats à aimantation finie. On note B pour barreau (Rg pour rung sur la figure) et M pour montants (Lg pour leg sur la figure). Dans le canal singulet, les trois corrélations BB, MM et BM sont algébriques tandis que celles des canaux triplets sont exponentiellement décroissantes. Le signe des corrélations BM est différent de celui des MM et BB, traduisant le caractère d -wave anisotrope de la phase supraconductrice. Les corrélations d -wave survivent à plus fort champ avec des corrélations toujours significatives. On observe cependant qu'elles présentent des oscillations prononcées à un vecteur d'onde $q = \pi m$ qui est directement proportionnel à l'aimantation (voir figure V.12). La fermeture du gap de spin permet de voir naître des corrélations dans les canaux triplets $S^z = 0$ et $S^z = 1$ ce qui est une autre différence notable avec la phase supraconductrice à champ nul. Dans le secteur $S^z = 0$, seules les corrélations MM ont un comportement algébrique. Elles-aussi présentent des oscillations au vecteur d'onde $q = \pi m$ avec un exposant sensiblement égal à celui des corrélations singulet mais un facteur global beaucoup plus petit (de l'ordre de 100 fois moindre). Dans le secteur $S^z = 1$, seules les corrélations BB sont algébriques mais cette fois avec un exposant de décroissance plus grand et un vecteur à $q \sim \pi(1 - \delta)$, c'est-à-dire $2k_F$.

Ces oscillations sous champ magnétique trouvent une justification phénoménologique au travers du mécanisme de Fulde-Ferrel et Larkin-Ovchinnikov proposé indépendamment en 1964 [58–61]. Une justification qualitative de ce mécanisme est donnée sur la figure V.13. En donnant un vecteur d'onde fini aux paires de Cooper singulets, on peut gagner à la fois de l'énergie d'appariement et de l'énergie Zeeman. Une conséquence est que le paramètre d'ordre n'est plus uniforme et on a donc de la supraconductivité inhomogène avec, très qualitativement, des domaines d'électrons non appariés mais polarisés et des domaines avec appariement singulet. Grâce à ce mécanisme, il est possible de dépasser la limite de Pauli. Outre les discussions autour des composés organiques présentés au chapitre I [53], de telles phases semblent avoir été trouvées expérimentalement dans le composé à fermions lourds

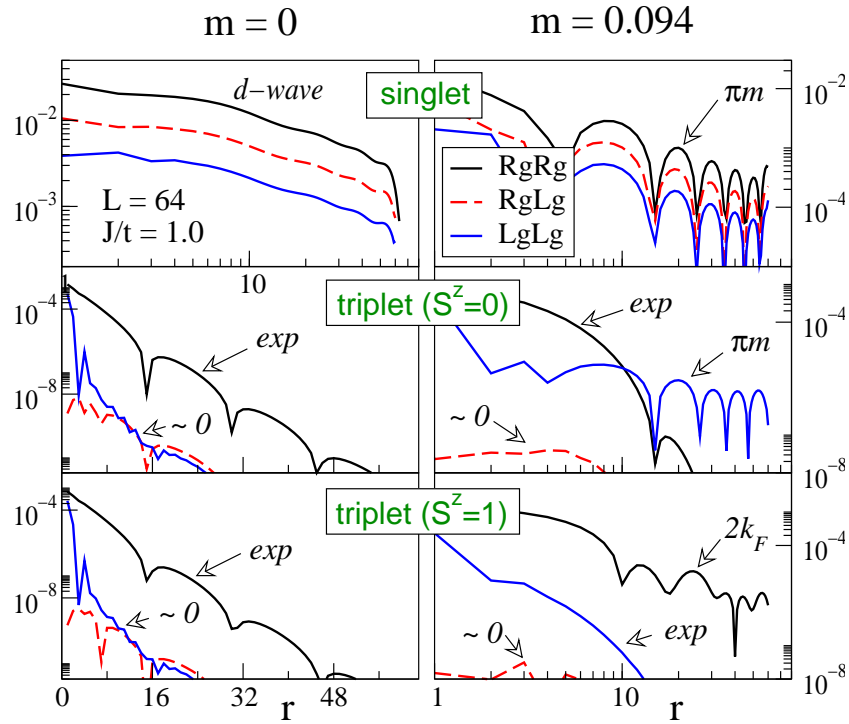


FIG. V.11: Valeur absolue des corrélations supraconductrices dans les différents canaux singulet et triplets à aimantation nulle et à aimantation finie. Extrait de la publication [3].

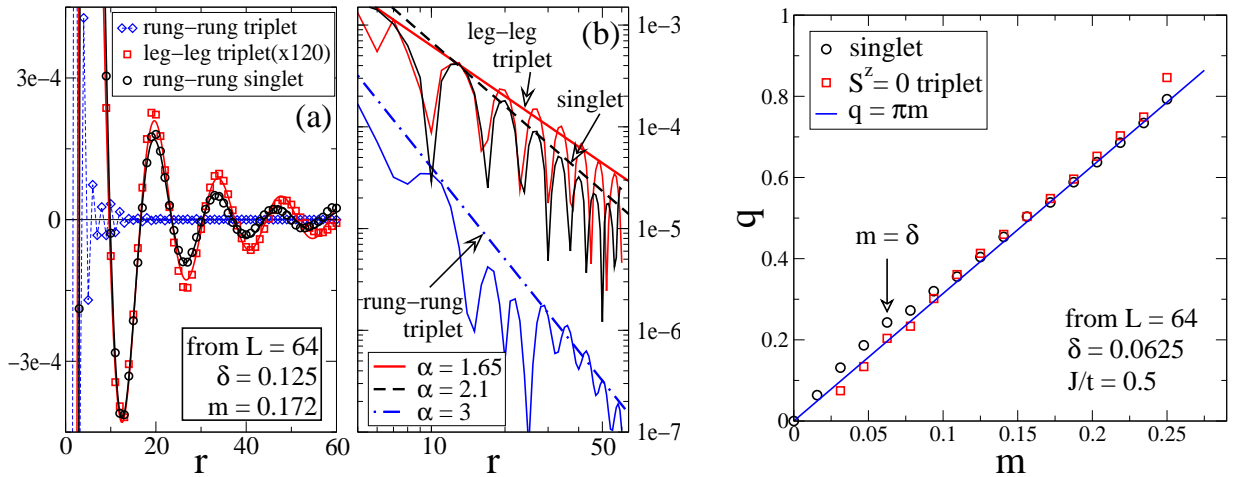


FIG. V.12: À gauche, corrélations supraconductrices dominantes à fort champ magnétique montrant les oscillations FFLO. Extrait de la publication [2]. À droite, le vecteur d'onde associé tiré du fit des corrélations vérifie $q = \pi m$. Extrait de la publication [3].

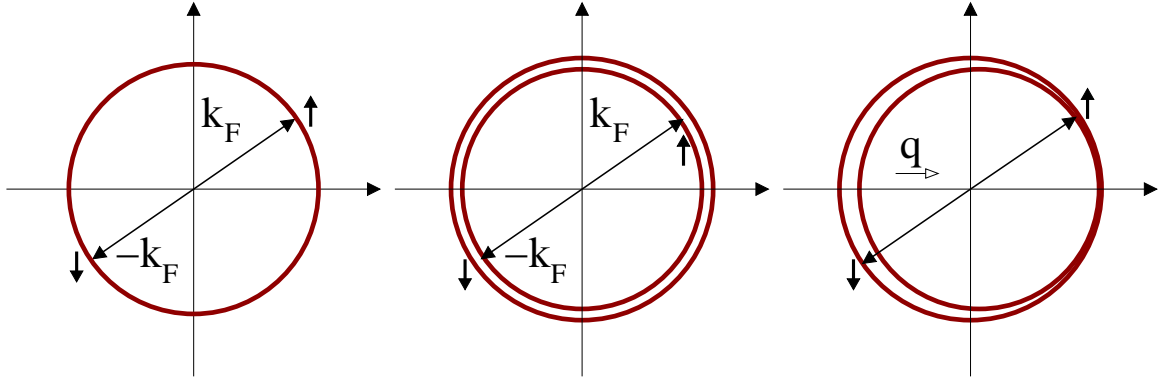


FIG. V.13: Mécanisme FFLO à deux dimensions pour une surface de Fermi isotrope. Les paires de Cooper singulet se forment entre les électrons (k_F, \uparrow) et $(-k_F, \downarrow)$. La largeur du trait représente en gros $k_B T_c$. Si l'aimantation est trop grande, l'écart entre surfaces de Fermi \uparrow et \downarrow est plus grand que $k_B T_c$: c'est le champ de Pauli. En traduisant une surface vers l'autre d'un vecteur $q \propto m$, on peut récupérer de l'énergie d'appariement. Cela donne des paires de Cooper avec une impulsion totale finie et permet de dépasser la limite de Pauli.

CeCoIn₅ [271]. Dans une chaîne de Hubbard, la différence entre les vecteurs de Fermi \uparrow et \downarrow est $q = \pi m$. Pour les échelles, on a le même résultat à partir de l'Eq. (V.3) si $k_{F,0}^\uparrow - k_{F,0}^\downarrow = k_{F,\pi}^\uparrow - k_{F,\pi}^\downarrow$, i.e. si l'on fait l'hypothèse que les vitesses de Fermi des modes 0 et π sont très proches. C'est numériquement très bien vérifié par fit des corrélations sous la forme $\cos(qx + \varphi)/x^\alpha$ (voir figure V.12). Enfin, la partie singulet est un mélange de paramètre d'ordre s -wave et d -wave qui peut être qualitativement vue comme une paire résonnante sur une plaquette. Les paires triplet peuvent être vues comme des paires p -wave le long des montants mais symétrique par rapport à l'inversion des chaînes.

3.2 Interprétation par la bosonisation

On peut calculer les paramètres d'ordre supraconducteurs (V.9) et (V.10) par bosonisation pour compléter les résultats obtenus numériquement. On a à aimantation finie huit points de Fermi comme montré sur la figure V.14.

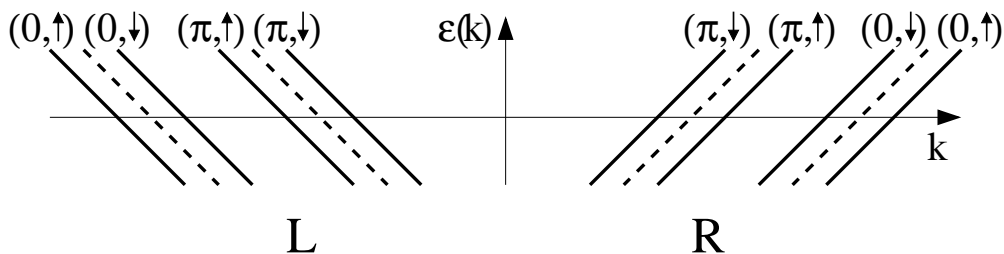


FIG. V.14: Linéarisation des bandes pour la bosonisation des échelles sous champ avec les 8 types de fermions. Les vitesses de Fermi des bandes 0 et π sont prises égales. Extrait de la publication [3].

Commençons par évaluer les contributions de vecteur d'onde le plus bas si bien qu'on néglige les termes du type $\psi_R\psi_R$ et $\psi_L\psi_L$. On note dans la suite $q = k_{F,0/\pi}^\uparrow - k_{F,0/\pi}^\downarrow = \pi m$. Les termes inter-bandes s'écrivent

$$\begin{aligned}\psi_{R,0,\sigma}\psi_{L,\pi,-\sigma} &\sim e^{i[\theta_{c+}-\phi_{c-}-\sigma(\phi_{s+}-\theta_{s-})]} \\ \psi_{R,0,\sigma}\psi_{L,\pi,\sigma} &\sim e^{i[\theta_{c+}-\phi_{c-}-\sigma(\theta_{s+}-\phi_{s-})]}\end{aligned}$$

et sont par conséquent tués par la présence de $e^{i\phi_{c-}}$. On peut donc limiter les calculs aux cas intra-bandes. Suivant les canaux d'appariement, on a respectivement :

Intra-bande singulet :

$$\begin{aligned}\sum_{\sigma} \sigma \psi_{R,0,\sigma}\psi_{L,0,-\sigma} &\sim \sum_{\sigma} \sigma e^{i[\theta_{c+}+\theta_{c-}-\sigma(\phi_{s+}+\phi_{s-})]}, \\ \sum_{\sigma} \sigma \psi_{R,\pi,\sigma}\psi_{L,\pi,-\sigma} &\sim \sum_{\sigma} \sigma e^{i[\theta_{c+}-\theta_{c-}-\sigma(\phi_{s+}-\phi_{s-})]}.\end{aligned}$$

Intra-bande triplet $S^z = 0$:

$$\begin{aligned}\sum_{\sigma} \psi_{R,0,\sigma}\psi_{L,0,-\sigma} &\sim \sum_{\sigma} e^{i[\theta_{c+}+\theta_{c-}-\sigma(\phi_{s+}+\phi_{s-})]}, \\ \sum_{\sigma} \psi_{R,\pi,\sigma}\psi_{L,\pi,-\sigma} &\sim \sum_{\sigma} e^{i[\theta_{c+}-\theta_{c-}-\sigma(\phi_{s+}-\phi_{s-})]}.\end{aligned}$$

Intra-bande triplet $S^z = 1$:

$$\begin{aligned}\psi_{R,0,\sigma}\psi_{L,0,\sigma} &\sim e^{i[\theta_{c+}+\theta_{c-}+\sigma(\theta_{s+}+\theta_{s-})]}, \\ \psi_{R,\pi,\sigma}\psi_{L,\pi,\sigma} &\sim e^{i[\theta_{c+}-\theta_{c-}+\sigma(\theta_{s+}-\theta_{s-})]}.\end{aligned}$$

Reste à exprimer les différents paramètres d'ordre en fonction de ces termes. Pour l'opérateur singulet sur un barreau, on a

$$\Delta_{\uparrow\downarrow}^s(x) \sim \sum_{\sigma} \frac{\sigma}{2} e^{i\sigma qx} (\psi_{R,0,\sigma}\psi_{L,0,-\sigma} - \psi_{R,\pi,\sigma}\psi_{L,\pi,-\sigma}), \quad (\text{V.11})$$

tandis que pour le triplet $S^z = 0$ sur un barreau, on a :

$$\Delta_{\uparrow\downarrow}^t(x) \sim \sum_{\sigma} \frac{1}{2} e^{i\sigma qx} (\psi_{R,\pi,\sigma}\psi_{L,0,-\sigma} - \psi_{R,0,-\sigma}\psi_{L,\pi,\sigma}). \quad (\text{V.12})$$

Ce dernier va donc être tué exponentiellement. Enfin, pour le triplet $S^z = 1$ sur un barreau, on trouve :

$$\Delta_{\uparrow\uparrow}^t(x) \sim \frac{1}{2} (\psi_{R,0,\uparrow}\psi_{L,0,\uparrow} - \psi_{R,\pi,\uparrow}\psi_{L,\pi,\uparrow}). \quad (\text{V.13})$$

Regardons maintenant les opérateurs sur les montants. Le singulet vaut :

$$\Delta_{\uparrow\downarrow}^s(x) \sim \sum_{\sigma} \frac{\sigma}{2} e^{i\sigma qx} \left[e^{-ik_{F,0}^{\sigma} a} \psi_{R,0,\sigma}\psi_{L,0,-\sigma} + (0 \rightarrow \pi) \right]. \quad (\text{V.14})$$

On note d'ailleurs que c'est le même résultat pour $p = 1, 2$ donc les corrélations MM avec les paires selon les même montants et entre montants différents auront le même signe, comme observé numériquement. Le triplet $S^z = 0$ s'écrit quant à lui :

$$\Delta_{\uparrow\downarrow}^t(x) \sim \sum_{\sigma} \frac{1}{2} e^{i\sigma qx} [\sin(k_{F,0}^{\sigma} a) \psi_{R,0,\sigma} \psi_{L,0,-\sigma} + (0 \rightarrow \pi)]. \quad (\text{V.15})$$

Enfin, le triplet $S^z = 1$ vaut :

$$\Delta_{\uparrow\uparrow}^t(x) \sim \frac{1}{2} \left[e^{-ik_{F,0}^{\uparrow} a} \psi_{R,0,\uparrow} \psi_{L,0,\uparrow} + (0 \rightarrow \pi) \right]. \quad (\text{V.16})$$

On peut maintenant discuter le comportement des différents paramètres d'ordre. Les triplets intra-bande $S^z = 1$ décroissent tous exponentiellement en raison de $\langle \phi_{s-} \rangle = \pi/2$. Par conséquent, les opérateurs triplet $S^z = 1$ sur les barreaux et sur les montants ont des termes à petits moments exponentiels. La possibilité de termes à $2k_F$ sera discutée ci-après. D'autre part, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \psi_{R,0,\sigma} \psi_{L,0,-\sigma} &\sim e^{-i\frac{\pi}{2}\sigma} e^{i(\theta_{c+} - \sigma\phi_{s+})}, \\ \psi_{R,\pi,\sigma} \psi_{L,\pi,-\sigma} &\sim e^{i\frac{\pi}{2}\sigma} e^{i(\theta_{c+} - \sigma\phi_{s+})}. \end{aligned}$$

Comme $k_{F,0} \neq k_{F,\pi}$, le triplet $S^z = 0$ sur les montants est algébrique. Il a de plus le même exposant que les opérateurs singulets $\frac{1}{2}(K_{c+}^{-1} + K_{s+})$. Cette exposant est plus grand que celui à $m = 0$ en raison des fluctuations du mode de spin symétrique. Enfin, les corrélations ont bien comme vecteur d'onde $q = \pi m$ qui est la signature de la phase FFLO.

On peut expliquer les oscillations BB triplet $S^z = 1$ en regardant les termes apparaissant à $2k_F$:

$$\psi_{1,\sigma} \psi_{2,\sigma} \sim -2e^{i(k_{F,0}^{\sigma} + k_{F,\pi}^{\sigma})x} \psi_{R,0,\sigma} \psi_{R,\pi,\sigma} + \dots$$

La forme bosonisée s'écrit

$$\Delta_{\sigma\sigma,2k_F}^t(x) \sim e^{i(k_{F,0}^{\sigma} + k_{F,\pi}^{\sigma})x} e^{i[\theta_{c+} - \phi_{c+} + \sigma(\theta_{s+} - \phi_{s+})]}.$$

On voit donc qu'elles sont algébriques avec un exposant

$$\frac{1}{2} (K_{c+} + K_{c+}^{-1} + K_{s+} + K_{s+}^{-1}),$$

et, d'après les équations (V.2) et (V.3), sont associées au vecteur d'onde $k_{F,0}^{\sigma} + k_{F,\pi}^{\sigma} = \pi(n + \sigma m)$. L'exposant est toujours supérieur à ceux des canaux singulet et triplet $S^z = 0$ comme observé numériquement.

Compte-tenu de la compétition avec les fluctuations d'onde de densité de charge. Il est important d'évaluer ces dernières corrélations. D'abord, les CDW à $2k_F$ dont le paramètre d'ordre est la densité locale $n(x)$. La forme bosonisée contient des termes

$$\psi_{r,0\sigma}^{\dagger} \psi_{r,\pi\sigma} \sim e^{i[\phi_{c-} + \sigma\phi_{s-} - r(\theta_{c-} + \sigma\theta_{s-})]}$$

avec $r = \pm$ for R, L associés au vecteur d'onde $k_{F,\pi}^{\sigma} - k_{F,0}^{\sigma}$. Ces termes sont exponentiels à cause de $e^{i\phi_{c-}}$. On trouve également des termes

$$\psi_{R,0\sigma}^{\dagger} \psi_{L,\pi\sigma} \sim e^{i[\phi_{c+} - \theta_{c-} + \sigma(\phi_{s+} - \theta_{s-})]}$$

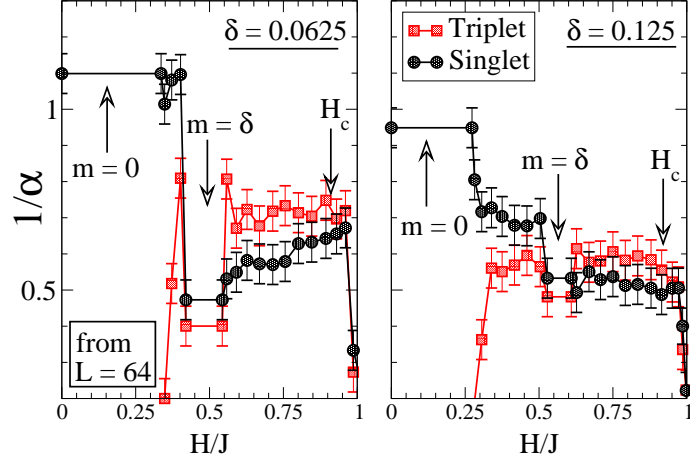


FIG. V.15: Inverse des exposants α^s et α^t en fonction du champ magnétique. Les corrélations triplet émergent à fort champ. Une nette discontinuité (augmentation) des exposants est trouvée dans le phase plateau $m = \delta$. Extrait de la publication [2].

à $2k_F$. Eux sont tués par $e^{i\theta_{s-}}$. Il n'y a donc finalement pas d'ondes de densité de charge à $2k_F$ induite par le champ magnétique.

En revanche, l'opérateur à $4k_F$ qui est $n^2(x)$ est algébrique à aimantation nulle. On trouve des termes du type

$$\psi_{R,0\sigma}^\dagger \psi_{L,0\sigma} \psi_{R,\pi\sigma}^\dagger \psi_{L,\pi\sigma} \sim e^{i2[\phi_{c+} + \sigma\phi_{s+}]}$$

à $4k_F$ associé au vecteur d'onde $2\pi(n+m)$ et algébrique, avec un exposant $2(K_{c+} + K_{s+})$. D'autre part, des termes

$$\psi_{R,0\sigma}^\dagger \psi_{L,0\sigma} \psi_{R,\pi-\sigma}^\dagger \psi_{L,\pi-\sigma} \sim e^{i2[\phi_{c+} + \sigma\phi_{s-}]}$$

associés au vecteur d'onde $2(k_{F,0}^\sigma + k_{F,\pi}^{-\sigma})$ sont présents et ont un exposant plus petit $2K_{c+}$ qui ne fait pas intervenir K_{s+} . Partant d'une phase supraconductrice, ces corrélations pourraient devenir dominantes sous champ magnétique suivant les valeurs de K_{c+} et K_{s+} .

3.3 Évaluation des exposants triplet $S^z = 0$ et singulet à fort champ

On discute maintenant l'évolution des exposants des corrélations supraconductrices dominantes en fonction du champ magnétique. Pour cela, on a fitté les courbes BB singulet et MM triplet $S^z = 0$ par la formule $A \cos(qr + \varphi)/r^\alpha$ pour en tirer respectivement les exposants α^s et α^t dans ces deux canaux. Les résultats pour un nombre d'états $M = 1000$ et une taille L fixés sont donnés sur la figure V.15. À faible champ, seules les corrélations singulet sont présentes en raison du gap de spin. À aimantation finie, des corrélations triplet émergent avec un exposant qui diminue (fluctuations de plus en plus quasi-ordonnées). Au-delà du champ critique, on observe une forte augmentation de l'exposant compatible avec une transition supraconducteur-métallique. Enfin, on observe une nette augmentation des deux exposants de la supraconductivité dans la phase plateau $m = \delta$. Ces deux derniers points seront plus précisément discutés dans la section 4.

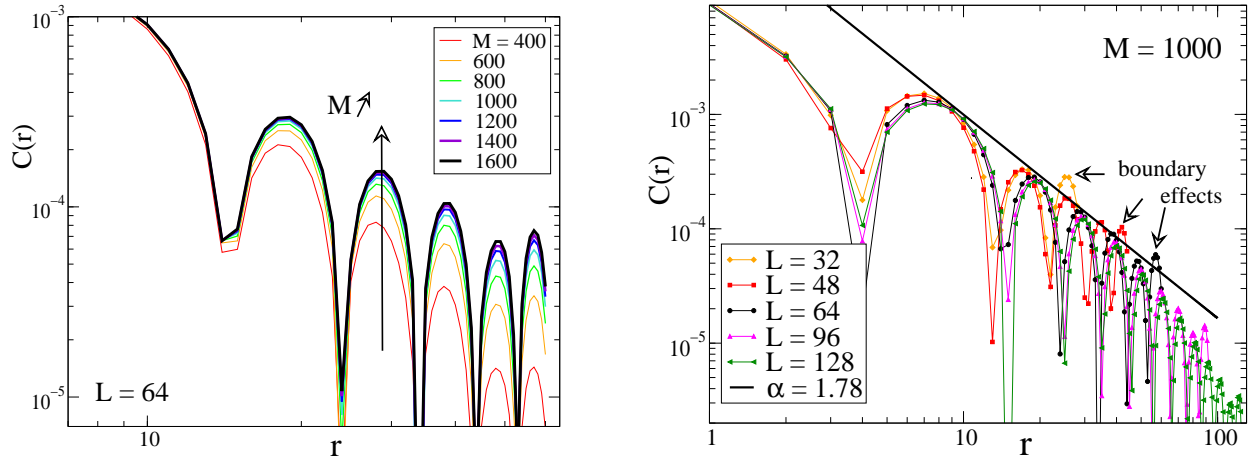


FIG. V.16: À gauche, évolution des fonctions de corrélation à $L = 64$ fixée en augmentant le nombre d'états gardés en DMRG M pour les corrélations singulet avec $m = 0.094$, $\delta = 0.063$ et $J/t = 0.5$, c'est-à-dire au dessus du plateau $m = \delta$ et en dessous du champ critique supraconducteur H_c . Extrait de la publication [3]. À droite, convergence des corrélations à $M = 1000$ fixée en fonction de la taille L . Plus le système est grand, plus il faut un nombre d'états gardés important. Extrait de la publication [3].

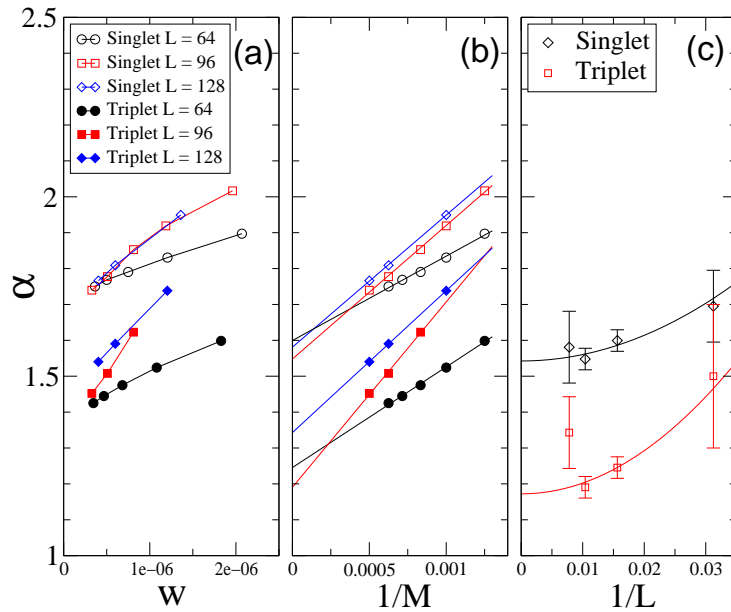


FIG. V.17: Tentative d'extrapolation des exposants obtenus par fit des corrélations en fonction du poids rejeté w (a) et de l'inverse du nombre d'état gardés M (b) pour différentes tailles L . Les extrapolations des résultats de (b) sont tracés en fonction $1/L$ (c). Les barres d'erreur sont importantes lorsque L est trop petite ($L = 32$) ou M est trop petit ($L = 128$). Les paramètres sont les mêmes que ceux de la figure V.16. Extrait de la publication [3].

Comme la bosonisation prédit une égalité des exposants α^s et α^t , on a essayé de pousser un peu plus le numérique pour voir si l'on pouvait s'en rapprocher. D'autre part, il est connu que le DMRG sous-estime les corrélations à un nombre d'états M conservés. On a donc regardé l'évolution des exposants en fonction de M pour avoir une estimation plus réaliste de ces derniers. Ainsi, on a calculé les corrélations pour des M allant de 800 à 2000 sur des tailles $L = 32, 64, 96$ et 128 . Les remplissages sont fixés à $\delta = 1/16$ et $m = 3/32$. On appelle $\alpha(M, L)$ l'exposant obtenu par fit à M et L fixés. On a d'abord extrapolé α dans la limite $M \rightarrow \infty$ pour avoir une bonne estimation de $\alpha(L)$. Puis, on a fait une extrapolation de taille finie en fonction de L . La figure V.16 montre que $\alpha(M)$ décroît avec M approximativement comme $1/M$ (voir figure V.17 (b)). Plus le système est grand plus il faut un M et un nombre de sweeps grand pour une convergence équivalente (voir sur la figure V.16 la différence entre $L = 128$ et $L = 96$). La convergence en fonction du poids rejeté a un comportement similaire (cf figure V.17 (a)). Sur la figure figure V.17 (c), $M = 2000$ est semble-t-il trop petit pour $L = 128$, et pour la plus petite taille ($L = 32$), il est difficile d'extraire α car les oscillations ne sont pas assez bien résolues, la longueur d'onde des oscillations étant comparable à la taille L . Malgré que ces deux points ne soient pas très fiables, les extrapolations de taille finie donnent $\alpha^s = 1.54 \pm 0.15$ plus grand que $\alpha^t = 1.17 \pm 0.15$ mais la différence entre les deux n'est pas si marquée en regard des incertitudes numériques. Cependant, on trouve des exposants plus petits que sur un système fini ce qui montre la tendance à diverger de ces corrélations. Numériquement, sur un système de taille finie, les contributions des termes sous-dominants algébriques s'additionnent au signal, si bien qu'il faudrait un système très grand pour avoir seulement le terme dominant. Cela est d'autant plus vrai pour les corrélations triplet dont le terme dominant a une amplitude petite. Les corrélations de densité de charge sont difficiles à évaluer dans ces systèmes et les résultats pour ces corrélations dans les échelles ne sont pas toujours très convainquant et nous n'avons pu en tirer des informations quant à la compétition CDW-SC.

3.4 Évaluation du paramètre de Luttinger K_{s+} en fonction du champ

On cherche maintenant à évaluer le comportement du mode de spin antisymétrique apparaissant à aimantation finie en calculant numériquement le paramètre de Luttinger K_{s+} associé. Afin d'y avoir un accès direct au travers d'une fonction de corrélation, on remarque que l'opérateur créant un triplet sur un barreau $S_2^+(x)S_1^+(x)$ contient des termes

$$\psi_{L,0\uparrow}^\dagger \psi_{L,0\downarrow} \psi_{R,\pi\uparrow}^\dagger \psi_{R,\pi\downarrow} \sim e^{-i2[\phi_{s-} + \theta_{s+}]} . \quad (\text{V.17})$$

donnant une contribution algébrique d'exposant $2K_{s+}^{-1}$, indépendante de K_{c+} , puisque $\langle \phi_{s-} \rangle = \pi/2$. D'autre part, le vecteur d'onde associé est $(k_{F,0}^\uparrow - k_{F,0}^\downarrow) - (k_{F,\pi}^\uparrow - k_{F,\pi}^\downarrow) \sim 0$ si la différence des vitesses de Fermi entre les bandes 0 et π est négligeable, une hypothèse déjà formulée précédemment et qui était justifiée par la vérification de la loi $q = \pi m$ numériquement. Comme on a un opérateur à quatre corps, d'autres termes pourraient avoir des contributions avec un exposant plus petit car $K_{s+} < 1$. Ainsi, on pourrait avoir des termes avec $2K_{s+}$ ou $\frac{1}{2}[K_{s+} + K_{s+}^{-1}]$. Le premier terme proviendrait de champs $2[\phi_{s+} \pm \phi_{s-}]$ ou $2[\phi_{s+} + \sigma\theta_{c-}]$ dont on peut vérifier qu'ils ne peuvent intervenir dans la décomposition de $S_2^+ S_1^+$. Pour les autres termes, on peut voir que le champs $\phi_{s+} \pm \theta_{s+} \pm \theta_{c-} \pm \phi_{s-}$ ne peuvent être décomposés en termes de fermions droits et gauches avec des préfacteurs \pm . Avec ce

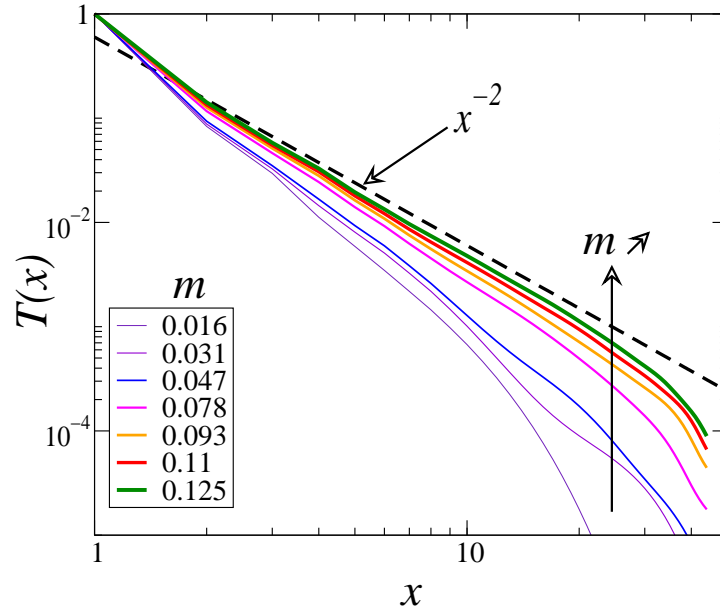


FIG. V.18: Corrélations $T(x) = \langle S_2^+(x)S_1^+(x)S_2^-(0)S_1^-(0) \rangle$ normalisées par leur valeur en $x = 1$ pour différentes aimantations avec $J/t = 0.75$ et $\delta = 0.063$. L'exposant de décroissance est $2K_{s+}^{-1}$ ce qui donne un accès direct à K_{s+} . Les corrélations ont été calculées sur un système de taille $L = 64$ en choisissant $M = 1200$. Extrait de la publication [3].

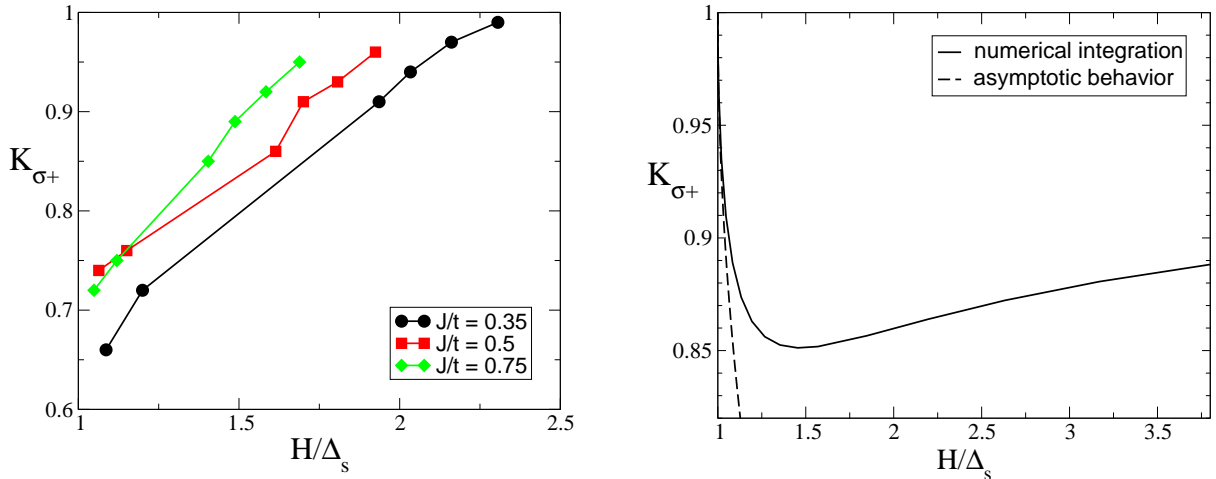


FIG. V.19: À gauche, K_{s+} déduit des résultats de la figure V.18 en fonction de H/Δ_s . Extrait de la publication [3]. À droite, résultat du modèle $SO(4)$ des échelles dopées sous champ magnétique.

raisonnement à l'envers, on se convainc que les termes à $q \sim 0$ et d'exposant $2K_{s+}^{-1}$ seront ceux qui dominent les corrélations. C'est bien ce qu'on trouve numériquement en calculant les corrélations $\langle S_2^+(x)S_1^+(x)S_2^-(0)S_1^-(0) \rangle$ comme montré sur la figure V.18. La décroissance est bien algébrique avec un exposant plus grand que 2 et un vecteur d'onde quasi-nul. On a tracé la courbe en fonction de H/Δ_s , où Δ_s est le gap de spin du système de taille finie. La figure V.19 montre le comportement de K_{s+} en fonction du champ magnétique. On trouve bien $K_{s+} < 1$, et qui augmente avec le champ jusque vers une valeur limite $K_{s+} = 1$.

Ces résultats sont à mettre en relation avec ceux des modèles intégrables pour les échelles de spin dopées. L'exposant K_{s+} a en effet été calculé par ces méthodes dans le cadre du modèle SO(8) des échelles sous champ au demi-remplissage [272]. Lorsque les échelles sont dopées, le modèle a une réduction de symétrie vers un modèle SO(6) [176]. En rajoutant le champ magnétique, Edmond Orignac a montré [273] qu'on avait alors une symétrie SO(4) et a calculé le comportement de K_{s+} en fonction du champ (voir figure V.19). Bien que le comportement soit similaire, mais avec une diminution à faible champ avant d'augmenter, la comparaison quantitative n'est pas satisfaisante. Une des raisons possibles est que la validité du modèle SO(6) se situe à dopage fini sur le modèle de Hubbard dans la limite $U/t \ll 1$. Il faut d'abord trouver les paramètres du modèle t-J ou Hubbard tels que certaines observables comme le rapport de l'énergie d'appariement et du gap de spin justifie qu'on est bien dans le régime SO(6). Pour les valeurs du modèle t-J de la figure V.19, ce régime n'est pas observé [273]. Plus de travail est également nécessaire pour obtenir une valeur de K_s plus fiable numériquement (M plus grand, utilisant des résultats de la théorie conforme).

4 Diagrammes de phases

4.1 Énergie d'appariement et dépassement de la limite de Pauli

Afin de compléter la compréhension de l'évolution du fondamental avec le champ magnétique, on a calculé les gaps de charge à une particule Δ_p en utilisant la définition

$$\Delta_p(S^z) = E(n_h - 1, S^z + 1/2) + E(n_h - 1, S^z - 1/2) - E(n_h, S^z) - E(n_h - 2, S^z), \quad (\text{V.18})$$

Le gap à une particule, ou énergie d'appariement, est tracé en fonction du champ magnétique sur la figure V.20. On observe une diminution d'énergie avec le champ magnétique. Dès que le gap de spin se ferme, on observe une discontinuité de Δ_p avec l'aimantation. Cette discontinuité est similaire à la discontinuité du gap de spin lorsqu'on dope le système. En dégelant un mode, les énergies caractéristiques diminuent. Dans les modèles intégrables, des discontinuités similaires existent lors de la réduction de symétrie SO(8)→SO(6) pour le gap de spin [175] et SO(6)→SO(4) pour l'énergie d'appariement. Cependant, l'énergie d'appariement survit à la fermeture du gap de spin et même au-delà du plateau jusqu'à un champ critique H_c . C'est également vers ce champ critique que les corrélations supraconductrices diminuent fortement. On a calculé ce champ critique en fonction du dopage en trou δ en évaluant l'aimantation pour laquelle $\Delta_p(S^z) \sim 0$ puis en déduisant le champ magnétique correspondant à cette aimantation.

On peut également calculer numériquement le champ théorique de Pauli H_p pour le comparer au champ critique obtenu ci-dessus. La limite de Pauli est *définie* en égalant l'énergie

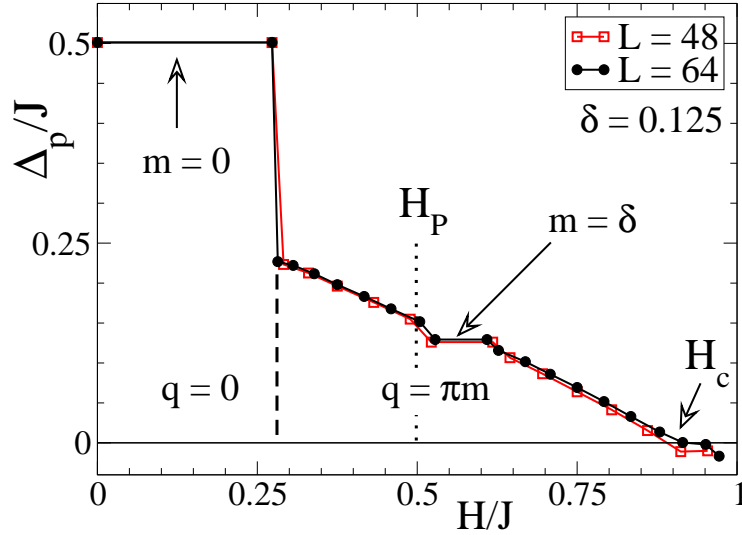


FIG. V.20: À gauche, énergie d'appariement Δ_p en fonction du champ magnétique pour $J/t = 0.5$ montrant un large dépassement du champ de Pauli H_p . Extrait de la publication [2].

de condensation à $T = 0$ et $H = 0$ avec l'énergie de deux électrons issus d'une paire de Cooper brisée et stabilisés par effet Zeeman [274]. Numériquement, l'énergie de condensation à champ nul d'une paire de Cooper n'est autre que $\Delta_p(S^z = 0)$. L'énergie totale de deux électrons non appariés mais polarisés selon le champ magnétique est $2E(n_h - 1, +1/2) - 2 \times \frac{1}{2} \times H$, qu'il faut comparer à l'énergie totale du système avec appariement $E(n_h, 0) + E(n_h - 2, 0)$. D'après la définition de l'Eq. (V.18) avec $S^z = 0$, on trouve que le champ de Pauli vaut simplement $H_p = \Delta_p(S^z = 0)$. Si l'on reporte ce champ sur la courbe V.20, on voit que le champ critique supraconducteur est significativement plus grand que la limite de Pauli. Ce qu'il se passe dans le système est que la transition vers l'état FFLO modifie la nature du fondamental de sorte qu'il puisse excéder la limite de Pauli. Un point important à souligner est que ces calculs sur une échelle isolée sont exacts et sans approximations contrairement aux méthodes champ-moyen. On ne peut cependant pas évaluer exactement les températures et champs critiques de ce que serait un ensemble d'échelles couplées.

Du point de vue du remplissage des bandes, ce champ critique supraconducteur H_c a une interprétation simple : il correspond au vidage de la bande (π, \downarrow) . Du point de vue de la bosonisation, il ne reste alors que six types de fermions et cela change complètement le comportement du système. Pour les électrons \downarrow , on peut ne conserver au premier ordre que les contributions de la bande $(0, \downarrow)$, la bande (π, \downarrow) étant vide, si bien que l'on peut écrire

$$c_{n,p,\downarrow}^\dagger c_{n,p,\downarrow} \rightarrow \frac{1}{2} c_{n,0,\downarrow}^\dagger c_{n,0,\downarrow}. \quad (\text{V.19})$$

L'interaction sur site de Hubbard se réduit alors à

$$\frac{U}{2} \sum_n n_{i,0,\downarrow} (n_{i,0,\uparrow} + n_{i,\pi,\uparrow}). \quad (\text{V.20})$$

En l'absence d'effet de commensurabilité entre les bandes, il ne reste dans l'hamiltonien que des termes de diffusion vers l'avant qui ne font que renormaliser les paramètres de Luttinger.

Channel	terms	dimension	q
$S^z = 1$	$\psi_{R0\uparrow}\psi_{L0\uparrow}$	$\frac{1}{4K_1} + \frac{1}{4K_2} + \frac{1}{2K_3}$	0
	$\psi_{R\pi\uparrow}\psi_{L\pi\uparrow}$	$\frac{1}{4K_1} + \frac{1}{4K_2} + \frac{1}{2K_3}$	0
	$\psi_{R0\downarrow}\psi_{L0\downarrow}$	$\frac{1}{2K_1} + \frac{1}{2K_2}$	0
	$\psi_{R\pi\uparrow}\psi_{L0\uparrow}$	$\frac{1}{4K_1} + \frac{1}{4K_2} + \frac{K_3}{2}$	$k_{F\pi}^\uparrow - k_{F0}^\uparrow$
$S^z = 0$	$\psi_{R0\uparrow}\psi_{L0\downarrow}$	$\frac{3+\sqrt{8}}{16}(K_1^{-1} + K_2) + \frac{3-\sqrt{8}}{16}(K_2^{-1} + K_1) + \frac{1}{8}(K_3 + K_3^{-1})$	$k_{F0}^\uparrow - k_{F0}^\downarrow$
	$\psi_{R\pi\uparrow}\psi_{L0\downarrow}$	$\frac{3+\sqrt{8}}{16}(K_1^{-1} + K_2) + \frac{3-\sqrt{8}}{16}(K_2^{-1} + K_1) + \frac{1}{8}(K_3 + K_3^{-1})$	$k_{F\pi}^\uparrow - k_{F0}^\downarrow$

TAB. V.1: Dimension (la moitié de l'exposant des corrélations) des paramètres d'ordre supraconducteur dans le modèle à trois bandes au-dessus du champ supraconducteur critique H_c . Extrait de la publication [3].

Order	terms	dimension	q
SDW^z/CDW	$\psi_{R0\uparrow}^\dagger\psi_{L0\uparrow}$	$\frac{K_1}{4} + \frac{K_2}{4} + \frac{K_3}{2}$	$2k_{F0}^\uparrow$
	$\psi_{R\pi\uparrow}^\dagger\psi_{L\pi\uparrow}$	$\frac{K_1}{4} + \frac{K_2}{4} + \frac{K_3}{2}$	$2k_{F\pi}^\uparrow$
	$\psi_{R0\downarrow}^\dagger\psi_{L0\downarrow}$	$\frac{K_1}{2} + \frac{K_2}{2}$	$2k_{F0}^\downarrow$
	$\psi_{R\pi\uparrow}^\dagger\psi_{L0\uparrow}$	$\frac{K_1}{4} + \frac{K_2}{4} + \frac{1}{2K_3}$	$k_{F\pi}^\uparrow + k_{F0}^\uparrow$
$SDW^{x,y}$	$\psi_{R0\uparrow}^\dagger\psi_{L0\downarrow}$	$\frac{3-\sqrt{8}}{16}(K_1^{-1} + K_2) + \frac{3+\sqrt{8}}{16}(K_2^{-1} + K_1) + \frac{1}{8}(K_3 + K_3^{-1})$	$k_{F0}^\uparrow + k_{F0}^\downarrow$
	$\psi_{R\pi\uparrow}^\dagger\psi_{L0\downarrow}$	$\frac{3-\sqrt{8}}{16}(K_1^{-1} + K_2) + \frac{3+\sqrt{8}}{16}(K_2^{-1} + K_1) + \frac{1}{8}(K_3 + K_3^{-1})$	$k_{F\pi}^\uparrow + k_{F0}^\downarrow$

TAB. V.2: Même chose que dans le tableau V.1 mais pour les fluctuations CDW et SDW. Extrait de la publication [3].

Ainsi, les trois secteurs n'ont pas de gap et l'hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H} = \sum_{\nu \in \{(0,\uparrow), (0,\downarrow), (\pi,\uparrow)\}} \int \frac{dx}{2\pi} v_{F,\nu} [(\pi\Pi_\nu)^2 + (\partial_x\phi_\nu)^2] + \frac{U_\alpha}{2\pi^2} \int dx \partial_x \phi_{0,\downarrow} (\partial_x \phi_{0,\uparrow} + \partial_x \phi_{\pi,\uparrow}) \quad (\text{V.21})$$

Cet hamiltonien peut être diagonalisé exactement. Dans le cas où les vitesses de Fermi sont toutes différentes, il faut faire les transformations $\Pi_\nu \rightarrow \sqrt{u/v_{F,\nu}}\Pi_\nu$ et $\phi_\nu \rightarrow \phi_\nu/\sqrt{u/v_{F,\nu}}$ avec u une constante ayant la dimension d'une vitesse puis diagonaliser la matrice :

$$\begin{pmatrix} v_{F,0\uparrow}^2 & \frac{U_\alpha}{4\pi^2} \sqrt{v_{F,0\uparrow}v_{F,0\downarrow}} & 0 \\ \frac{U_\alpha}{4\pi^2} \sqrt{v_{F,0\uparrow}v_{F,0\downarrow}} & v_{F,0\downarrow}^2 & \frac{U_\alpha}{4\pi^2} \sqrt{v_{F,\pi\uparrow}v_{F,0\downarrow}} \\ 0 & \frac{U_\alpha}{4\pi^2} \sqrt{v_{F,0\uparrow}v_{F,0\downarrow}} & v_{F,\pi\uparrow}^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{V.22})$$

et enfin refaire les transformations inverses pour obtenir les nouveaux paramètres de Luttinger du modèle. Pour simplifier, on donne le résultat lorsque les vitesses de Fermi sont identiques. Alors, la transformation

$$\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{0,\downarrow} \\ \phi_{0\uparrow} \\ \phi_{\pi\uparrow} \end{pmatrix} \quad (\text{V.23})$$

diagonalise le terme d'interaction et on obtient les paramètres de Luttinger :

$$u_1 K_1 = u_2 K_2 = u_3 K_3 = v_F \quad (\text{V.24})$$

$$\frac{u_1}{K_1} = v_F + \frac{U\alpha}{2\pi^2\sqrt{2}} \quad (\text{V.25})$$

$$\frac{u_2}{K_2} = v_F - \frac{U\alpha}{2\pi^2\sqrt{2}} \quad (\text{V.26})$$

$$\frac{u_3}{K_3} = v_F \quad (\text{V.27})$$

Les opérateurs fermioniques s'écrivent alors en fonction des nouveaux champs

$$\psi_{r,0,\uparrow} = \frac{\eta_{r,0,\uparrow}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i\left[\frac{1}{2}(\theta_1-r\phi_1) - \frac{1}{2}(\theta_2-r\phi_2) + \frac{1}{\sqrt{2}}(\theta_3-r\phi_3)\right]}$$

$$\psi_{r,\pi,\uparrow} = \frac{\eta_{r,\pi,\uparrow}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i\left[\frac{1}{2}(\theta_1-r\phi_1) - \frac{1}{2}(\theta_2-r\phi_2) - \frac{1}{\sqrt{2}}(\theta_3-r\phi_3)\right]}$$

$$\psi_{r,0,\downarrow} = \frac{\eta_{r,0,\downarrow}}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i\frac{\sqrt{2}}{2}[(\theta_1-r\phi_1) + (\theta_2-r\phi_2)]}$$

En utilisant ces expressions, les exposants critiques des différents paramètres d'ordre sont donnés dans les tableaux V.1 et V.2. Au-delà de H_c , le système entre dans une phase liquide de Luttinger de type métallique d'après l'annulation de l'énergie appariement obtenue numériquement. Bien que des fluctuations supraconductrices existent, elles ne sont plus dominantes. Le tableau V.1 justifie que l'exposant des corrélations augmente significativement.

4.2 Nature de la phase plateau $m = \delta$

Intéressons-nous maintenant à la nature de la phase dans le plateau à $m = \delta$. Pour cela, nous avons calculé le gap à deux particules Δ_{2p} défini à aimantation finie par

$$\Delta_{2p}(n_h, S^z) = E(n_h + 2, S^z) + E(n_h - 2, S^z) - 2E(n_h, S^z). \quad (\text{V.28})$$

On observe sur la figure V.21 que ce gap tend vers zéro pour toute valeur de l'aimantation hormis $m = \delta$ pour la laquelle on voit une anomalie sur les systèmes de taille finie et l'extrapolation semble donner un gap très petit. Une valeur finie de Δ_{2p} à la limite thermodynamique se comprend en fait assez bien compte-tenu de l'existence d'un plateau à $m = \delta$, et de la définition (V.28), c'est-à-dire sur la base d'hypothèses très générales. En effet, on peut montrer que ce gap égale exactement la largeur du plateau à la limite thermodynamique. Qualitativement, cela signifie simplement qu'enlever une paire de trous dans le système avec $m = \delta$, qui a un nombre de paires de trou égal au nombre de magnons, est énergétiquement équivalent à rajouter un magnon dans le système qui a une densité δ' légèrement plus petite et qui vérifie $m' = \delta'$. Il faut ainsi payer le gap du plateau $m' = \delta'$ et ce dernier est égal à celui du plateau $m = \delta$ dans la limite thermodynamique (voir figure V.21). Plus précisément, rappelons que le champ magnétique est donné sur un système de taille finie par $H(n_h, S^z) = E(n_h, S^z + 1) - E(n_h, S^z)$. On peut écrire le gap à deux particules sur un

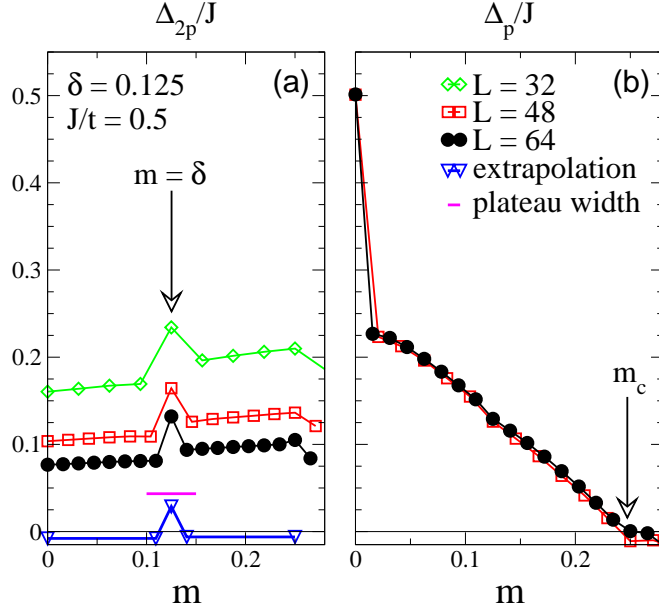


FIG. V.21: Gaps à deux et une particule(s) (énergie d'appariement) en fonction de l'aimantation. Extrait de la publication [3].

système de taille finie de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 \Delta_{2p}(n_h, S^z) &= \Delta_{2p}(n_h, S^z - 1) \\
 &+ H(n_h - 2, S^z - 1) - H(n_h - 2, S^z - 2) \\
 &+ H(n_h + 2, (S^z + 1) - 1) + H(n_h - 2, (S^z - 1) - 1) - 2H(n_h, S^z - 1) \\
 &+ H(n_h + 2, S^z - 1) - H(n_h + 2, S^z).
 \end{aligned} \tag{V.29}$$

Regardons cette expression dans le cas $m = \delta$, c'est-à-dire $S^z = n_h/2$. Le premier terme tend vers zéro à la limite thermodynamique car il s'agit du gap à deux particules dans la phase supraconductrice du fait que $m < \delta$. Le second terme est égal à la largeur du plateau pour $\delta' \lesssim \delta$. Comme le plateau dépend continûment du dopage, cette dernière sera égale à la largeur du plateau en $m = \delta$ à la limite thermodynamique. Le troisième terme correspond à la dérivée seconde du champ critique $\times (dn_h/L)^2$ pour lequel on entre dans la phase plateau $m = \delta$. Cette courbe étant continue, on s'attend à ce que cette contribution tende vers zéro dans la limite thermodynamique. Le dernier terme correspond à la dérivée du champ par rapport à l'aimantation pour une aimantation $m < \delta$ pour laquelle cette courbe est continue. Ce dernier terme doit également tendre vers zéro à la limite thermodynamique. Il y a donc égalité exacte entre le gap à deux particules et la largeur du plateau $m = \delta$ lorsque $L \rightarrow \infty$. Numériquement, la figure V.21 montre qu'on a des résultats très proches entre ces deux quantités après extrapolation de taille finie. L'observation numérique de ce résultat est surprenante compte-tenu de l'ordre de grandeur des gaps trouvés après extrapolations et des nombreux termes dans (V.29) contribuant aux effets de taille finie. Probablement, ces derniers se compensent suffisamment pour que la contribution la plus significative vienne de la largeur du plateau.

On a donc un gap de spin et un gap de charge à 1 et 2 particules dans le système. On serait tenté de conclure que le système est complètement gappé dans tous les secteurs. Cependant,

d'après le théorème YOA, seuls les électrons \uparrow sont gappés tandis qu'aucune condition de commensurabilité n'est satisfaite pour les électrons \downarrow puisque $\mathcal{N}_\downarrow \notin \mathbb{Q}$. Le secteur \downarrow est donc non gappé. Du point de vue de la bosonisation, cela se traduit par le fait que le champ ϕ_\downarrow^+ défini à l'Eq. (V.5) n'est pas gelé dans la phase plateau. On s'attend donc à un système métallique dans la phase plateau $m = \delta$. On pourrait en effet construire des fonctions de corrélations algébriques faisant intervenir le paramètre de Luttinger $K_{\downarrow+}$. De façon remarquable, au-delà du plateau, on s'attend donc à une phase supraconductrice réentrant avec le champ magnétique. Il y a d'ailleurs une certaine analogie avec un mécanisme par effet Zeeman dans les systèmes à deux couches proposé par Buzdin *et al.* [275].

4.3 Diagramme de phase générique du modèle t-J

Après avoir étudié les propriétés magnétiques et supraconductrices sous champ magnétique, on peut tracer les diagrammes de phase dans le plan t-J correspondant au modèle t-J pour deux valeurs caractéristiques $J/t = 0.5$ et $J/t = 0.35$ (voir figures V.22 et V.23 respectivement). On voit un large dépassement de la limite de Pauli et un plateau d'aimantation contrôlé par le dopage dans les deux cas pour une gamme de dopage allant de 0 à 0.25. La phase plateau $m = \delta$ est plus étendue pour $J/t = 0.35$ et le dépassement de la limite de Pauli moins marqué. Au delà de $\delta = 0.25$, les courbes d'aimantation sont assez différentes (non montrées) ce qui suggère que cette densité en trous délimite la borne supérieure pour l'observation du plateau. On peut donc résumer ainsi les transitions de phases qui ont lieu à mesure que le champ augmente. À faible champ, le système est dans la phase de Luther-Emery avec corrélations d -wave dominantes et aimantation nulle. Après un premier champ critique où le système commence à s'aimanter, le fondamental développe des corrélations typiques d'une phase FFLO et de l'appariement triplet $S^z = 0$ émerge. C'est une phase C1S1. Lorsque $m = \delta$, un plateau d'aimantation s'ouvre avec une phase métallique. Au-delà du plateau, le système est à nouveau dans une phase supraconductrice de type FFLO avec des corrélations triplets de plus en plus significatives jusqu'à un champ critique supraconducteur H_c . Là, la bande (π, \downarrow) se vide et le système entre dans une phase métallique avec trois modes non gappés. Au niveau du plateau de saturation, la bande $(0, \downarrow)$ se vide. Notez qu'il pourrait y avoir une dernière transition suivant les paramètres si la bande $(0, \uparrow)$ se remplissait complètement. Ce remplissage se manifesterait par un décrochement sur la courbe d'aimantation, ce qui n'est pas observé sur la figure V.8.

Il est instructif de voir les effets du paramètre J/t sur les caractéristiques du diagramme de phase. Pour simplifier, on ne les a étudiées que dans la limite $\delta \rightarrow 0^+$. Les résultats extrapolés à partir de systèmes avec $L = 32, 48$ et 64 sont donnés sur la figure V.24. La première chose à noter est que les calculs numériques sont difficiles à petit J/t en raison de la tendance à avoir une phase Nagaoka. Cela se traduit par de forts effets de taille finie et les résultats ne sont fiables que pour $J/t \gtrsim 0.25$. On s'attend en effet à ce que la ligne de transition de la phase Nagaoka dépende fortement de la taille et tende vers $J/t = 0$ dans la limite thermodynamique du dopage infinitésimale. Cette tendance à tendre vers une phase Nagaoka pour des J/t relativement élevés laissent penser que cette phase a une extension non négligeable à densité finie et aux faibles valeurs de J/t mais ce n'est pas l'objet de la présente étude. Pour les larges $J/t \gtrsim 1$, il y a la séparation de phase du diagramme de phase II.17 et cette limite est moins physique. L'énergie de pairing (champ de Pauli) et le champ critique

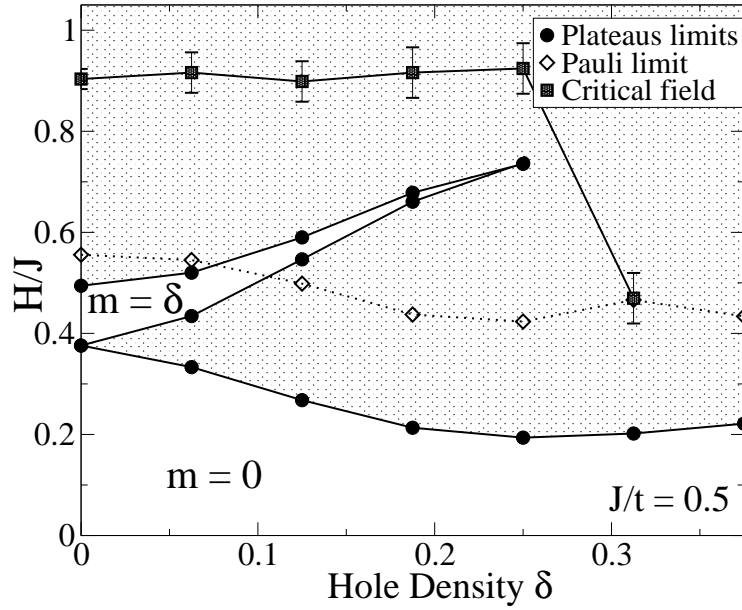


FIG. V.22: Diagramme de phase des échelles dopées supraconductrices sous champ magnétique avec effet Zeeman dans le plan (H, δ) pour $J/t = 0.5$. Extrait de la publication [2].

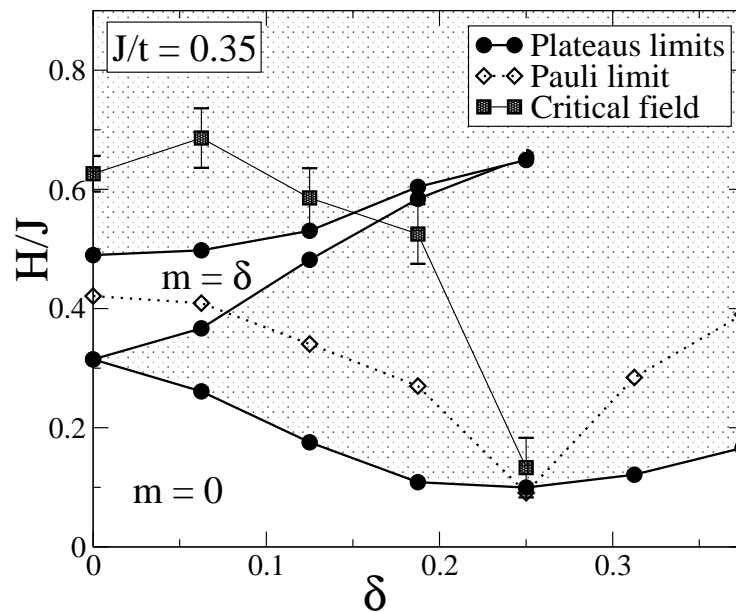


FIG. V.23: Même diagramme que pour la figure V.22 pour $J/t = 0.35$. Le plateau à $m = \delta$ y est plus large mais le champ critique plus faible. Extrait de la publication [3].

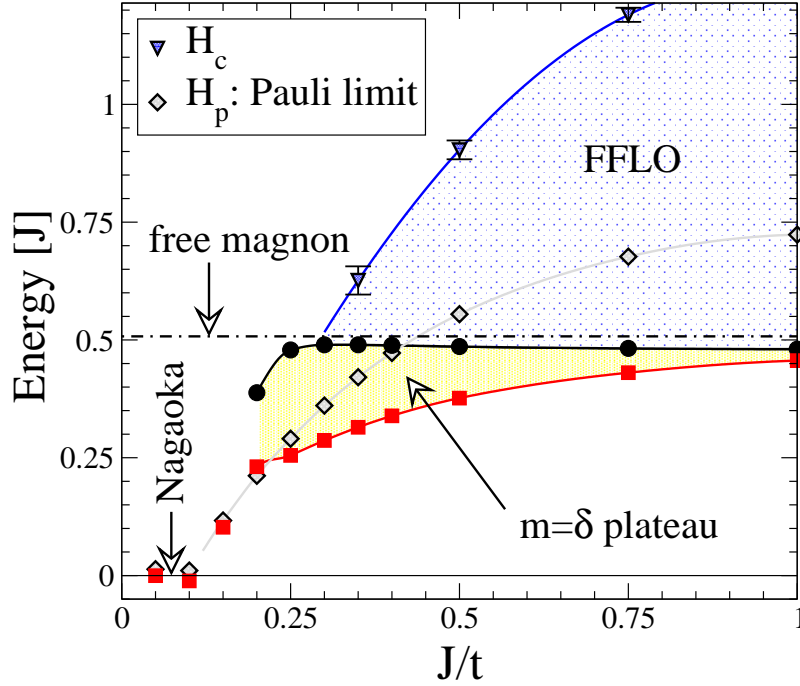


FIG. V.24: *Champ de Pauli, champ critique supraconducteur et largeur du plateau $m = \delta$ dans la limite de dopage infinitésimal en fonction du paramètre J/t d'interaction du modèle t - J des échelles isotropes. Les carrés rouges symbolisent la limite inférieure du plateau et les cercles noirs la limite supérieure. Extrait de la publication [3].*

augmentent avec J/t ce qui est attendu dans le mécanisme RVB de la supraconductivité. Le champ critique suit simplement l'augmentation de l'énergie d'appariement. La largeur du plateau, quant à elle, augmente à mesure que J/t diminue. À fort J/t , les plateaux à densité finie ne seront presque plus visibles.

Ces échelles d'énergie élémentaires sont à rapprocher de celle du mode magnétique résonnant. L'énergie de liaison du mode étant $\min(\Delta_p, \Delta_M)$ avec $\Delta_p = H_p$ et $\Delta \sim J/2$ le gap magnon de l'échelle non dopée. On remarque d'ailleurs sur la figure V.24 que la borne supérieure du plateau est constante avec J/t et très proche de Δ_M . Cela est cohérent avec l'image de la résonance de la paire de trou avec le magnon pour créer l'état lié : l'excitation magnétique suivante est un magnon « quasi-libre ». Enfin, l'augmentation de la largeur du plateau lorsque J/t diminue est cohérent avec l'argument Nagaoka développé phénoménologiquement pour expliquer l'origine du plateau. Il est légitime de trouver de larges plateaux au voisinage de la transition vers la phase Nagaoka. Notez cependant cette différence en présence du champ magnétique qui est que l'excitation de quasi-particules Δ_p a une énergie inférieure au magnon libre pour $J/t \lesssim 0.4$. Sous champ magnétique, ces excitations sont repoussées plus haut en énergie à cause de la phase FFLO. Compte-tenu de la convergence des approches phénoménologiques, numériques et de bosonisation discutées ci-avant, on propose que ce diagramme de phase soit générique pour la phase C1S0 supraconductrice du modèle t - J en présence d'effet Zeeman.

4.4 Résultats sur le modèle de Hubbard

Afin de compléter l'étude et pour étendre ces résultats au modèle de Hubbard, on a calculé les courbes d'aimantation et les corrélations supraconductrices pour des U/t suffisamment forts de l'ordre de 8. Les résultats sont donnés sur les figures V.25 et V.26. On observe bien un comportement similaire mais avec un gap de spin plus petit comme trouvé précédemment [36]. Les plateaux à $m = \delta$ ont une largeur comparable au gap de spin et le champ critique déduit approximativement de la brisure des paires dans les densités locales survient là encore au-dessus du plateau $m = \delta$. Le champ critique H_c se manifeste par un comportement en racine carrée typique de vidage de bande plus marqué que pour le modèle t-J. Quant aux corrélations supraconductrices, elles présentent également le vecteur d'onde FFLO est les mêmes canaux sont activés sous magnétique. Les fluctuations sont juste un peu moins prononcées quantitativement. Les mécanismes et la phénoménologie proposés dans le cadre du modèle t-J semblent donc tout à fait légitimes pour la description du modèle de Hubbard en couplage fort, ce qui n'est pas a priori si évident en raison de certaines approximations faites dans le modèle t-J (voir chapitre I).

5 Conclusion partielle

L'étude de l'effet Zeeman dans la phase supraconductrice des échelles de spins dopées a révélé une grande richesse dans les phases observées. Tout d'abord avec la présence d'un plateau d'aimantation contrôlé par le dopage et dû aux fortes interactions. Le mécanisme engendrant ce plateau peut être qualitativement compris sur la base de l'effet Nagaoka. Ensuite par la nature des corrélations supraconductrices caractéristiques d'une phase FFLO. Cette dernière permet un dépassement de la limite de Pauli dans ce modèle de supraconductivité d -wave singulet. D'autre part, l'émergence de nouveaux canaux triplets à fort champ met en évidence le rôle particulier du champ magnétique dans ces systèmes où l'appariement est médié par les fluctuations de spins : comme celles-ci sont affectées par le champ magnétique, de nouveaux canaux peuvent s'ouvrir par rapport à ceux existants à champ nul. C'est le cas du canal triplet $S^z = 0$. Un tel scénario n'est pas envisageable dans une supraconductivité conventionnelle où l'interaction attractive est médiée par les phonons, qui ont des fluctuations pas ou peu couplées au champ magnétique. Enfin, la nature métallique de la phase plateau suggère une réentrée de la supraconductivité dans le système au delà de cette phase.

Comme on l'a évoqué au chapitre I, l'interprétation des expériences dans le composé à échelles de spin $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$ n'est pas facile. Ces résultats suggèrent qu'un dépassement de la limite de Pauli n'est pas incompatible avec de la supraconductivité singulet dans ce composé. Dans le cas où l'appariement serait dû à la physique d'une échelle isolée et l'ordre supraconducteur établi par couplage Josephson entre les échelles, on s'attend à ce que les paires acquièrent un moment fini $q = \pi m$ dans les échelles et la phase FFLO serait alors stabilisée et particulièrement anisotrope. Cela n'exclue pas la possibilité d'un mécanisme triplet associé à une physique bidimensionnelle. D'autre part, des courbes de champs critiques supraconducteurs $H_c(T)$ avec une courbure anormale ont été prédites en étudiant la compétition entre phase de vortex et phase FFLO pour des supraconducteurs d -wave bidimensionnels [274].

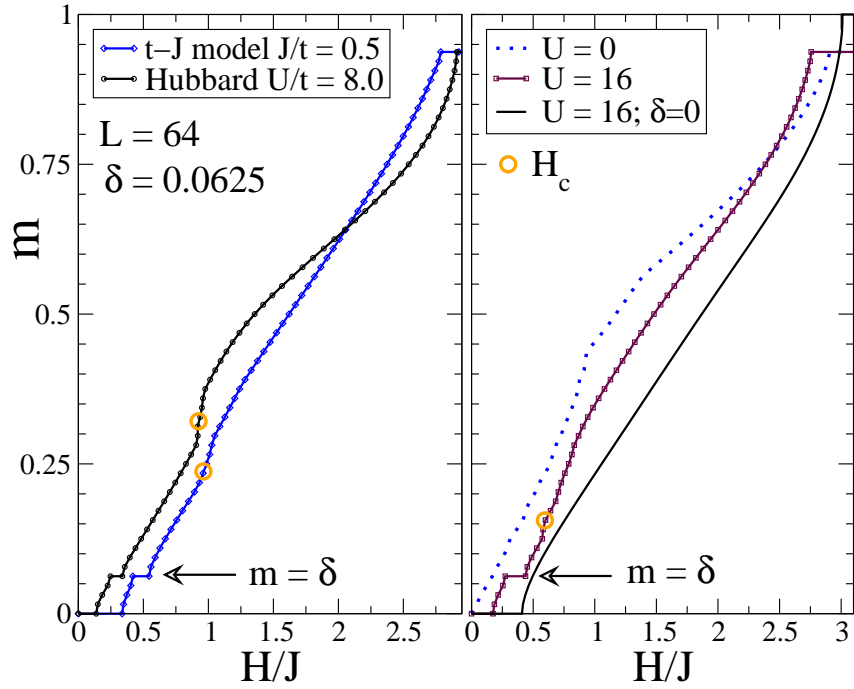


FIG. V.25: Plateaux dans le modèle de Hubbard. À gauche, comparaison avec le modèle t - J . À droite, effet de U et du dopage sur la courbe d'aimantation. La courbe en pointillés bleue correspond au modèle sans interaction et isotrope. Extrait de la publication [3].

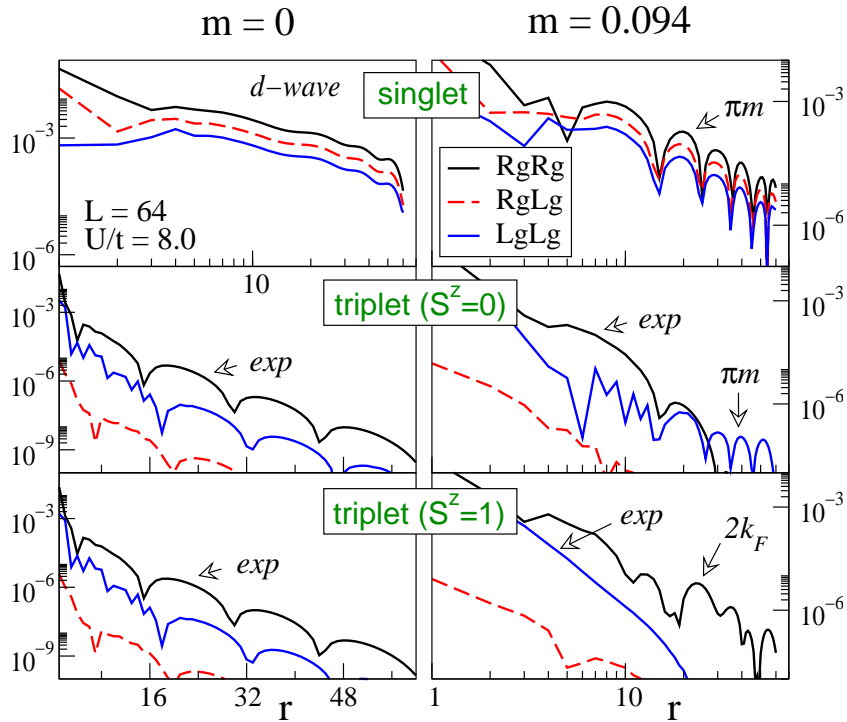


FIG. V.26: Corrélations supraconductrices dans le modèle de Hubbard avec $U/t = 8$. Les résultats sont similaires à ceux de la figure V.11. Extrait de la publication [3].

Pour terminer, des prédictions de bosonisation (cf publication [3]) suggèrent la possibilité d'une transition ou crossover entre supraconductivité singulet et supraconductivité triplet $S^z = 1$ dans un modèle de deux chaînes couplées telles que le couplage dominant entre les échelles soit le couplage Josephson. Les résultats numériques sur les modèles t-J et Hubbard avec un petit t_{\perp} n'ont pour l'instant pas pu confirmer de telles prédictions, les résultats tendant plutôt vers ceux du point fixe de la phase C1S0 générique des échelles. On peut imaginer forcer le couplage Josephson en supprimant t_{\perp} et en ne laissant que les sauts de paires entre chaînes pour étudier de telles phases qui seraient particulièrement intéressantes. D'autre part, un modèle de deux chaînes couplées en zig-zag pourrait également être pertinent pour décrire la physique de supraconducteurs quasi-unidimensionnels sous champ magnétique [276]. Notons enfin que la physique des phases FFLO a récemment retrouvé un regain d'intérêt suite à sa correspondance avec les phases « avec déséquilibre des niveaux de Fermi » dans les atomes froids. Ces derniers ont en effet par construction expérimentale un nombre différent d'atomes dans l'état \uparrow et \downarrow ce qui revient à avoir un champ magnétique effectif dans ces condensats qui est de plus contrôlable expérimentalement [265, 277]. Le grand intérêt de ces systèmes est l'absence de compétition avec une phase de vortex. Un puits unidimensionnel pourrait certainement ce type de phases.

Chapitre VI

Effet orbital et diamagnétisme dans les échelles dopées à deux montants

L'effet orbital du champ magnétique est maintenant pris en compte en considérant qu'un flux traverse les plaquettes des échelles. L'objectif de ce chapitre est de comprendre l'influence de ce flux sur la physique des échelles ainsi que de caractériser sa réponse dans la limite réaliste de champ nul. La problématique de l'effet orbital du champ magnétique dans les systèmes sans interactions est plus compliquée que celle de l'effet Zeeman dont le terme est simplement diagonal. Pour un gaz d'électrons dans le continu (c'est-à-dire en l'absence de réseau), l'hamiltonien cinétique contenant $\frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(x))^2$ peut être résolu analytiquement à deux dimensions [278] ce qui conduit à une description du fondamental en termes de niveaux de Landau [9, 22]. Cette description est à la base de la compréhension de l'effet Hall quantique. Le champ magnétique introduit une longueur caractéristique qui est le rayon cyclotron de l'orbite $l = \sqrt{\hbar/eH}$. Lorsque les électrons sont sur réseau, le pas du réseau a donne une autre longueur caractéristique et la nature des orbites dépendra fortement du rapport l/a . Une des conséquences du champ est que les fonctions de Bloch se transforment différemment lors de l'applications des opérateurs de translation [279]. Peierls a proposé de modifier la partie cinétique de l'hamiltonien en introduisant une phase dans le terme de saut $e^{i\phi(x)}c_{x',\sigma}^\dagger c_{x,\sigma} + h.c.$ avec $\phi(x) = \frac{e}{\hbar}aA(x)$ [280–282], ce qui est appelé « substitution de Peierls ». Cela revient à dire, dans une approche semi-classique, que la phase de la fonction d'onde est sensible au potentiel vecteur \mathbf{A} selon l'effet Aharonov-Bohm :

$$\psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}'} \mathbf{A}(\mathbf{s}) \cdot d\mathbf{s}\right). \quad (\text{VI.1})$$

La substitution de Peierls¹ n'est en toute rigueur valable que dans la limite de champ faible et de faible densité [280, 283]. Le flux adimensionné par plaquette

$$\phi = \frac{e}{\hbar} \oint_{\square} A(x) dx = \frac{e}{\hbar} Ha^2, \quad (\text{VI.2})$$

allant de 0 à 2π , ne dépend pas de la jauge. Par la suite, Harper [284] et Hofstadter [285] ont étudié le cas sur le réseau carré qui montre une structure particulièrement complexe du spectre en fonction du flux ϕ . En particulier, sa nature dépend fondamentalement du fait que

¹Pour un modèle sur réseau, c'est la façon généralement adoptée pour prendre en compte l'effet orbital car il n'y a en fait pas tellement d'autre possibilité.

$\phi/(2\pi)$ est rationnel ou non. Pour les expériences, il est utile de préciser que le quantum de flux valant $h/e = \phi_0 = 4.1357 \times 10^{-15} T \cdot m^2$, un flux adimensionné de $\phi = 0.01\pi$ correspond déjà à un champ magnétique très grand d'environ $H \sim 800 T$ pour un pas de réseau typique de $a = 4$ Angströms pour la liaison Cu–O–Cu dans les cuprates.

Les échelles sont de fait le réseau de plus simple contenant des plaquettes et pouvant être traversé par un flux. Les interactions fortes peuvent de plus y être prises en compte par les méthodes spécifiques aux systèmes quasi-unidimensionnels que sont la bosonisation et le DMRG. C'est ce que l'on se propose de faire dans ce qui suit. Les échelles de fermions sans spin ont été étudiées par bosonisation ce qui a mis en évidence la possibilité d'excitations fractionnaires et d'une phase OAF induites par le champ magnétique [286, 287]. Le cas des échelles bosoniques a de même été étudié [288] et a montré la possibilité d'avoir une phase avec effet Meissner suivie de phases de vortex dans les systèmes de jonctions Josephson couplées. Ces résultats seront rappelés en fin de chapitre. Pour les électrons avec spins (modèle t-J), une étude numérique récente a abordé partiellement la question sur de petits réseaux d'échelles et bidimensionnels [289].

Les différentes contributions à la susceptibilité magnétique [290] viennent d'effets orbitaux et de l'effet Zeeman :

$$\chi = \chi^{\text{spin}} + \chi_{\text{cond}}^{\text{orb}} + \chi_{\text{core}}^{\text{orb}} \quad (\text{VI.3})$$

avec χ^{spin} la susceptibilité de Pauli et χ^{orb} les contributions orbitales des électrons de cœur et des électrons de conduction. Il est difficile d'évaluer $\chi_{\text{cond}}^{\text{orb}}$ pour des électrons sur réseaux en raison de l'effet du champ magnétique sur les bandes qui est généralement complexe [280, 291]. $\chi_{\text{core}}^{\text{orb}}$ peut être évaluée pour des électrons localisés d'après les formes des orbitales [292]. Dans la suite, on se concentre sur $\chi_{\text{cond}}^{\text{orb}}$ dans un modèle à une orbitale avec des électrons de conduction. Pour les échelles dopées, la contribution de Pauli est nulle à température nulle et à faible champ en raison du gap de spin. La prise en compte de l'effet Zeeman sera brièvement discutée plus loin.

1 Warm-up : modèle et cas sans interaction

1.1 hamiltonien et quantification du flux

La partie cinétique de l'hamiltonien s'écrit pour une échelle anisotrope

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_t = & -t_{\parallel} \sum_{i,\sigma} \left[e^{i\phi/2} c_{i+1,\sigma,1}^{\dagger} c_{i,\sigma,1} + h.c. \right] - t_{\parallel} \sum_{i,\sigma} \left[e^{-i\phi/2} c_{i+1,\sigma,2}^{\dagger} c_{i,\sigma,2} + h.c. \right] \\ & - t_{\perp} \sum_{i,\sigma} \left[c_{i,\sigma,2}^{\dagger} c_{i,\sigma,1} + h.c. \right] \end{aligned} \quad (\text{VI.4})$$

avec ϕ le flux par plaquette de l'Eq. (VI.2). La jauge choisie est représentée sur la figure VI.1. On peut limiter l'étude aux flux $\phi \in [0, \pi]$ puisque $E(\phi) = E(2\pi - \phi)$. Il est important de préciser que le champ magnétique brise la symétrie de renversement du temps et dans notre cas la symétrie d'échange entre les chaînes. Échanger les chaînes revient à renverser la direction du champ magnétique.

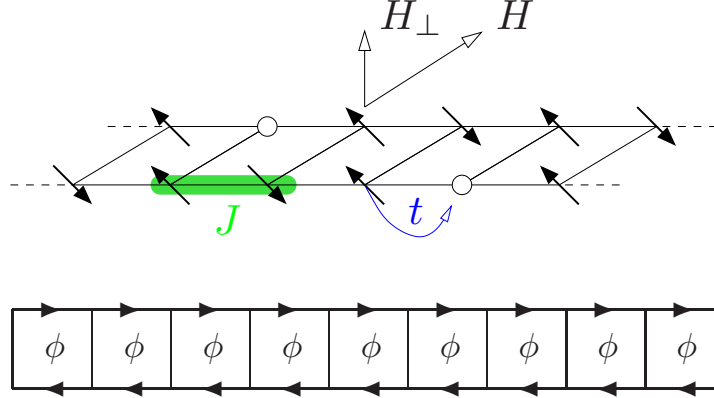


FIG. VI.1: *Modèle t - J isotrope sous champ magnétique. Un flux ϕ par plaquette traverse l'échelle. En dessous, la jauge choisie pour la substitution de Peierls avec des phases opposées $\pm\phi/2$ selon chaque montant. Extrait de la publication [6].*

1.2 Système sans interaction

On discute ici les résultats en l'absence d'interaction qu'il est crucial de bien comprendre avant l'interprétation des limites de couplage faible et aussi de couplage fort. En effet, on va voir que d'importants effets de remplissage de bande ont lieu. On calcule aussi la susceptibilité à champ nul. Certains de ces résultats ont été précédemment discutés dans les références [286, 287]. Nous les étendons et utilisons des conventions différentes : $\alpha = t_{\perp}/t_{\parallel}$ par la suite.

1.2.1 Structure de bande

À flux nul, le couplage t_{\perp} entre les chaînes lève la dégénérescence des bandes des chaînes en créant un état liant $k_y = 0$ et anti-liant $k_y = \pi$. En présence de flux, l'absence de symétrie de réflexion entre les chaînes va coupler ces modes 0 et π . On les appellera bandes basse et haute (notées d/u) pour ne pas les confondre avec les modes à flux nul. L'hamiltonien (VI.4), après transformée de Fourier, donne

$$\mathcal{H} = \sum_k \begin{pmatrix} c_{k,1}^{\dagger} & c_{k,2}^{\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -2t_{\parallel} \cos(k + \frac{\phi}{2}) & \alpha \\ \alpha & -2t_{\parallel} \cos(k - \frac{\phi}{2}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k,1} \\ c_{k,2} \end{pmatrix}, \quad (\text{VI.5})$$

qui met en évidence le couplage α des chaînes d'énergies $-2t_{\parallel} \cos(k \pm \frac{\phi}{2})$. En décomposant

$$\begin{pmatrix} \cos(k + \frac{\phi}{2}) & \frac{\alpha}{2} \\ \frac{\alpha}{2} & \cos(k - \frac{\phi}{2}) \end{pmatrix} = \cos k \cos \frac{\phi}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\sin k \sin \frac{\phi}{2} & \frac{\alpha}{2} \\ \frac{\alpha}{2} & \sin k \sin \frac{\phi}{2} \end{pmatrix} \quad (\text{VI.6})$$

on obtient immédiatement les énergies des bandes basse et haute

$$\mathcal{E}_{d/u}(k, \phi) = -2t_{\parallel} \left\{ \cos k \cos \frac{\phi}{2} \pm \sqrt{\sin^2 k \sin^2 \frac{\phi}{2} + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2} \right\}. \quad (\text{VI.7})$$

ainsi que le changement de base

$$\begin{pmatrix} c_{k,1} \\ c_{k,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_k & b_k \\ b_k & -a_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k,d} \\ c_{k,u} \end{pmatrix}, \quad (\text{VI.8})$$

faisant intervenir les facteurs de cohérence $a_k, b_k > 0$

$$a_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sin k \sin \frac{\phi}{2}}{\sqrt{\sin^2 k \sin^2 \frac{\phi}{2} + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2}} \right) \quad (\text{VI.9})$$

$$b_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sin k \sin \frac{\phi}{2}}{\sqrt{\sin^2 k \sin^2 \frac{\phi}{2} + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2}} \right). \quad (\text{VI.10})$$

On remarquera que $a_{-k} = b_k$ et que ces facteurs ne dépendent pas de k (et donc du remplissage) à flux nul $a_k = b_k = 1/\sqrt{2}$. On a toujours $a_k < b_k$ quel que soit le flux avec pour $k > 0$

$$b_k^2 - a_k^2 = \frac{\sin k \sin \frac{\phi}{2}}{\sqrt{\sin^2 k \sin^2 \frac{\phi}{2} + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2}}. \quad (\text{VI.11})$$

Voici les caractéristiques de la structure de bande donnée par l'Eq. (VI.7) qui sont résumées aussi sur la figure VI.2 :

- (i) La condition pour avoir un gap entre les deux bandes est $\max \mathcal{E}_d = \mathcal{E}_d(\pi, \phi) < \min \mathcal{E}_u = \mathcal{E}_u(0, \phi)$ ce qui donne $\frac{\alpha}{2} = \cos \frac{\phi}{2}$. On peut reformuler cette condition en $\phi > \phi_0$ avec

$$\sin \frac{\phi_0}{2} = \sqrt{1 - \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2}. \quad (\text{VI.12})$$

- (ii) La condition pour avoir un double-puits dans la bande \mathcal{E}_d s'obtient par annulation de la dérivée seconde en $k = 0$ correspondant à un changement de son signe et donne $\frac{\alpha}{2} \cos \frac{\phi}{2} = \sin^2 \frac{\phi}{2}$. De même, cela peut se réécrire comme $\phi > \phi_c$ avec

$$\sin \frac{\phi_c}{2} = \left[\frac{\sqrt{\alpha^4 + 16\alpha^2} - \alpha^2}{8} \right]^{1/2}. \quad (\text{VI.13})$$

Dans ce cas, les vecteurs d'onde correspondant aux minima de la bande d et aux maxima de la bande u valent

$$k_{\min}^d(\phi) = \arcsin \sqrt{\sin^2 \frac{\phi}{2} - \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 \cot^2 \frac{\phi}{2}} \quad (\text{VI.14})$$

$$k_{\max}^u(\phi) = \pi - k_{\min}^d(\phi) \quad (\text{VI.15})$$

et ils apparaissent donc avec une valeur finie.

- (iii) L'intersection des deux courbes a lieu pour $\alpha = \sqrt{2}$ pour laquelle on a $\phi_{0/c} = \pi/2$. Si $\alpha < \alpha_c$, on a $\phi_c < \phi_0$, sinon $\phi_0 < \phi_c$.
- (iv) La condition pour vider la bande u est $\mu = \alpha - 2 \cos \frac{\phi}{2}$ et est la même que celle qui correspond à remplir complètement la bande d .
- (v) Combien de points de Fermi peut-il y avoir dans le système? On peut justifier que seuls les cas avec deux et quatre points de Fermi sont envisageables (voir figure VI.3). Pour des bandes monotones ($\phi < \phi_c$), c'est vrai. Lorsque la dispersion n'est pas monotone

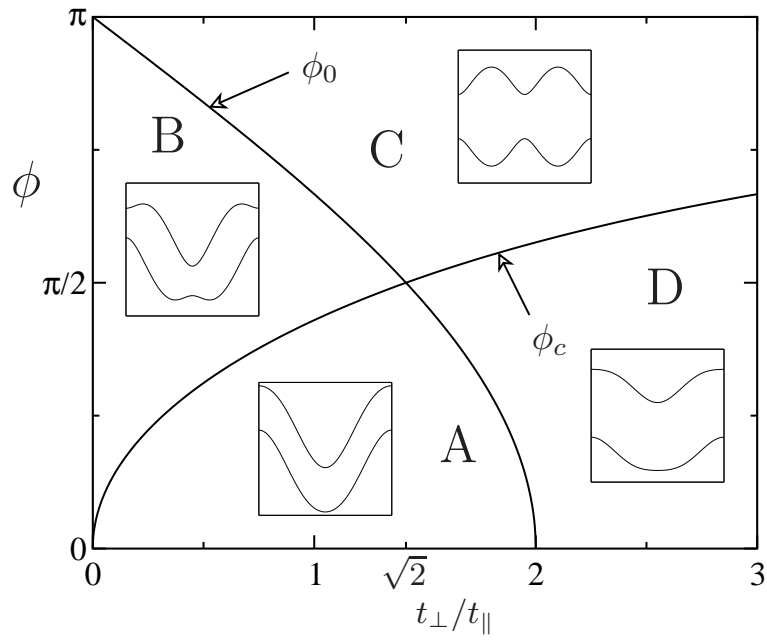


FIG. VI.2: Les quatre formes typiques de la structure de bandes en fonction du flux et du rapport t_{\perp}/t_{\parallel} . Le champ critique ϕ_0 (resp. ϕ_c) signale l'apparition d'un double-puits (resp. gap entre les bandes d et u). La phase D a toujours deux points de Fermi quelque soit le remplissage et la phase C en a toujours quatre lorsque $\phi = \pi$. Extrait de la publication [6].

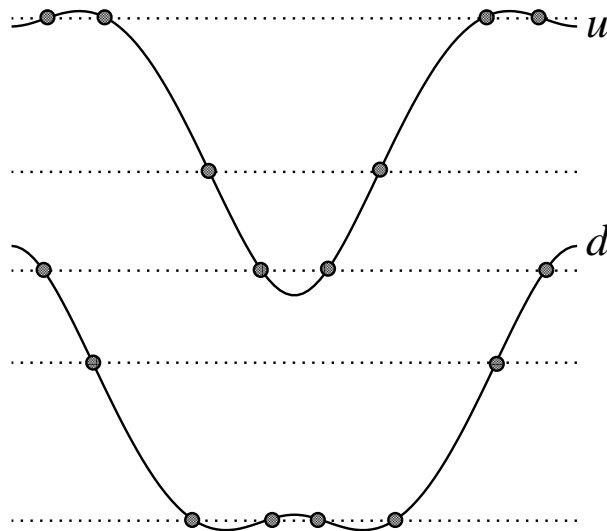


FIG. VI.3: Suivant le remplissage, le nombre de points de Fermi peut être deux ou quatre. Les différentes situations sont représentées dans le cas de la structure de bande de la phase B de la figure VI.2). On peut avoir des vitesses de Fermi négatives à faible remplissage ou fort flux. Extrait de la publication [6].

($\phi > \phi_c$) : soit $\phi > \phi_0$ et les deux bandes ne se recouvrent pas donc on a deux ou quatre points de Fermi, soit, lorsque $\phi \in [\phi_c, \phi_0]$, on se convainc que le fait que $\mathcal{E}^u(k, \phi) > \mathcal{E}^d(k, \phi)$ pour tout k et que la bande u a seulement un maximum en $k_{\max}^u(\phi)$ tandis que la bande d a seulement un minimum en $k_{\min}^d(\phi)$ implique que l'on a nécessairement que deux ou quatre points de Fermi.

1.2.2 Remplissage des bandes : trouver les points de Fermi

À potentiel chimique fixé, les points de Fermi $k_F^{d/u}$ sont déduits de leur relation avec le potentiel chimique μ d'après l'Eq. (VI.7). Dans ce cas, on obtient en inversant l'Eq. (VI.7)

$$\cos k_F^{d/u}(\mu, \phi) = -\frac{\mu}{2t_{\parallel}} \cos \frac{\phi}{2} \pm s_{d/u} \sqrt{\left[1 - \left(\frac{\mu}{2t_{\parallel}}\right)^2\right] \sin^2 \frac{\phi}{2} + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2}. \quad (\text{VI.16})$$

Remarquez que suivant les valeurs de ϕ et μ , l'équation précédente a deux solutions que l'on indicera par $s_{d/u} = \pm 1$ pour *chaque* bande d, u (voir figure VI.3). S'il y a deux points de Fermi sur la même bande p , ils seront notés $k_{F,1/2}^p$.

Les vitesses de Fermi peuvent être évaluées selon

$$v_F^{d/u}(k, \phi) = 2t_{\parallel} \sin k \left\{ \cos \frac{\phi}{2} \pm \frac{\cos k \sin^2 \frac{\phi}{2}}{\sqrt{\sin^2 k \sin^2 \frac{\phi}{2} + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2}} \right\}. \quad (\text{VI.17})$$

On notera que des vitesses de Fermi négatives peuvent être obtenues dans le cas de relations de dispersion non monotones.

À densité électronique fixée n , on trouve les points de Fermi en utilisant directement l'Eq. (VI.7) et la règle de somme de Luttinger (voir figure VI.3 pour les différents cas possibles). Si le système a deux points de Fermi, on a alors soit $k_F^d = \pi n$, soit $k_F^u = \pi(n-1)$, c'est une dépendance seulement sur le remplissage. Lorsqu'il y a quatre points de Fermi, en se limitant à $n \leq 1$, on trouve

(i) si les bandes se recouvrent :

$$k_F^u + k_F^d = \pi n \quad \text{et} \quad \sin \left(\frac{k_F^u - k_F^d}{2} \right) = \left[\frac{\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 \cos^2 \frac{\phi}{2}}{\sin^2 \left(\frac{\pi n}{2}\right) - \sin^2 \frac{\phi}{2}} + \sin^2 \frac{\phi}{2} \right]^{1/2}, \quad (\text{VI.18})$$

(ii) si les bandes ne se recouvrent pas :

$$k_{F,1}^d - k_{F,2}^d = \pi n \quad \text{et} \quad \sin \left(\frac{k_{F,1}^d + k_{F,2}^d}{2} \right) = \left[\frac{\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 \cos^2 \frac{\phi}{2}}{\sin^2 \left(\frac{\pi n}{2}\right) - \sin^2 \frac{\phi}{2}} + \sin^2 \frac{\phi}{2} \right]^{1/2}. \quad (\text{VI.19})$$

On vérifie que l'on retrouve les résultats des cas particuliers $\phi = 0$ et $\alpha = 0$. On peut également calculer les quatre densités critiques pour lesquelles le nombre de points de Fermi change de 2 à 4 et de 4 à 2. En les ordonnant selon $n_{c1} < n_{c2} < n_{c3} < n_{c4}$, on a

$$\begin{aligned} n_{c1} &= \arccos(\cos \phi + \alpha \cos(\phi/2))/\pi & \text{si } \phi \in [\phi_c, \pi] \\ n_{c2} &= \arccos(\cos \phi - \alpha \cos(\phi/2))/\pi & \text{si } \phi \in [0, \phi_0] \\ n_{c3} &= 2 - n_{c2} & \text{si } \phi \in [0, \phi_0] \\ n_{c4} &= 2 - n_{c1} & \text{si } \phi \in [\phi_c, \pi]. \end{aligned}$$

On peut inverser ces relations pour obtenir les flux critiques $\phi^{2 \leftrightarrow 4}$ correspondant aux transitions $2 \leftrightarrow 4$:

$$\cos \frac{\phi^{2 \leftrightarrow 4}}{2} = \frac{1}{2} \left[\pm \frac{\alpha}{2} + \sqrt{\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 + 4 \cos^2 \left(\frac{\pi n}{2}\right)} \right]. \quad (\text{VI.20})$$

Cette dernière expression est utile pour vérifier le lien avec les changements de signe de la susceptibilité comme on va le voir maintenant.

1.2.3 Susceptibilité orbitale

Avec la connaissance des points de Fermi, on peut calculer la plupart des quantités intégrées sur les bandes et en particulier l'énergie totale $E_0(\phi)$, le courant diamagnétique $j_{\parallel}(\phi)$ et la susceptibilité orbitale donnés par les définitions

$$j_{\parallel}(\phi) = -\frac{1}{L} \frac{\partial E_0}{\partial \phi} \quad \text{and} \quad \chi(\phi) = -\frac{1}{L} \frac{\partial^2 E_0}{\partial \phi^2}, \quad (\text{VI.21})$$

Avec cette définition, $\chi(\phi) > 0$ pour du diamagnétisme orbital. La première relation est obtenue à partir du théorème de Feynman-Hellman et la seconde est simplement $\partial j_{\parallel} / \partial \phi$. On trouve à la fois les contributions des électrons de moment k dans chaque modes

$$j_{\parallel}(k, \phi) = -t_{\parallel} \left\{ \cos k \sin \frac{\phi}{2} \mp \frac{1}{2} \frac{\sin^2 k \sin \phi}{\sqrt{\sin^2 k \sin^2 \frac{\phi}{2} + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2}} \right\}, \quad (\text{VI.22})$$

avec de même pour les contributions orbitales

$$\chi^{\text{orb}}(k, \phi) = -\frac{t_{\parallel}}{2} \left\{ \cos k \cos \frac{\phi}{2} \mp \frac{\sin^2 k \cos \phi}{\left[\sin^2 k \sin^2 \frac{\phi}{2} + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2\right]^{1/2}} \pm \frac{1}{4} \frac{\sin^4 k \sin^2 \phi}{\left[\sin^2 k \sin^2 \frac{\phi}{2} + \left(\frac{\alpha}{2}\right)^2\right]^{3/2}} \right\}, \quad (\text{VI.23})$$

mais aussi les contributions des dérivées $\partial k^p(\phi) / \partial \phi$ et $\partial^2 k^p(\phi) / \partial \phi^2$ [291]. Ainsi, les Eqs. (VI.21) peuvent être calculées analytiquement ou numériquement. Un exemple représentant $\chi(\phi)$ est donnée sur la figure VI.4 qui montre les discontinuités de la susceptibilité au niveau des transitions de $2 \leftrightarrow 4$ points de Fermi d'après les Eqs. (VI.20). On peut vérifier que le signe de la susceptibilité comme mesure des transitions n'est en fait correct que pour $0.5 < n = 1 - \delta < 1$ lorsque $\alpha = 1$.

Enfin, on peut calculer le comportement de la susceptibilité à champ nul (dans la limite $\phi \rightarrow 0$) en fonction du remplissage électronique n . Avec le facteur deux pour les spins, on a : si $\alpha > 1 - \cos \pi n$ (deux points de Fermi),

$$\chi_0^{\text{orb}}(n) = -t_{\parallel} \left[\sin \pi n \left(1 + \frac{1}{\alpha} \cos \pi n \right) - \frac{\pi}{\alpha} n \right], \quad (\text{VI.24})$$

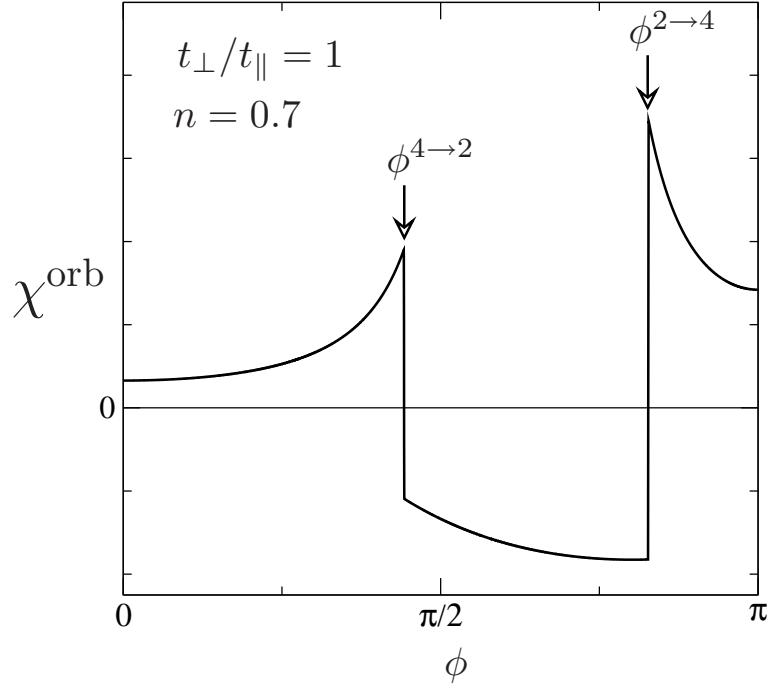


FIG. VI.4: La susceptibilité orbitale comme mesure du nombre de points de Fermi pour $0.5 < 1 - \delta < 1$ et $t_{\perp} = t_{\parallel}$. $\phi^{2 \leftrightarrow 4}$ indiquent les transitions de quatre à deux points de Fermi. Extrait de la publication [6].

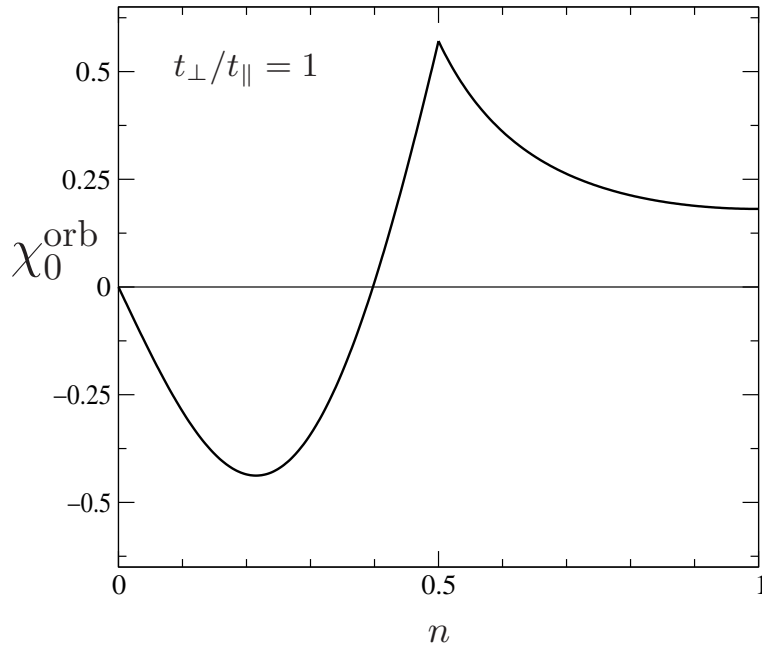


FIG. VI.5: Susceptibilité à champ nul dans le système sans interactions pour $t_{\perp} = t_{\parallel}$ d'après les Eqs. (VI.24-VI.25). La singularité à $n = 0.5$ marque la transition de deux à quatre points de Fermi. Lorsque $n < 0.5$, la susceptibilité change de signe pour $n \simeq 0.3975 \dots$ malgré que le système n'a toujours dans cette région que deux points de Fermi. Extrait de la publication [6].

et, si $\alpha < 1 - \cos \pi n$ (quatre points de Fermi),

$$\chi_0^{\text{orb}}(n) = -t_{\parallel} \left[\sqrt{\sin^2 \left(\frac{\pi n}{2} \right) - \left(\frac{\alpha}{2} \right)^2} \left(2 + \frac{\cos \pi n}{\sin^2(\pi n/2)} \right) - \frac{2}{\alpha} \arcsin \left(\frac{\alpha}{2} \frac{1}{\sin(\pi n/2)} \right) \right]. \quad (\text{VI.25})$$

La courbe pour $\alpha = 1$ est tracée sur la figure VI.5 qui montre que pour $n < 0.5$, même si le système n'a toujours que deux points de Fermi, la susceptibilité peut être soit positive soit négative.

1.3 Limite de couplage faible

Les résultats du cas sans interaction sont à la base de la description de la limite de couplage faible. On utilise alors le modèle de Hubbard

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_t + U \sum_{i,p} n_{i,\uparrow,p} n_{i,\downarrow,p}. \quad (\text{VI.26})$$

La limite de couplage faible [174] (et voir chapitre II) fait l'hypothèse que les interactions ne modifient pas la structure de bande du système si l'interaction est suffisamment faible $U \ll t, t_{\perp}$. Rappelons que le flux déformait considérablement la structure de bande en mélangeant les bandes 0 et π et qu'on avait soit deux, soit quatre points de Fermi suivant la valeur du flux et du rapport t_{\perp}/t_{\parallel} .

À partir des résultats des Réfs. [168, 169, 293–295], on s'attend à ce que deux points de Fermi donnent de façon générique une phase C1S1 pour des interactions répulsives tandis que quatre points de Fermi donneront une phase type Luther-Emery C1S0. Dans ce dernier cas, on peut également avoir des phases C2S1 ou C2S2 qui apparaissent suivant les rapports des vitesses de Fermi [168, 169, 293]. Cela conduit à des phases intermédiaires entre les phases C1S0 et C1S1 (voir la figure II.14). Bien entendu, en présence de commensurabilité du remplissage électronique, on peut avoir d'autres phases. Au demi-remplissage, une phase C0S0 de type isolant de Mott (resp. de type isolant de bande) survient pour $\phi < \phi_0$ (resp. $\phi > \phi_0$). Il est aussi possible d'avoir une situation avec une commensurabilité sur une des deux bandes. D'après [168], cela est à l'origine de phases C2S1 et C2S2 au voisinage de la transition C1S0→C1S1. Ces phases ont cependant une extension faible. On peut enfin avoir un effet de commensurabilité en considérant les processus de umklapp sur la bande d seulement (pour un vecteur de Fermi alors égal à $\pi/2$) : ce sont les lignes C1S2 et C0S1 du diagramme de phase de la figure VI.6. Le diagramme de phase est tracé pour une échelle isotrope sur la figure VI.6 en omettant les phases intermédiaires. On observe une réentrance de la phase C1S0 à fort flux. Ce diagramme est générique pour $t_{\perp}/t_{\parallel} < 2$ à ceci près que $\phi_0 < \phi_c$ lorsque $t_{\perp}/t_{\parallel} > \sqrt{2}$. Pour $t_{\perp}/t_{\parallel} > 2$, la phase C1S0 à faible flux disparaît.

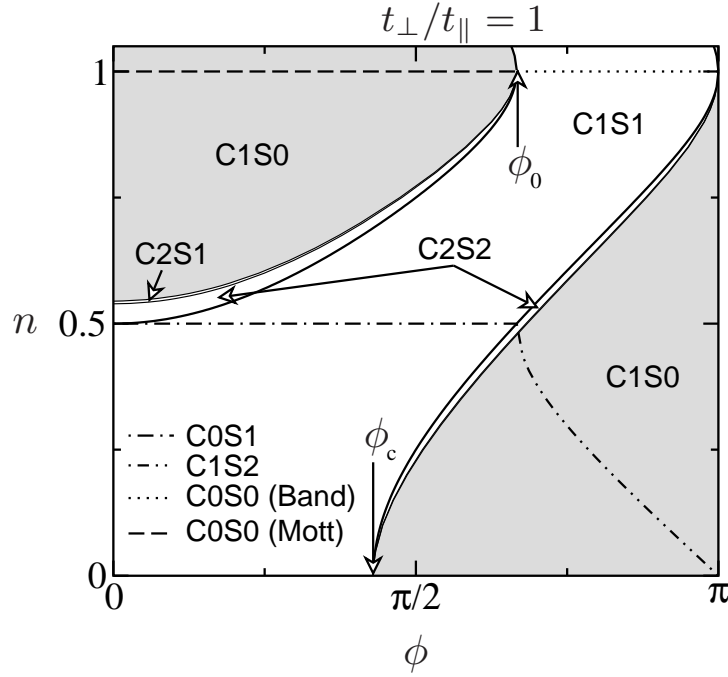


FIG. VI.6: Diagramme de phase dans la limite de couplage faible pour les échelles isotropes. Les phases avec quatre (resp. deux) points de Fermi appartiennent à la classe C1S0 (resp. C1S1). Au demi-remplissage, les interactions entraîneront une phase isolant de Mott pour $\phi < \phi_0$ et une phase isolant de bande $\phi > \phi_c$. La phase C1S0 est réentrant avec le flux. D'autres phases peuvent être obtenues si le rapport des vitesses de Fermi est grand (phases C2S1 and C2S2) et si la bande d a un vecteur de Fermi égal à $\pi/2$ (phases C0S1 and C1S2). Extrait de la publication [6].

2 Résultats sur le modèle t-J

La limite de fort couplage est maintenant étudiée avec le modèle t-J pour un système isotrope, $t = t_{\parallel} = t_{\perp}$ et $J = J_{\parallel} = J_{\perp}$ si bien que l'hamiltonien s'écrit alors simplement

$$\mathcal{H}_{t-J} = \mathcal{P}\mathcal{H}_t\mathcal{P} + J \sum_{\langle i,j \rangle} [\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4}n_i n_j]. \quad (\text{VI.27})$$

L'enseignement de l'approche de couplage faible est que les effets de remplissages vont gouverner la physique et les principales phase. On s'attend donc à ce que la phase C1S0 survive à faible flux tandis que des phases C1S1 et C1S0 se produisent à plus fort flux. On va voir que c'est essentiellement ce qu'il se passe d'après les résultats numériques.

2.1 Susceptibilité et diagramme de phase

Pour évaluer le diagramme de phase en fonction du flux et de la densité, on va utiliser le signe de la susceptibilité. Numériquement, on calcule le courant et la susceptibilité à partir

de dérivées centrées qui sont plus précises :

$$j_{\parallel}(\phi) = -[E_0(\phi + d\phi) - E_0(\phi - d\phi)]/(2Ld\phi) \quad (\text{VI.28})$$

$$\chi(\phi) = [j_{\parallel}(\phi + d\phi) - j_{\parallel}(\phi - d\phi)]/(2d\phi), \quad (\text{VI.29})$$

avec les conditions² $j_{\parallel}(0) = j_{\parallel}(\pi) = 0$ et les dérivées à droite et à gauche pour $\chi(0)$ and $\chi(\pi)$. Puisque accessible à partir des énergies, ces quantités sont faciles à calculer numériquement. Il est important de voir qu'elles intègrent les contributions de toutes les bandes et ne sont par conséquent pas dérivables par les méthodes de basse énergie comme la bosonisation. L'effet des interactions est de lisser les discontinuités aux transitions mais on propose que les zéros de la susceptibilité correspondent adiabatiquement aux transitions entre les phases C1S0 et C1S1. Comme on le verra par la suite, cette interprétation est cohérente avec le comportement des autres observables (voir figure VI.7). On a ainsi déterminé le diagramme de phase à partir des résultats sur un système avec $L = 32$ et $J/t = 0.5$. Il est donné sur la figure VI.8 et est qualitativement similaire au diagramme de phase de la figure figure VI.6. Toutefois, la phase C1S1 est légèrement plus étendue à faible dopage et plus large pour $\delta \simeq 0.5$. L'étude des excitations élémentaires confirme le comportement trouvé et justifie l'ansatz proposé.

Quantification du flux sur un système de taille finie

Discutons brièvement la quantification du flux sur un système de taille finie. Si les conditions périodiques sont utilisées avec la jauge de la figure VI.1, le flux intégré le long d'une chaîne est $\pm\phi/2 \times L$ de sorte qu'il n'y a pas de flux rémanent au travers du *tore* (voir le flux de la figure III.1) si le flux *par plaquette* vérifie

$$\phi = m \frac{4\pi}{L} \quad (\text{VI.30})$$

où m est un entier. De façon équivalente, on peut comprendre cette quantification par celle des vecteurs-d'onde $k = 2\pi m/L$ sur un système de taille finie. Lorsque $t_{\perp} = 0$, les relations de dispersion de chaque chaînes $\cos(k \pm \phi/2)$ donnent une condition identique. On a pu vérifier numériquement qu'en présence de plusieurs particules, c'était bien le cas. D'autre part, il est possible de prendre une autre jauge que celle choisie en considérant un flux sur les barreaux $\phi_{\perp}(x) = \phi x$ et aucun flux le long des chaînes. On peut montrer par changement de jauge que, sur un système de taille finie, les deux jauges ne sont équivalentes que si la condition (VI.30) est satisfaite. Pour des conditions aux bords ouvertes comme c'est le cas en DMRG, on s'attend également à avoir une quantification du flux ne serait-ce qu'en raison de la quantification des vecteurs-d'onde. Pour la plupart des quantités et des paramètres J/t , le choix de $\phi = 2\pi m/L$ donne des résultats qui interpolent correctement les points (VI.30) (voir figure VI.7 par exemple). Cependant, on verra par la suite que les effets de taille finie peuvent s'avérer important et qu'il est plus raisonnable de s'en tenir à (VI.30) dans ce cas. Cette quantification du flux entraîne des effets de taille dont il faut tenir compte dans certaines quantités comme la susceptibilité à champ nul (cf figure VI.17).

²Comme $E_0(\phi) = E_0(2\pi - \phi)$, $j_{\parallel}(\phi) = -j_{\parallel}(2\pi - \phi)$ et donc $j_{\parallel}(0) = j_{\parallel}(\pi) = 0$.

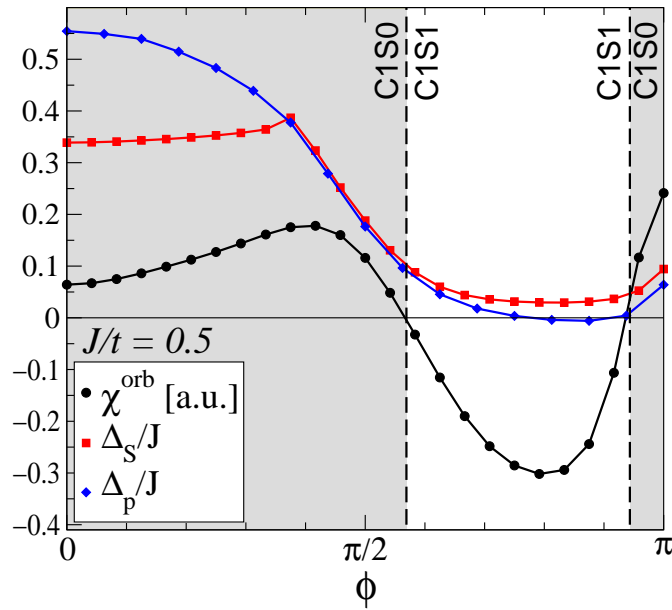


FIG. VI.7: Susceptibilité orbitale, gap de spin et gap de charge pour $J/t = 0.5$ et un faible dopage $\delta = 0.063$. Les zéros de la susceptibilité donnent précisément les transitions de phases. Extrait de la publication [6].

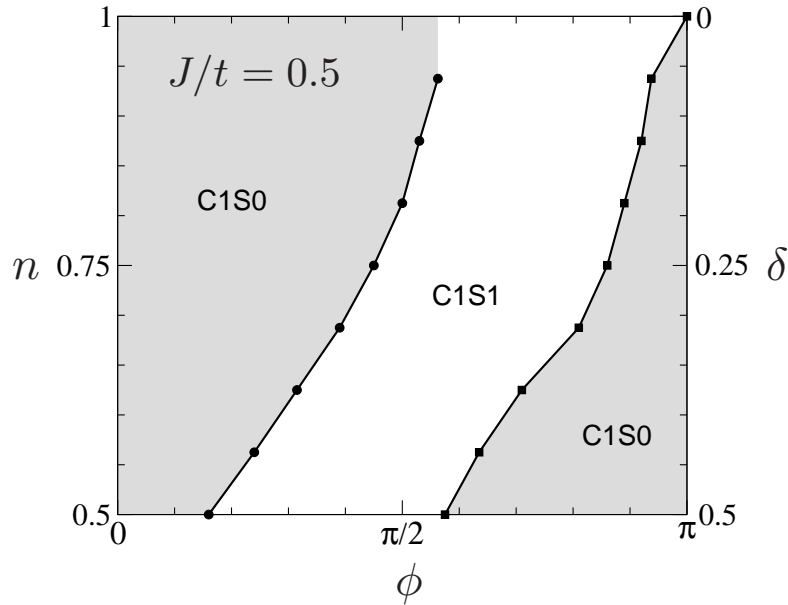


FIG. VI.8: Diagramme de phase du modèle t - J avec $J/t = 0.5$ déterminé par les zéros de la susceptibilité orbitale sur un système de taille $L = 32$. Les corrélations supraconductrices sont dominantes à flux nul. Les résultats sont très similaires à ceux de la figure VI.6, avec une transition vers une phase C1S1 et la réentrée de la phase C1S0 à fort flux. La phase C0S0 indique les phases ondes de densité de liens discutée à la figure VI.19. Extrait de la publication [6].

2.2 Excitations élémentaires

Les excitations élémentaires dans l'échelle dopée comme on l'a vu déjà à plusieurs reprises sont la création d'un magnon, qui coûte le gap de spin Δ_S , et la création de quasi-particules en brisant une paire de trous ce qui coûte Δ_p . Comme précédemment, ces énergies caractéristiques sont définies par

$$\Delta_S = E_0(n_h, S^z = 1) - E_0(n_h, S^z = 0) \quad (\text{VI.31})$$

$$\Delta_p = 2E_0(n_h - 1, S^z = 1/2) - E_0(n_h, S^z = 0) - E_0(n_h - 2, S^z = 0) \quad (\text{VI.32})$$

où $E_0(n_h, S^z)$ est l'énergie du fondamental avec n_h trous et de spin total S^z selon z . On se souvient également qu'on doit vérifier $\Delta_S < \Delta_p$ dans la limite thermodynamique. Ces excitations élémentaires sont rapportées sur la figure VI.7. On observe une décroissance de l'énergie de pairing avec ϕ jusqu'à son annulation qui coïncide avec le début de la phase C1S1. Dans cette dernière, le système est équivalent à une chaîne, i.e. un liquide de Luttinger avec certainement une phase métallique dans laquelle les deux secteurs sont non gappés et les fluctuations CDW dominant puisqu'il n'y a pas d'appariement. Cette annulation de l'énergie d'appariement est donc associée au vidage de la bande u et n'a donc rien à voir avec ce que serait un champ critique supraconducteur H_{c2} associé à la nucléation de la phase supraconductrice.

Le gap de spin, quant à lui, augmente avec ϕ avant de croiser puis suivre Δ_p (voir la figure VI.7). D'après les densités locales de trous, cette augmentation du gap de spin semble être corrélée avec des paires de trous moins étendues et donc un renforcement de la nature de liquide de spin du fondamental. Ce résultat est similaire à ceux de diagonalisation exacte obtenus précédemment [289]. Pour des flux plus grands, Δ_S est en fait confondu avec l'énergie d'appariement en raison de la contrainte rappelée ci-dessus. Les deux quasi-particules deviennent alors l'excitation magnétique de plus basse énergie. Le mode résonnant magnétique doit donc disparaître à flux relativement grand mais est robuste à faible flux. Ainsi, l'ajout d'un terme Zeeman dans l'hamiltonien redonnerait la physique discutée précédemment au chapitre V dans la région $\phi < \pi/3$ pour $J/t = 0.5$. À fort flux $\phi \lesssim \pi$, on retrouve à nouveau un gap de spin en accord avec la réentrée de la phase C1S0 prédite dans la limite de couplage faible. Afin de préciser l'évolution des excitations de spin dans le système, il est utile de calculer les fonctions de corrélations de spin $S(x) = \langle \mathbf{S}(x) \cdot \mathbf{S}(0) \rangle$. Elles sont représentées sur la figure VI.9, et montrent des corrélations sensiblement exponentielles dans les deux phases C1S0 et algébriques dans la phase C1S1, confirmant l'annulation du gap de spin dans cette dernière.

Pour ce qui est des corrélations supraconductrices, on a suivi l'évolution de des corrélations $P(x) = \langle \Delta(x)\Delta^\dagger(0) \rangle$ définies par l'opérateur singulet sur un barreau $\Delta(x) = c_{x,1,\uparrow}c_{x,2,\downarrow} - c_{x,1,\downarrow}c_{x,2,\uparrow}$ en fonction du flux. On trouve un comportement algébrique dans les phases C1S0 et C1S1, mais avec une amplitude qui diminue conjointement à la diminution de l'appariement (voir figure VI.10). D'autre part, on observe une évolution des contributions relatives à $q = 0$ et à $q = 4k_F$. Enfin, la phase C1S0 à fort flux possède des fluctuations différentes de celle à faible flux en raison de la présence de vitesses de Fermi négatives pour deux des quatre points de Fermi. Fabrizio a montré [169] qu'on avait dans ce cas compétition entre la phase supraconductrice et une phase avec des fluctuations de dimères (et non plus de densité). Cette dernière semble dominer à fort flux compte-tenu que l'exposant des corrélations supraconductrices reste grand.

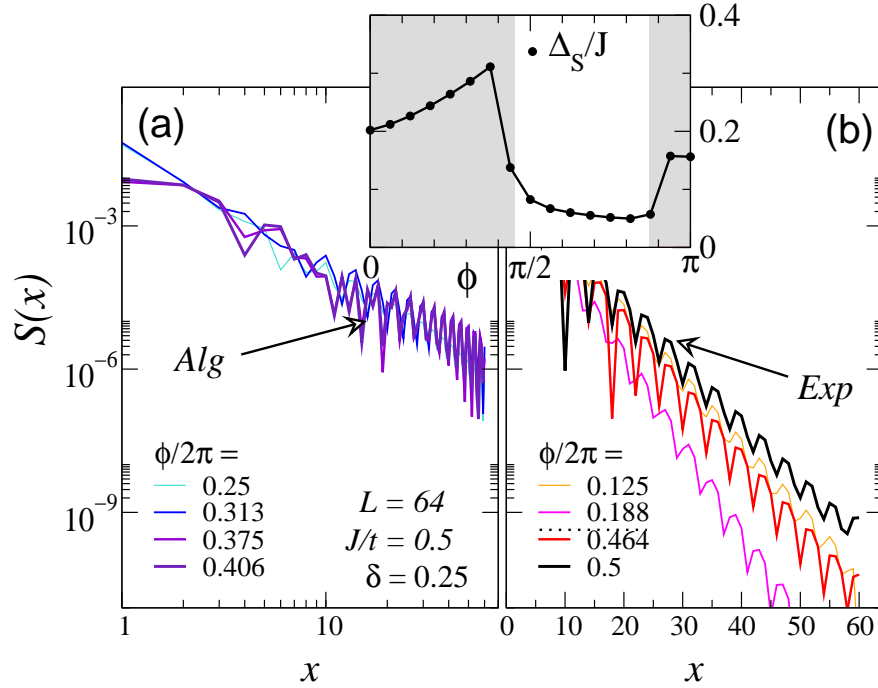


FIG. VI.9: Corrélations de spin pour un flux croissant, d'après les résultats sur un système de taille $L = 64$. Insert : gap de spin dans le même système calculé indépendamment par la formule (VI.31). Extrait de la publication [6].

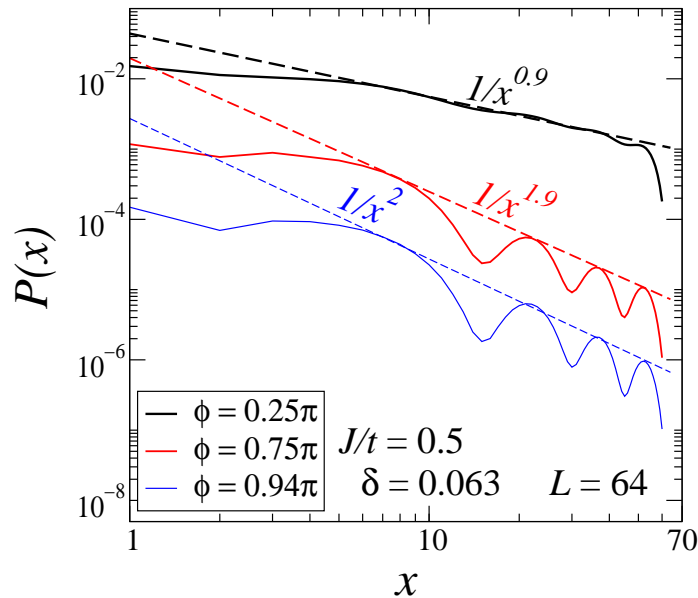


FIG. VI.10: Corrélations supraconductrices pour un flux croissant. Elles demeurent algébriques avec un exposant qui augmente avec le flux et une contribution à $q = 0$ qui diminue. L'amplitude des oscillations est fortement réduite à mesure que l'énergie d'appariement diminue. Dans la phase C1S0 à fort flux, les corrélations supraconductrices sont sous-dominantes. Extrait de la publication [6].

Bosonisation

La linéarisation des bandes dans la procédure de bosonisation se fait en utilisant le changement de base (VI.8) vu précédemment :

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} \begin{pmatrix} a_k & b_k \\ b_k & -a_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k,d} \\ c_{k,u} \end{pmatrix},$$

où l'indice de spin est omis pour simplifier. On notera $\psi_{R/L,d/u}$ les fermions « droits » et « gauches » dans chacune des bandes. On simplifie la notation des différents niveaux de Fermi en $k_{F,d} \equiv k^d$ et $k_{F,u} \equiv k^u$. D'après (VI.9) et (VI.10), on a $a_{-k^d/u} = b_{k^d/u} \equiv b^{d/u}$ et $b_{-k^d/u} = a_{k^d/u} \equiv a^{d/u}$. La forme des opérateurs bosonisés dépend du nombre de points de Fermi dans le système. Dans les phases C1S0 avec quatre points de Fermi, on a

$$\begin{aligned} c_1(x)/\sqrt{a} &\rightarrow a^d e^{ik^d x} \psi_{d,R}(x) + b^d e^{-ik^d x} \psi_{d,L}(x) + b^u e^{ik^u x} \psi_{u,R}(x) + a^u e^{-ik^u x} \psi_{u,L}(x) \\ c_2(x)/\sqrt{a} &\rightarrow b^d e^{ik^d x} \psi_{d,R}(x) + a^d e^{-ik^d x} \psi_{d,L}(x) - a^u e^{ik^u x} \psi_{u,R}(x) - b^u e^{-ik^u x} \psi_{u,L}(x) \end{aligned}$$

où

$$\psi_{p,r,\sigma} = \frac{\eta_{p,\sigma}^r}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i\epsilon_r \phi_{r,p,\sigma}}$$

avec le cutoff α (qui n'est pas t_\perp/t_\parallel !), $r = R/L$, $p = d/u$ et $\epsilon_{R/L} = \mp 1$. $\eta_{p,\sigma}^r$ sont les facteurs de Klein. Les champs bosoniques sont introduits comme au chapitre II

$$\phi_{p,\sigma} = [\phi_{L,p,\sigma} + \phi_{R,p,\sigma}]/2 \quad (\text{VI.33})$$

$$\theta_{p,\sigma} = [\phi_{L,p,\sigma} - \phi_{R,p,\sigma}]/2, \quad (\text{VI.34})$$

puis avec les modes de charge et de spin pour les champ ϕ

$$\phi_{c,p} = [\phi_{p,\uparrow} + \phi_{p,\downarrow}]/\sqrt{2} \quad (\text{VI.35})$$

$$\phi_{s,p} = [\phi_{p,\uparrow} - \phi_{p,\downarrow}]/\sqrt{2} \quad (\text{VI.36})$$

et de même pour les θ . Enfin, la description utilise les combinaisons \pm usuelles

$$\phi_{c/s,\pm} = [\phi_{c/s,d} \pm \phi_{c/s,u}]/\sqrt{2}. \quad (\text{VI.37})$$

Les paramètres de Luttinger correspondant seront notés $K_{c/s\pm}$ dans chacun des secteurs.

Dans le cas où l'on n'a que deux points de Fermi avec $n < 1$, seule la bande d est remplie ce qui donne alors

$$\begin{aligned} c_1(x)/\sqrt{a} &\rightarrow a^d e^{ik^d x} \psi_{d,R}(x) + b^d e^{-ik^d x} \psi_{d,L}(x) \\ c_2(x)/\sqrt{a} &\rightarrow b^d e^{ik^d x} \psi_{d,R}(x) + a^d e^{-ik^d x} \psi_{d,L}(x). \end{aligned}$$

Les paramètres de Luttinger des deux modes sont alors simplement décrits par K_c et K_s .

Enfin, dans la phase C1S0 à fort flux, en notant $k_{F,1,d} \equiv k_1 \neq k_{F,2,d} \equiv k_2$, on obtient :

$$\begin{aligned} c_1(x)/\sqrt{a} &\rightarrow a_1 e^{ik_1 x} \psi_{1,R}(x) + b_1 e^{-ik_1 x} \psi_{1,L}(x) + a_2 e^{ik_2 x} \psi_{2,R}(x) + b_2 e^{-ik_2 x} \psi_{2,L}(x) \\ c_2(x)/\sqrt{a} &\rightarrow b_1 e^{ik_1 x} \psi_{1,R}(x) + a_1 e^{-ik_1 x} \psi_{1,L}(x) + b_2 e^{ik_2 x} \psi_{2,R}(x) + a_2 e^{-ik_2 x} \psi_{2,L}(x), \end{aligned}$$

avec des expressions similaires pour les opérateurs de Fermi $\psi_{p,r}(x)$.

Revenons aux corrélations supraconductrices dans la phase C1S0 à faible flux avec le terme à $q = 0$

$$\Delta(x) = \sum_{\sigma} \sigma [(a^d)^2 \psi_{dR,\sigma} \psi_{dL,-\sigma} + (b^d)^2 \psi_{dL,\sigma} \psi_{dR,-\sigma} - (b^u)^2 \psi_{uR,\sigma} \psi_{uL,-\sigma} - (a^u)^2 \psi_{uL,\sigma} \psi_{uR,-\sigma}]. \quad (\text{VI.38})$$

La phase C1S0 à faible flux est telle que ϕ_{p+} est le seul champ non gappé, avec par ailleurs $\langle \theta_{p-} \rangle = 0$, $\langle \phi_{\sigma+} \rangle = \pi/2$, $\langle \phi_{\sigma-} \rangle = \pi/2$. Les termes intra-bandes valent

$$\psi_{p,R,\sigma} \psi_{p,L,-\sigma} \sim e^{i[\theta_{c+} + p\theta_{c-} - \sigma(\phi_{s+} + p\phi_{s-})]}, \quad (\text{VI.39})$$

et décroissent donc algébriquement avec un exposant $1/(2K_{c+})$ dans la phase C1S0 et qui augmente légèrement avec le flux. Dans la phase C1S1, les corrélations supraconductrices ont un exposant $K_c^{-1} + K_s$ mais une amplitude plus petite. Enfin, du fait que les coefficients a, b dépendent du remplissage et du flux dès lors que le champ magnétique est branché, on s'attend à ce que les contributions à $q = 0$ et à $q = 4k_F$ évoluent suivant ces deux paramètres.

2.3 Courants locaux et corrélations de courant transverse

Grâce aux conditions ouvertes utilisées en DMRG, on a accès à la densité locale de trous $h(x) = 1 - n(x)$ dont on préfère représenter l'écart à la valeur moyenne pour faire apparaître les oscillations de Friedel, et également les densités locales de courants. Pour ces dernières, on a les définitions

$$j_{1,\parallel}(x) = it_{\parallel} \langle e^{i\phi/2} c_{x+1,1,\sigma}^{\dagger} c_{x,1,\sigma} - e^{-i\phi/2} c_{x,1,\sigma}^{\dagger} c_{x+1,1,\sigma} \rangle \quad (\text{VI.40})$$

$$j_{2,\parallel}(x) = it_{\parallel} \langle e^{-i\phi/2} c_{x+1,2,\sigma}^{\dagger} c_{x,2,\sigma} - e^{i\phi/2} c_{x,2,\sigma}^{\dagger} c_{x+1,2,\sigma} \rangle \quad (\text{VI.41})$$

$$j_{\perp}(x) = it_{\perp} \langle c_{x,1,\sigma}^{\dagger} c_{x,2,\sigma} - c_{x,2,\sigma}^{\dagger} c_{x,1,\sigma} \rangle. \quad (\text{VI.42})$$

Les lois de Kirchhoff sur la conservation du courant sont bien vérifiées numériquement à chaque vertex. À flux nul, il n'y a pas de courants locaux dans l'échelle dans la phase C1S0. En présence de flux, des courants naissent en raison de la brisure de la symétrie de renversement du temps. Les valeurs moyennes des densités locales sont données sur la figure VI.11 dans une échelle 2×32 avec quatre trous. Les deux domaines de forte densité de trous traduisent l'étendue des paires de trous. Les orbites des courants d'écrantage locaux se développent au sein de ces domaines plutôt qu'aux « bords » du réseau. Cela se comprend bien compte-tenu de la contrainte de simple occupation existante dans la limite de couplage fort : les électrons ne peuvent tirer avantage du flux que sur les sites laissés vacants par les trous. Ainsi, la longueur caractéristique associée à ces orbites est exactement δ^{-1} ($= 16$ sur la figure VI.11) et n'est donc pas contrôlée par l/a . Une longueur caractéristique identique a été trouvée dans l'étude de la phase OAF du modèle de Hubbard généralisé dans les échelles de spins [181]. Il est important de préciser que ces courants orbitaux ne sont pas reliés à l'effet Meissner attendu dans un supraconducteur [288]. En effet, les paires de trous sont délocalisées sur les deux montants : ces courants se réfèrent plus à des courants à l'intérieur des paires plutôt que des courants *de paires*. D'autre part, les corrélations de courants transverses nous

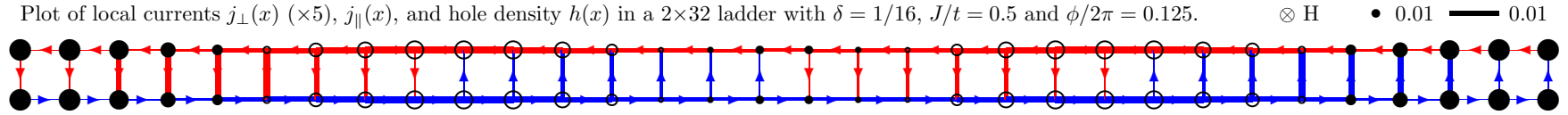


FIG. VI.11: *Courants locaux et écart à la densité moyenne (les cercles ouverts représentent des trous). Ici, la figure correspond aux paramètres de la phase C1S0 supraconductrice pour une faible densité de trous. Extrait de la publication [6].*

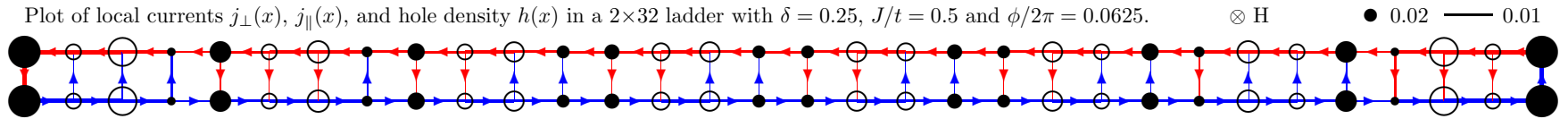


FIG. VI.12: *Même figure que ci-dessus pour une densité plus grande.*

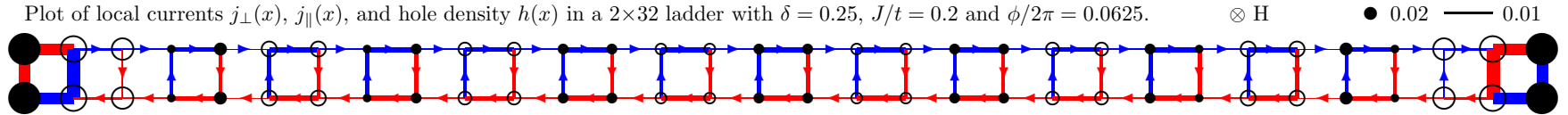


FIG. VI.13: *La phase commensurable à $\delta = 1/4$ et faible J/t présente de forts effets de bords et de taille finie.*

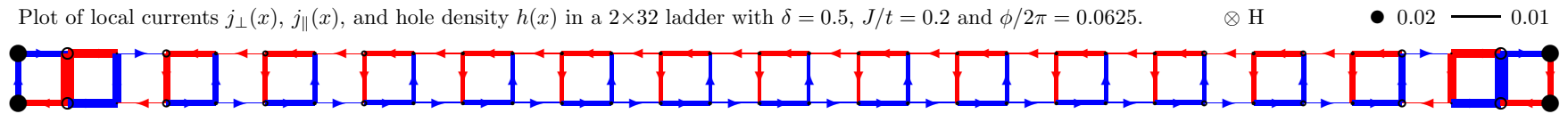


FIG. VI.14: *La phase commensurable à $\delta = 1/2$ présente clairement une « dimérisation » des plaquettes sur lesquelles les courants locaux circulent. Extrait de la publication [6].*

renseignent sur les fluctuations de ces courants. Il faut retirer les valeurs moyennes locales pour en tirer les corrélations connexes définies par

$$J(x) = \langle j_{\perp}(x)j_{\perp}(0) \rangle - \langle j_{\perp}(x) \rangle \langle j_{\perp}(0) \rangle. \quad (\text{VI.43})$$

Ces corrélations de courants sont caractéristiques des fluctuations d'une phase OAF et, comme discuté dans la référence [179], on s'attend à ce que ces corrélations soient exponentielles en raison des grandes fluctuations de spin présentes dans la phase C1S0 (voir le chapitre II et la figure II.16). Nous allons voir que la situation est bien différente ici en raison de la présence du flux qui diminue les symétries de l'hamiltonien et permet donc la présence de termes absents à champ nul. En effet, réécrivons l'opérateur (VI.42) dans la base des bandes d, u

$$j_{\perp}(x) = it_{\perp} \sum_{\sigma} c_{x,u}^{\dagger} c_{x,d} - c_{x,d}^{\dagger} c_{x,u}, \quad (\text{VI.44})$$

puis sous sa forme bosonisée aux vecteurs d'onde les plus bas

$$\begin{aligned} j_{\perp}(x) = & it_{\perp} \left[(a_u^2 - b_u^2) [e^{-2ik_u x} \psi_{R,u,\sigma}^{\dagger} \psi_{L,u,\sigma} - e^{2ik_u x} \psi_{L,u,\sigma}^{\dagger} \psi_{R,u,\sigma}] \right. \\ & + (a_d^2 - b_d^2) [e^{-2ik_d x} \psi_{R,d,\sigma}^{\dagger} \psi_{L,d,\sigma} - e^{2ik_d x} \psi_{L,d,\sigma}^{\dagger} \psi_{R,d,\sigma}] \\ & + (b_u a_d + a_u b_d) [e^{-i(k_d+k_u)x} (\psi_{R,u,\sigma}^{\dagger} \psi_{L,d,\sigma} - \psi_{R,d,\sigma}^{\dagger} \psi_{L,u,\sigma}) \\ & + e^{i(k_d+k_u)x} (\psi_{L,u,\sigma}^{\dagger} \psi_{R,d,\sigma} - \psi_{L,d,\sigma}^{\dagger} \psi_{R,u,\sigma})] \\ & + (b_u b_d + a_u a_d) [e^{-i(k_u-k_d)x} (\psi_{R,u,\sigma}^{\dagger} \psi_{R,d,\sigma} - \psi_{L,d,\sigma}^{\dagger} \psi_{L,u,\sigma}) \\ & \left. + e^{i(k_u-k_d)x} (\psi_{L,u,\sigma}^{\dagger} \psi_{L,d,\sigma} - \psi_{R,d,\sigma}^{\dagger} \psi_{R,u,\sigma}) \right] \end{aligned} \quad (\text{VI.45})$$

Les termes dans (VI.45) associés au plus petit vecteur d'onde $q = k^d - k^u$ contiennent des contributions

$$\psi_{u,R,\sigma}^{\dagger} \psi_{d,R,\sigma} \sim e^{i[-\phi_{c-} + \theta_{c-} - \sigma(\phi_{s-} - \theta_{s-})]} \quad (\text{VI.46})$$

avec l'indice de spin $\sigma = (\uparrow, \downarrow) = \pm$. Dans la phase C1S0, elles sont donc à courte portée en raison de la présence de θ_{s-} et ϕ_{c-} . Les termes à $q = k^d + k^u$ comportent eux des opérateurs

$$\psi_{u,R,\sigma}^{\dagger} \psi_{d,L,\sigma} \sim e^{i[\phi_{c+} + \theta_{c-} + \sigma(\phi_{s+} + \theta_{s-})]} \quad (\text{VI.47})$$

qui sont également à courte portée du fait de θ_{s-} . C'est en fait jusque-là la continuité des résultats de la référence [179] à flux fini et aux préfacteurs près. Les calculs DMRG à flux nul montrent que le vecteur d'onde associé à la contribution dominante, bien qu'exponentielle, est $k^0 + k^{\pi}$ et pas $k^0 - k^{\pi}$ (voir chapitre II et [179]), probablement car deux champs fortement fluctuant interviennent dans le premier terme conduisant à une longueur de corrélation plus courte. Cependant, on se rend compte que le terme intra-bande a un préfacteur

$$(b^p)^2 - (a^p)^2 \propto \phi$$

à petit flux ϕ , c'est-à-dire que ce terme s'annule à flux nul mais existe dès que le champ magnétique est branché. De plus, on trouve pour ce terme

$$\psi_{p,R,\sigma}^{\dagger} \psi_{p,L,\sigma} \sim e^{i[\phi_{c+} + p\phi_{c-} + \sigma(\phi_{s+} + p\phi_{s-})]}, \quad (\text{VI.48})$$

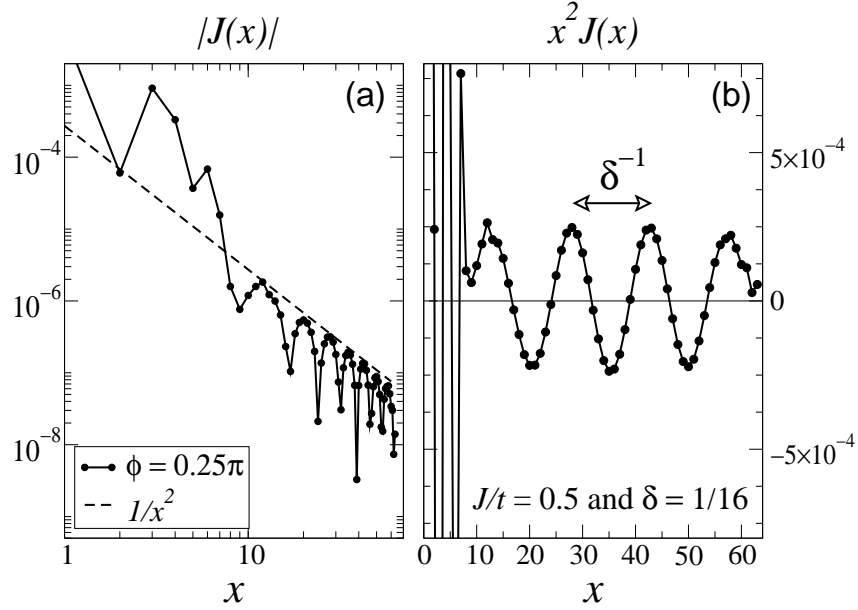


FIG. VI.15: Les corrélations de courant transverses décroissent algébriquement dès que le champ magnétique est branché. La démodulation du signal permet de mettre en évidence le vecteur d'onde $2\pi\delta$ des corrélations avec ici $\delta = 1/16$. Extrait de la publication [6].

qui n'est pas sensible au gap de spin mais devrait être à courte portée à cause de ϕ_{c-} .

Dans l'expression (VI.45), on n'a pas tenu compte des termes à $4k_F$. Ces termes sont proportionnels à $c_{3k_F}^\dagger c_{-k_F}$. Lors de la bosonisation, on introduit un cutoff dans les moments et ne sont prises en compte que la création et l'annihilation de fermions proches du niveau de Fermi. À l'ordre le plus bas en U/t , ce cutoff tue les contributions à $4k_F$. Aux ordres plus élevés en U/t , les opérateurs ont des corrections perturbatives faisant intervenir des processus virtuels loin du niveau de Fermi. En particulier, une interaction de la forme $U c_{k_F}^\dagger c_{k_F}^\dagger c_{-k_F} c_{3k_F}$ qui implique l'annihilation d'un fermion à $3k_F$ donne une correction

$$U/t c_{k_F}^\dagger c_{k_F}^\dagger c_{-k_F} c_{-k_F} \quad (\text{VI.49})$$

à la composante $4k_F$ du courant. Cette forme ne contient que des opérateurs fermioniques proches du niveau de Fermi et n'est pas tuée par le cutoff. Les contributions (VI.49) peuvent être interprétées comme des sauts de paires corrélés entre les chaînes. Ainsi, les corrélations de courant ont des termes à $4k_F$ du type

$$\psi_{d,R,\sigma}^\dagger \psi_{d,L,\sigma} \psi_{u,R,\sigma}^\dagger \psi_{u,L,\sigma} \sim e^{i2\phi_{c+}}, \quad (\text{VI.50})$$

qui sont associés au vecteur d'onde $2(k^d + k^u) = 2\pi(1 - \delta) = 2\pi\delta$. Les corrélations $\langle j_{\perp,4k_F}(x) j_{\perp,4k_F}(0) \rangle$ ont donc une décroissance algébrique avec un exposant $2K_{c+}$. Ce résultat est similaire à celui des ondes de densité de charge dont les corrélations $\langle n(x)n(0) \rangle$ contiennent un terme exponentiel à $2k_F$, mais aussi un terme algébrique à $4k_F$ [137]. Les opérateurs CDW ont d'ailleurs des termes analogues à (VI.46, VI.47, VI.48) mais avec d'autres préfacteurs.

Operator	in the C1S0 phase	
	exponent	wave-vector
$S^z(x)$	exp.	$2k_F$
$\Delta(x)$	$1/(2K_{c+})$	0
$n_{2k_F}(x)$	exp.	$2k_F$
$n_{4k_F}(x)$	$2K_{c+}$	$4k_F$
$j_{\perp,2k_F}(x)$	exp.	$2k_F$
$j_{\perp,4k_F}(x)$	$2K_{c+}$	$4k_F$

TAB. VI.1: *Résumé des prédictions de bosonisation et des résultats numériques pour les principaux paramètres d'ordre dans la phase C1S0 à faible flux. On a $2k_F = \pi n$ dans les deux phases. Si les corrélations sont à courte portée, on les note par « exp. ». Si elles sont algébriques, on donne l'exposant de décroissance. Numériquement, les corrélations $\langle n(x)n(0) \rangle$ et $\langle j_{\perp}(x)j_{\perp}(0) \rangle$ sont algébriques en raison des termes à $4k_F$ (voir le texte pour la discussion).*

On trouve bien numériquement un comportement algébrique pour ces corrélations avec le vecteur d'onde $2\pi\delta$ comme montré sur la figure VI.15. Ainsi, la longueur d'onde δ^{-1} de ces corrélations est elle-aussi contrôlée par le dopage en trou. De manière approximative, on déduit $K_{c+} \sim 1$ des corrélations de courant tandis que les corrélations supraconductrices donnent plutôt $K_{c+} \sim 0.6$ pour les mêmes paramètres. Une différence similaire est trouvée avec les corrélations CDW [177] (voir la figure II.16). Cette sous-estimation des corrélations à $4k_F$ pourrait provenir de l'origine perturbative de ces contributions. Le comportement des différents opérateurs dans cette phase est d'ailleurs résumé dans le tableau VI.1.

2.4 Susceptibilité magnétique à champ nul

Expérimentalement, seul un flux par plaquette ϕ très petit par rapport au quantum de flux est accessible. La limite $\phi \rightarrow 0$ est donc à cet égard particulièrement intéressante. On a ainsi calculé numériquement la susceptibilité à champ nul χ_0 d'après l'Eq. (VI.21). On a vu précédemment que cette quantité était finie et augmentait avec le dopage comme indiqué par la figure VI.5.

Si l'on considère l'hamiltonien (VI.4) ou (VI.26) dans la limite $\phi \rightarrow 0$, un développement au deuxième ordre donne :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\phi = 0) - \frac{\phi}{2}(j_1 - j_2) - \frac{\phi^2}{8}(K_1 + K_2), \quad (\text{VI.51})$$

avec $j_{1,2}$ les courants sur les chaînes 1, 2 et $K_{1,2}$ l'énergie cinétique le long de ces chaînes. Le courant diamagnétique total s'écrit donc

$$j_{\parallel} = \frac{1}{2}(j_1 - j_2) + \frac{\phi}{4}(K_1 + K_2). \quad (\text{VI.52})$$

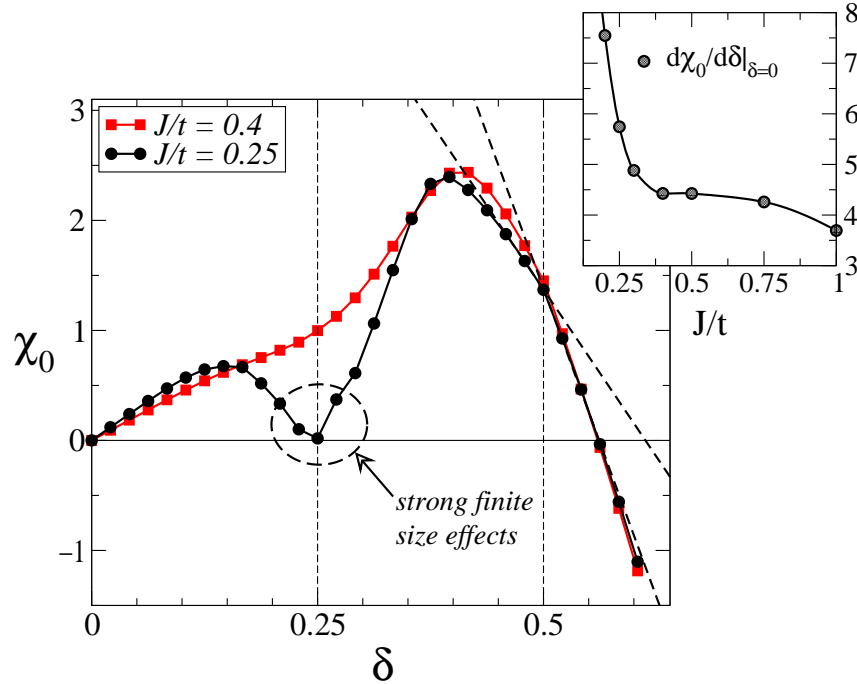


FIG. VI.16: Susceptibilité à champ nul χ_0 en fonction du dopage δ pour deux paramètres d'interactions J/t . Un net décrochement à faible J/t pour $\delta = 1/4$ et une discontinuité de la pente pour $\delta = 1/2$ sont clairement visibles. La susceptibilité est proche de zéro à $\delta = 1/4$ (malgré les forts effets de taille finie, cf figure VI.17) mais reste finie pour $\delta = 1/2$. Encart : La dérivée $d\chi_0/d\delta$ en $\delta = 0$ augmente lorsque J/t diminue. Extrait de la publication [6].

La théorie de la réponse linéaire permet d'écrire la valeur moyenne de ce courant selon

$$\langle j_{\parallel} \rangle = \frac{\phi}{4L} [\langle \langle (j_1 - j_2); (j_1 - j_2) \rangle \rangle + \langle K_1 + K_2 \rangle]. \quad (\text{VI.53})$$

En l'absence de couplage inter-chaînes, ce terme mesurerait exactement la somme des poids de Drude sur chaque chaîne puisque le terme croisé s'annulerait. Avec les lois de Kirchhoff, on remarque que

$$j_1 - j_2 = 2 \int^x j_{\perp}. \quad (\text{VI.54})$$

Ainsi, la susceptibilité à champ nul s'écrit

$$\chi_0 = \frac{1}{L} \left[\int dx \langle j_{\perp}(x) j_{\perp}(0) \rangle + \frac{1}{4} \langle K_1 + K_2 \rangle \right]. \quad (\text{VI.55})$$

Si les corrélations de courants transverses sont négligeables, ce terme se réduit à la valeur moyenne de l'énergie cinétique. Dans ce cas, un isolant aurait une susceptibilité orbitale nulle.

En présence d'interactions, on a un isolant de Mott au demi-remplissage. Le poids de Drude est nul pour cet isolant puisqu'il n'y a pas d'énergie cinétique du fait de la localisation des

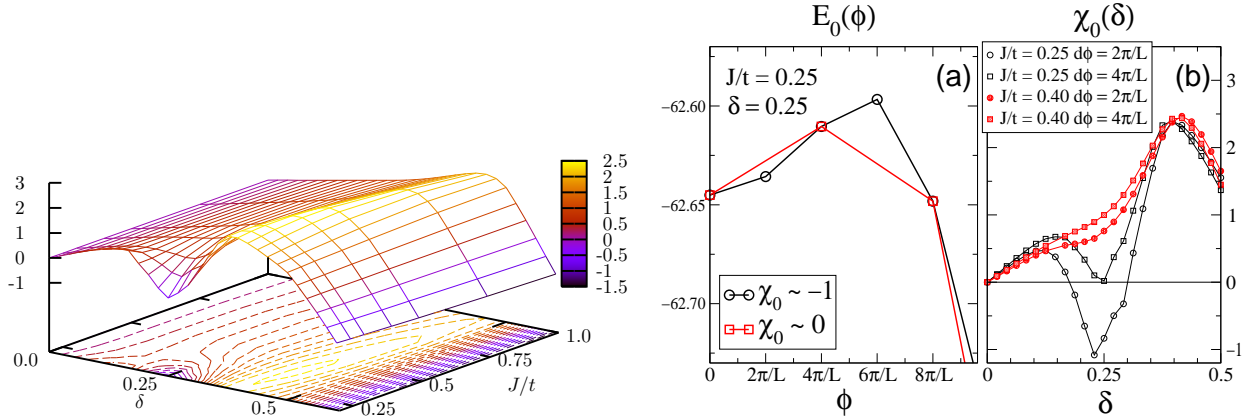


FIG. VI.17: À gauche : susceptibilité à champ nul en fonction du dopage δ de l'interaction J/t . À droite : effets de taille finie suivant le choix du pas de quantification du flux. Extrait de la publication [6].

électrons et que les corrélations de courants sont tuées par le gap de spin comme on l'a vu ci-avant. À faible dopage, des porteurs de charge sont introduits dans les échelles et on observe sur la figure VI.16 un comportement sensiblement linéaire avec le dopage. Qualitativement, proche du demi-remplissage, le poids de Drude vaut $D \propto u_{c+} K_{c+}$ dans la phase C1S0 avec $K_{c+} \simeq 1$ et $u_{c+} \propto \delta$ [6] si bien que, si la contribution des courants est négligeable, on a bien un comportement linéaire. Le coefficient de proportionnalité est reporté dans l'encart de la figure VI.16 qui montre qu'il augmente significativement à mesure que J/t diminue. Les interactions réduisent grandement la susceptibilité à champ nul en comparaison du système libre qui a une susceptibilité finie et augmentant avec le dopage. D'autre part, on observe sur la figure VI.16 une discontinuité de la pente de la courbe vers $\delta = 1/2$ pour $J/t = 0.4$ et 0.25 . De même, un fort décrochement se produit pour $J/t = 0.25$ vers $\delta = 1/4$. Ces effets, comme on va maintenant le préciser, sont associés à la présence de commensurabilités aux dopages $\delta = 1/4$ et $\delta = 1/2$ dans le diagramme de phase du modèle t-J de la figure II.17. La susceptibilité à champ nul χ_0 est par conséquent une sonde intéressante pour détecter ces commensurabilités.

Numériquement, cette quantité est intéressante car elle ne fait intervenir que les énergies des fondamentaux. D'après l'Eq. (VI.21) et en raison de $j_{\parallel}(0) = 0$, cette susceptibilité à champ nul se réduit à

$$\chi_0 = [E_0(2d\phi) - E_0(0)] / (2d\phi^2). \quad (\text{VI.56})$$

Précisons cependant que ce calcul est sensible aux effets de taille finie ainsi qu'aux effets de bords comme on peut le voir sur la figure VI.17. Ces effets sont moins gênants pour $J/t \gtrsim 0.4$ et la figure VI.17 montre que le décrochement à faible J/t et $\delta = 1/4$ suit bien de façon continue le comportement général ce qui laisse penser qu'il n'est pas un artefact du calcul dû aux forts effets de taille finie. Nous allons maintenant préciser la nature de ces phases commensurables dont on voit déjà que leur susceptibilité est différente.

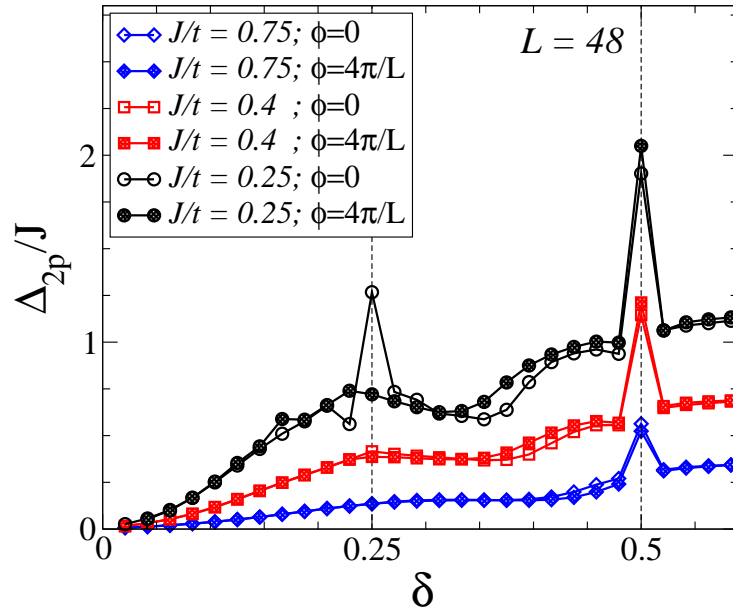


FIG. VI.18: *Gap de charge à deux particules à flux nul et pour un petit flux dans le système montrant de nettes discontinuités à $\delta = 0.5$ et à $\delta = 0.25$ pour $J/t = 0.25$. Un flux de $4\pi/L$ suffit à détruire la discontinuité à $\delta = 0.25$ mettant en évidence le faible gap de charge et de spin de cette phase. On a rajouté 0.3 aux couplages antiferromagnétiques sur les barreaux aux extrémités de l'échelle pour limiter les effets de bord. Extrait de la publication [6].*

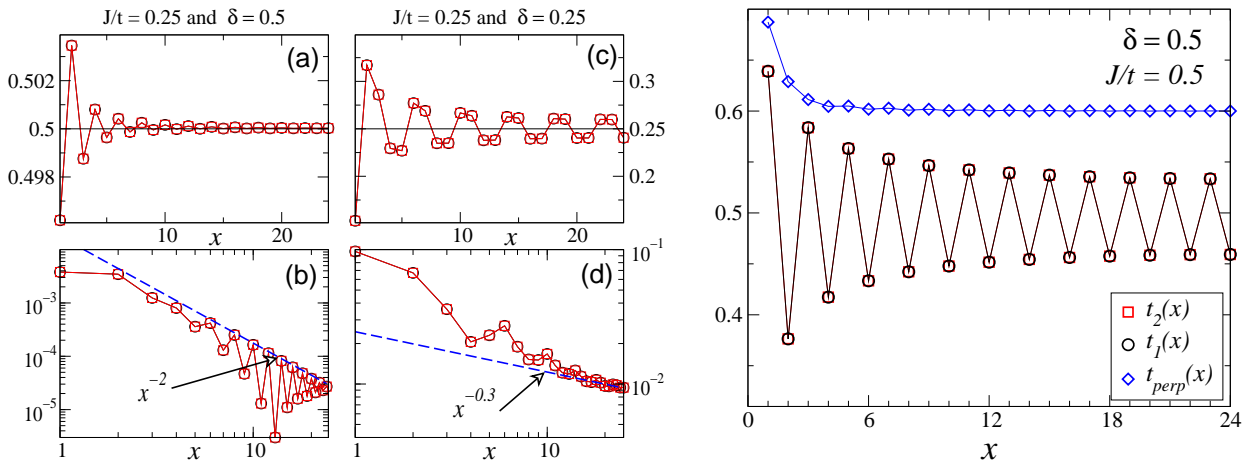


FIG. VI.19: *À gauche : oscillations de Friedel dans les phases CDW. Lorsque $\delta = 0.25$, les oscillations décroissent très lentement et sont presque ordonnées avec une longueur d'onde caractéristique $\lambda = 4$. Au contraire, les oscillations à $\delta = 0.5$ sont à $\lambda = 2$ mais avec une densité électronique quasi-uniforme. À droite, le paramètre d'ordre d'énergie cinétique $t(x)$ le long des montants montre une forte oscillation à π et un quasi-ordre caractéristique d'une onde de densité de liens. Extrait de la publication [6].*

2.5 Nature des phases commensurables à $\delta = 1/4$ et $\delta = 1/2$.

Abordons en premier le cas $\delta = 0.25$. Le paramètre de Luttinger critique pour qu'un gap de charge s'ouvre est $K_{c+} = 1/8 = 0.125$ [137]. Pour ce remplissage $n = 3/4 \in \mathbb{Q}$, le théorème YOA du chapitre II nous indique qu'une brisure spontanée de la symétrie de translation est possible avec un fondamental quatre fois dégénéré. Cela se traduit par des oscillations de Friedel avec une longueur d'onde $\lambda = 4$ comme il a été trouvé [137]. En revanche, le théorème ne pose aucune contrainte sur la partie spin du modèle et, dans l'image où l'on aurait une cristallisation des paires de trous tous les quatre sites, on s'attend à avoir un gap de spin. En effet, appariement des trous et gap de spin vont de paire. Cependant, le gap de spin trouvé numériquement est très petit [137] et difficile à évaluer à cause d'effets de bords importants pour les faibles valeurs de J/t . Pour tenter de limiter la présence de spinons aux bords, on a rajouté 0.3 aux couplages antiferromagnétiques sur les barreaux aux extrémités de l'échelle comme dans la référence [137]. L'apparition d'ondes de densité de charge doit se manifester dans le calcul du gap de charge à deux particules par exemple. Il est reporté à flux nul et pour le flux le plus petit sur la figure VI.18. On voit qu'une discontinuité à $\delta = 0.25$ apparaît pour $J/t = 0.25$. Un faible flux de $4\pi/L$ suffit à déstabiliser cette phase. Sur les densités locales de courants, on observe pour $J/t = 0.5$ la longueur d'onde caractéristique $\delta^{-1} = 4$ tandis qu'elle devient plutôt deux pour un flux fini (voir les figures VI.12 et VI.14). Il en résulte également que cette sensibilité au flux de cette phase rend difficile l'interprétation de la figure VI.16 pour $J/t = 0.25$ au point $\delta = 0.25$. Cependant, en dehors de cette commensurabilité, on observe toujours un décrochement de χ_0 ce qui, bien qu'il y ait beaucoup d'effets de taille finie sur cette courbe, laisse penser que ce décrochement sonde bien cette commensurabilité. Les résultats sont donc cohérents avec un fondamental quatre fois dégénéré pour cette phase et un petit gap de spin. Cependant, l'appariement très faible dans cette phase a pour corollaire une forte sensibilité au flux qui rend difficile la détermination précise de χ_0 .

Passons maintenant au cas $\delta = 0.5$ qui n'a pas été vraiment étudié dans la littérature : en effet, on s'attend à ce que l'existence d'une phase commensurable à $\delta = 0.25$ « facilite » celle à $\delta = 0.5$ qui ne nécessite qu'une valeur critique de K_{c+} relativement grande de 0.5. Toutefois, si on souvient de l'approche de couplage faible de la figure II.14, on voit que $\delta = 0.5$ correspond au vidage de la bande π et donc à la transition C1S0→C1S1. Il n'est donc pas évident de savoir quel effet va l'emporter en couplage fort. Du point de vue du remplissage des bandes, l'argument sur les chaînes faiblement couplées vu à la fin du chapitre II suggère que le t_{\perp} soit renormalisé à une valeur inférieure par les interactions. Ainsi, les deux bandes seraient toujours remplies pour $\delta = 0.5$ et la phase à fort J/t serait toujours une phase C1S0 avec quatre points de Fermi. Lorsque le J/t diminue, on voit une nette discontinuité du gap de charge à deux particules sur la figure VI.18. Il semble donc qu'on ait bien un effet de commensurabilité mais quelle est la nature de cette phase ? Les oscillations de Friedel y décroissent très vite comme le montre la figure VI.19 contrairement à ce qu'il se passe pour $\delta = 0.25$. L'image du fondamental n'est donc pas un état avec une alternance dimère-paire de trous caractérisée par un ordre à π dans la densité locale de charge. Pourtant, le théorème YOA avec ici $n = 1/2 \in \mathbb{Q}$ montre que le fondamental est dégénéré deux fois. On peut regarder numériquement la valeur moyenne du paramètre d'ordre « énergie cinétique

locale » défini sur les différents liens à flux nul par

$$t_{1,\parallel}(x) = t_{\parallel} \langle c_{x+1,1,\sigma}^{\dagger} c_{x,1,\sigma} + c_{x,1,\sigma}^{\dagger} c_{x+1,1,\sigma} \rangle \quad (\text{VI.57})$$

$$t_{2,\parallel}(x) = t_{\parallel} \langle c_{x+1,2,\sigma}^{\dagger} c_{x,2,\sigma} + c_{x,2,\sigma}^{\dagger} c_{x+1,2,\sigma} \rangle \quad (\text{VI.58})$$

$$t_{\perp}(x) = t_{\perp} \langle c_{x,1,\sigma}^{\dagger} c_{x,2,\sigma} + c_{x,2,\sigma}^{\dagger} c_{x,1,\sigma} \rangle. \quad (\text{VI.59})$$

La figure VI.19 montre clairement une forte oscillation à π de $t_{1,2}(x)$ tandis que t_{\perp} demeure uniforme. L'image physique est donc plutôt celle de paires de trous résonnant sur chaque plaquette avec un dimère. On s'attend dans ce cas à une densité électronique uniforme ainsi qu'un gap de spin. La susceptibilité de cette phase est finie comme le montre la figure VI.16 en raison de la réponse locale sur plaquette qui est manifeste lorsqu'on regarde la distribution locale de courants de la figure VI.13. Elle montre clairement la double dégénérescence du fondamental.

3 Résultats préliminaires sur les échelles bosoniques avec flux

Cette section présente quelques résultats numériques sur le modèle de bosons de cœur dur sur une échelle avec effet orbital. Ce modèle a été initialement proposé [288] pour étudier l'équivalent unidimensionnel d'un réseau de vortex à deux dimensions. Une réalisation expérimentale possible serait de construire un réseau de jonctions Josephson en forme d'échelle à travers lequel on puisse faire passer un champ. Les flux alors accessibles seraient nettement plus grands que dans les cuprates puisque le pas du réseau est cette fois de l'ordre de $a \simeq 1\mu\text{m}$. Une autre motivation est d'aborder la question de la réalisation d'une phase de vortex dans les échelles en utilisant un modèle effectif de bosons de cœur sur une chaîne pour décrire les paires de trous sur les échelles [180] : deux échelles couplées reviennent alors à un modèle d'échelles de bosons de cœur dur bien que cela néglige la circulation locale des courants sur les échelles vue précédemment.

3.1 Modèle et prédictions de bosonisation

Le modèle étudié par Orignac et Giamarchi considère les paires de Cooper dans les plots des jonctions Josephson comme des bosons de cœur mou b de charge $e^* = 2e$. Ces bosons ont un terme de sauts $t_{\perp,\parallel}$ entre plots et une répulsion coulombienne U sur site et V_{\perp} entre chaînes ce qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -t_{\parallel} \sum_{i,p=1,2} (b_{i+1,p}^{\dagger} e^{ie^* a A_{\parallel,p}(i)} b_{i,p} + b_{i,p}^{\dagger} e^{-ie^* a A_{\parallel,p}(i)} b_{i+1,p}) \\ & -t_{\perp} \sum_i (b_{i,2}^{\dagger} e^{ie^* A_{\perp}(i)} b_{i,1} + b_{i,1}^{\dagger} e^{-ie^* A_{\perp}(i)} b_{i,2}) \\ & + U \sum_{i,p} n_{i,p} (n_{i,p} - 1) + V_{\perp} n_{i,1} n_{i,2} \end{aligned} \quad (\text{VI.60})$$

où $n_{i,p} = b_{i,p}^\dagger b_{i,p}$ est la densité de bosons et le potentiel vecteur A dépend de la jauge choisie. Comme vu au chapitre II, les bosons se bosonisent selon

$$\frac{b_n}{\sqrt{a}} \rightarrow \frac{e^{i\theta_p(x)}}{\sqrt{2\pi a}}, \quad (\text{VI.61})$$

ce qui donne

$$\mathcal{H} = \sum_{p=1,2} \int \frac{dx}{2\pi} \left[uK(\pi\Pi_p - e^* A_{\parallel,p})^2 + \frac{u}{K}(\partial_x \phi_p)^2 \right] \quad (\text{VI.62})$$

$$- \frac{t_\perp}{\pi a} \int dx \cos(\theta_1 - \theta_2 + e^* A_\perp(x)) \quad (\text{VI.63})$$

$$+ \frac{V_\perp a}{\pi^2} \int dx \partial_x \phi_1 \partial_x \phi_2 + \frac{2V_\perp a}{(2\pi a)^2} \int dx \cos(2\phi_1 - 2\phi_2). \quad (\text{VI.64})$$

Le premier terme est celui de chaîne bosonique de paramètre de Luttinger u, K . Pour les bosons, K peut varier de $K = +\infty$ pour des bosons libres et $K = 1$ pour des bosons de cœur dur (voir le chapitre II). Si des interactions intra-chaînes répulsives sont ajoutées, on peut avoir des valeurs de $K < 1$. L'hamiltonien se simplifie en utilisant les modes symétriques et antisymétriques $\phi_{s,a} = (\phi_1 \pm \phi_2)/\sqrt{2}$ en

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s^0 + \mathcal{H}_a^0 - \frac{t_\perp}{\pi a} \int dx \cos(\sqrt{2}\theta_a + e^* A_\perp(x)) + \frac{2V_\perp a}{(2\pi a)^2} \int dx \cos \sqrt{8}\phi_a \quad (\text{VI.65})$$

où ($\nu = s, a$) :

$$\mathcal{H}_\nu^0 = \int \frac{dx}{2\pi} \left[u_\nu K_\nu (\pi\Pi_\nu - e^* A_\nu)^2 + \frac{u_\nu}{K_\nu} (\partial_x \phi_\nu)^2 \right], \quad (\text{VI.66})$$

avec les nouveaux paramètres de Luttinger

$$u_{s,a} = u \sqrt{1 \pm \frac{V_\perp K}{\pi u}} \quad (\text{VI.67})$$

$$K_{s,a} = K / \sqrt{1 \pm \frac{V_\perp K}{\pi u}} \quad (\text{VI.68})$$

La dynamique du mode symétrique est celle d'un liquide de Luttinger. Pour le mode antisymétrique, le terme $\int dx \cos \sqrt{8}\phi_a$ est pertinent si $K_a < 1$ et Orignac et Giamarchi [288] se placent dans la situation opposée $K_a > 1$ de sorte qu'on peut oublier ce terme. En revanche, le terme $-\int dx \cos \sqrt{2}\theta_a$ (en champ nul) est pertinent si $K_a > 1/4$ et gèle donc le champ θ_a à $\langle \theta_a \rangle = 0$ ouvrant un gap

$$\Delta_a \sim \frac{u}{a} \left(\frac{t_\perp a}{u} \right)^{\frac{1}{2-1/(2K)}} \quad (\text{VI.69})$$

dans le secteur antisymétrique. On se place dans la suite dans la jauge où $A_\nu = 0$ et $A_\perp(x) = \phi x/a$. Les propriétés de courant de cette phase s'obtiennent à partir des expressions des courants j_ν dans les modes ν et j_\perp entre les chaînes

$$j_\nu = uK e^* \sqrt{2}\Pi_\nu \quad (\text{VI.70})$$

$$j_\perp = \frac{e^* t_\perp}{\pi a} \sin(\sqrt{2}\theta_a + e^* A_\perp(x)), \quad (\text{VI.71})$$

où $j_a = j_1 - j_2$ n'est autre que le courant d'écrantage appelé j_{\parallel} dans le section précédente. Dans cette phase, les corrélations $\langle j_{\perp}(x)j_{\perp}(0) \rangle$ sont exponentielles, le courant transverse est nul $\langle j_{\perp} \rangle = 0$, mais le courant d'écrantage est linéaire avec le flux

$$\langle j_a \rangle = -uK \frac{(e^*)^2}{\pi a} \phi, \quad (\text{VI.72})$$

puisqu'à faible champ $\theta_a(x) = -e^* \phi x / (\sqrt{2}a)$. Cette réponse diamagnétique des paires de Cooper n'est autre que l'effet Meissner dont l'image est représentée qualitativement sur la figure VI.20.

Lorsque le champ magnétique est suffisamment fort pour dégeler le champ θ , on a une transition commensurable-incommensurable au-delà d'un flux critique ϕ_c . On a alors dans l'échelle des corrélations transverses de courant algébriques

$$\langle j_{\perp}(x)j_{\perp}(0) \rangle \sim \frac{\cos[2\pi\bar{\rho}_V x]}{x^{1/K_a^*}} \quad (\text{VI.73})$$

où K_a^* est le paramètre de Luttinger renormalisé et $\bar{\rho}_V$ le paramètre d'ordre « densité de vortex » qui est associé à la taille caractéristique des vortex. Il s'agit de phases de fluctuations de vortex où l'on a toujours $\langle j_{\perp} \rangle = 0$.

Cependant, pour des valeurs commensurables du flux $\phi = p/q$, on peut à nouveau geler le champ θ à une des valeurs $\sqrt{2}\langle \theta_a \rangle = 2\pi k/q$ entraînant de nouveau une transition commensurable-incommensurable mais, cette fois, avec une valeur moyenne finie du courant transverse signifiant la brisure spontanée de la symétrie de translation (voir figure VI.20)

$$\langle j_{\perp}(x) \rangle \propto \frac{e^* t_{\perp}}{\pi a} \sin \left[\frac{2\pi k}{q} + \frac{2\pi p x}{q a} \right] \quad (\text{VI.74})$$

avec un fondamental dégénéré q fois. La densité de vortex est alors $\bar{\rho}_V = p/q$. Le critère pour ouvrir un gap pour une telle commensurabilité est $K_a > 4q^2$. L'évolution de la densité de vortex en fonction du flux peut donc être représentée qualitativement comme sur la figure VI.21. On va maintenant essayer d'aborder ces questions par les méthodes numériques.

3.2 Résultats de diagonalisation exacte sur les bosons de cœur dur

Nous avons commencé à étudier le modèle de bosons sur les échelles par la méthode de diagonalisation exacte en choisissant la jauge avec les deux flux le long des chaînes comme dans la première partie afin de préserver l'invariance par translation. L'implémentation de bosons de cœur mou étant coûteuse numériquement, on a opté pour un modèle de bosons de cœur dur ($U = \infty$) qui est similaire à un modèle de spin 1/2 d'après le chapitre II. Comme on a vu qu'il était essentiel d'avoir des valeurs de K les plus grandes possibles pour observer des phases de vortex, on a rajouté une interaction intra-chaîne V_{\parallel} . L'hamiltonien étudié s'écrit donc

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -t_{\parallel} \sum_i \left[e^{i\phi/2} b_{i+1,1}^{\dagger} b_{i,1} + e^{-i\phi/2} b_{i+1,2}^{\dagger} b_{i,2} + h.c. \right] - t_{\perp} \sum_i \left[b_{i,2}^{\dagger} b_{i,1} + H.c. \right] \\ & + V_{\parallel} \sum_{i,\beta=1,2} n_{i+1,\beta} n_{i,\beta} + V_{\perp} \sum_i n_{i,1} n_{i,2} \end{aligned}$$

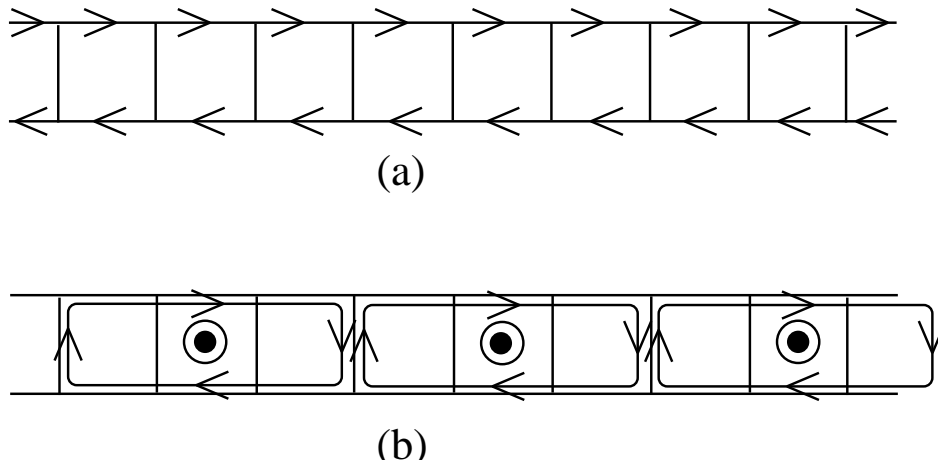


FIG. VI.20: Représentation schématique des courants locaux dans les phases Meissner (a) et dans les phases vortex (b) des échelles bosoniques. D'après Orignac et Giamarchi [288].

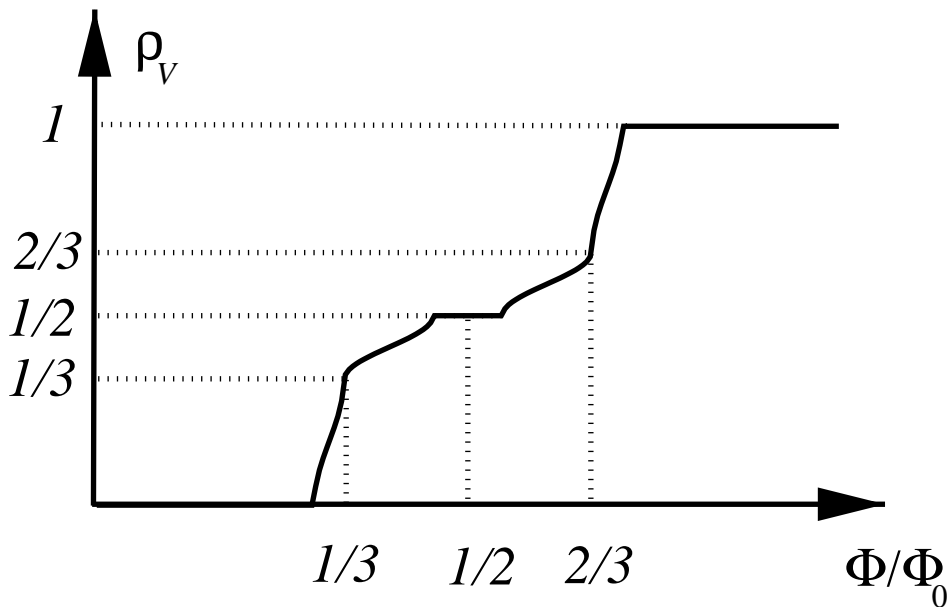


FIG. VI.21: La densité de vortex en fonction du flux présente des plateaux autour des valeurs commensurables. D'après Orignac et Giamarchi [288].

avec les nombre d'occupation et relation de commutation :

$$n_i = b_i^\dagger b_i = 0 \text{ ou } 1, \quad [b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (\text{VI.75})$$

Avant de brancher le champ magnétique, il est utile d'évaluer les K accessibles numériquement. Les deux chaînes en l'absence de couplage inter-chaînes correspondent simplement au modèle XXZ présenté au chapitre II. Dans ce modèle, le paramètre de Luttinger K varie dans la fenêtre $1/4 < K < \infty$ suivant le remplissage et l'interaction. Des valeurs de K strictement supérieure à 1 ne peuvent être obtenues que pour $V_{\parallel} < 0$ et l'exposant diverge au voisinage de la transition vers la phase ferromagnétique. Lorsque seul V_{\perp} est introduit, la formule (VI.68) est exacte et montre une forte augmentation de K_a pour $V_{\perp} > 0$, c'est-à-dire ce qu'on recherche. Ainsi, le seul artefact de notre approche est d'utiliser une valeur négative de V_{\parallel} pour obtenir des valeurs $K > 1$, ce qu'on attend dans un modèle de bosons de cœur mou à U fini. On peut évaluer numériquement les valeurs de $K_{s,a}$ en calculant le poids de Drude

$$D = \frac{L}{4\pi} \frac{\partial^2 E_0}{\partial \phi_{\parallel}^2} \quad (\text{VI.76})$$

et les vitesses $u_{s,a}$. Il faut préciser que ϕ_{\parallel} correspond à un flux à l'intérieur du tore de l'échelle comme sur la figure III.1 et pas à travers l'échelle. La compressibilité inverse est calculée via

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{1}{2L} \frac{E_0(n + \delta n) + E_0(n - \delta n) - 2E_0(n)}{\delta n^2} \quad (\text{VI.77})$$

ce qui permet de vérifier la cohérence de l'évaluation des paramètres de Luttinger que l'on déduit en utilisant

$$D = D(V_{\perp} = 0) = uK = u_{s,a}K_{s,a} \quad \text{et} \quad \kappa^{-1} = K_s/\pi u_s. \quad (\text{VI.78})$$

On a vérifié que le poids de Drude dépendait peu de V_{\perp} , même sur un système de taille finie et que la compressibilité redonnait des valeurs proches pour³ K_s . On a calculé par Ansatz de Bethe les paramètres de Luttinger u, K sur une chaîne seule ce qui permet de connaître les relations (VI.67) et (VI.68) exactement. Un exemple de comparaison est donné sur la figure VI.22 qui montre un accord remarquable à faible V_{\perp} . À plus grand V_{\perp} , une transition se produit où tous les bosons se mettent sur la même chaîne et la détermination du mode symétrique n'est alors plus correcte. Quant au mode antisymétrique, il voit son paramètre de Luttinger K_a croître fortement et dépasser 2.

Nous avons évalué les limites extérieures du diagramme de phase du système en l'absence de champ magnétique au demi-remplissage (un boson tous les deux sites) pour un couplage inter-chaînes fini t_{\perp} avant d'étudier les propriétés sous champ magnétique. Par limites extérieures, on entend les phases obtenues trivialement lorsque les paramètres d'interactions V_{\parallel} et V_{\perp} sont très grands. Quatre phase sont possibles et schématiquement représentées sur la figure VI.23. Les limites ont été évaluées en utilisant le cumulants de Binder [296] U_M associé au paramètre d'ordre M :

$$U_M = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}. \quad (\text{VI.79})$$

³La compressibilité correspond à une perturbation qui se couple à la densité totale $-\mu \int dx(\rho_1(x) + \rho_2(x))$ si bien qu'elle ne sonde que la réponse du mode symétrique.

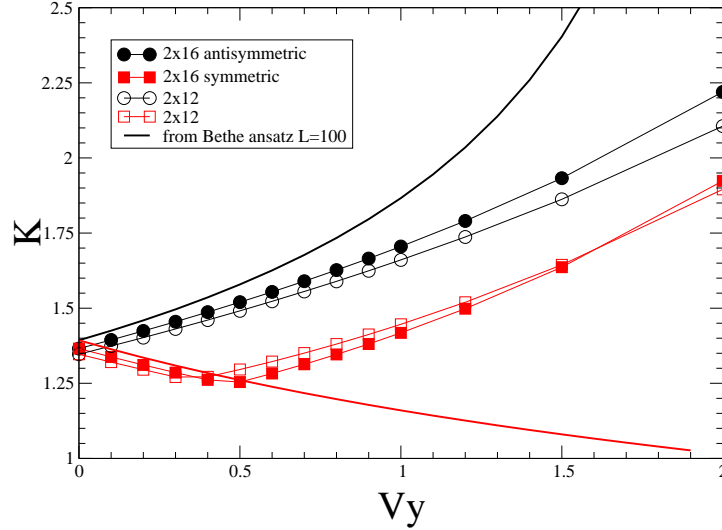


FIG. VI.22: Comparaison entre le calcul numérique des exposants de Luttinger $K_{s,a}$ et la formule (VI.68) en fonction du couplage $V_y = V_\perp$ entre les chaînes. Les paramètres u, K d'une chaîne isolée (à $V_\perp = 0$) sont calculés par Ansatz de Bethe.

Pour calculer le quatrième moment, on utilise plus précisément $\langle M^4 \rangle = \langle M^\dagger M M^\dagger M \rangle$. Si le paramètre d'ordre est ordonné, alors $\langle M^4 \rangle = \langle M^2 \rangle^2$ et $U_M = 2/3$. Si la distribution des moments est une gaussienne centrée autour de $\langle M \rangle = 0$ (phase désordonnée pour M), alors $\langle M^4 \rangle = 3\langle M^2 \rangle$ et $U_M = 0$. Enfin, si le système est au point critique entre les phases ordonnée et désordonnée, alors les moments sont invariants d'échelle et par conséquent U_M l'est aussi. Le cumulants de Binder est donc un outil très puissant pour déterminer les transitions de phase sur des clusters de taille finie L . En effet, les courbes $U_M(L) \ll$ poussent \gg vers $2/3$ dans la phase ordonnée, elles se croisent au point critique et \ll s'écrasent \gg vers le bas dans une phase désordonnée. Pour les phases limites, celles-ci brisent l'invariance par translation ou la réflexion entre les chaînes et le facteur de structure n_q avec $q = (\pi, \pi)$ est un bon indicateur de l'ordre. À l'intérieur de ces limites, on a une phase avec au moins un mode de Luttinger mais nous n'avons pas encore étudié plus en détails la nature des phases présentes. Une étude similaire concernant le modèle XXZ sur les échelles [297].

En présence d'un flux, on peut aussi utiliser le cumulants de Binder pour détecter une phase de vortex qui brise l'invariance par translation en calculant le cumulants de Binder pour $M = J_q$ où J_q est le facteur de structure associé aux corrélations de courant transverse. Cette méthode a été appliquée pour $\phi = \pi$ par Nishiyama pour étudier la présence d'une phase OAF [298]. Des résultats similaires mais pas identiques sont montrés sur la figure VI.24. Une phase avec un ordre est clairement visible pour un couplage V_\perp répulsif juste avant la transition vers la phase où tous les bosons sont sur une chaîne. Le facteur de structure J_q augmente avec la taille mais il est plus difficile de dire s'il va diverger ou converger vers une valeur finie. Le cumulants de Binder est donc plus utile à cet égard. Pour terminer, nous avons trouvé pour des flux intermédiaires multiples de $4\pi/L$, des corrélations transverses de courant montrant un fort ordre qui pourrait être caractéristique de la présence de vortex, c'est-à-dire d'une phase brisant l'invariance par translation avec un ordre dans le courant transverse (voir figure VI.25).

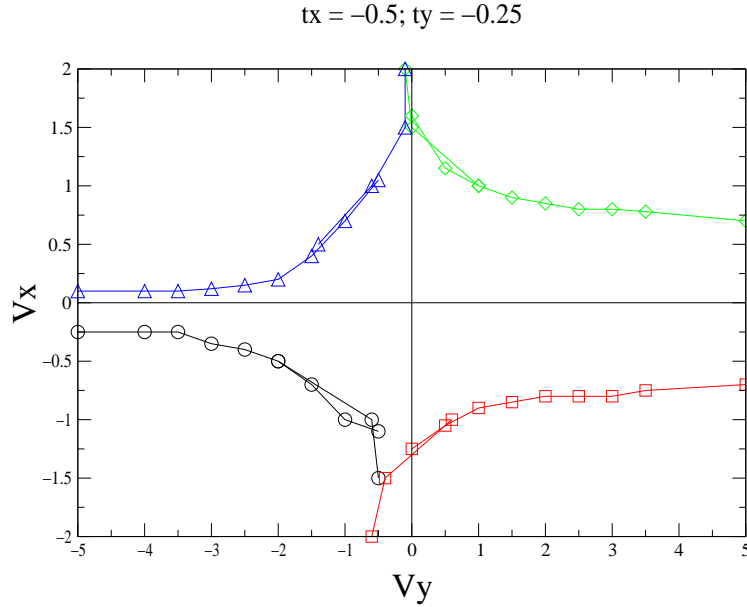


FIG. VI.23: *Limites extérieures des phases triviales du modèle d'échelle de bosons à cœur dur en l'absence de flux. La région où se développent les vortex correspond à $V_{\parallel} \lesssim 0$ et $V_{\perp} \gtrsim 0$.*

4 Conclusion partielle

On a vu au cours de ce chapitre que l'effet orbital du champ magnétique avait un rôle significatif sur la structure de bandes, alors que l'effet Zeeman n'induisait qu'un décalage de ces bandes. En raison de l'évolution des bandes avec le flux, des transitions entre phases C1S0 et C1S1 sont observées avec notamment une réentrance de la phase C1S0 à fort flux. Ce dernier a également une influence sur les paramètres de Luttinger ainsi que sur les différentes contributions aux vecteurs d'onde $q = 0, 2k_F, 4k_F, \dots$ des fonctions de corrélations. En particulier, des corrélations algébriques de courant transverse apparaissent dès que le champ magnétique est branché. De manière intéressante, la longueur caractéristique des orbites est contrôlée par le dopage en trou plutôt que par la longueur magnétique et le pas du réseau. D'autre part, le calcul de la susceptibilité à champ nul permet de mettre en évidence les phases commensurables à $\delta = 1/4$ et $\delta = 1/2$ au travers de ses anomalies. Elle suggère également que les deux phases sont en fait de nature différente, ce qui est confirmé par la mise en évidence d'une phase onde densité de liens pour $\delta = 1/2$ tandis que $\delta = 1/4$ semble être une onde de densité de charge avec de petits gaps.

L'étude de modèles plus simples comme celui de fermions sans spin ou celui bosonique pourrait également s'avérer particulièrement riche comme le suggèrent les résultats de bosonisation [286–288]. En ce sens, les résultats préliminaires obtenus sur le modèle de bosons de cœur dur sont encourageants et devraient être complétés par des calculs DMRG qui permettront d'accéder à de plus grands systèmes.

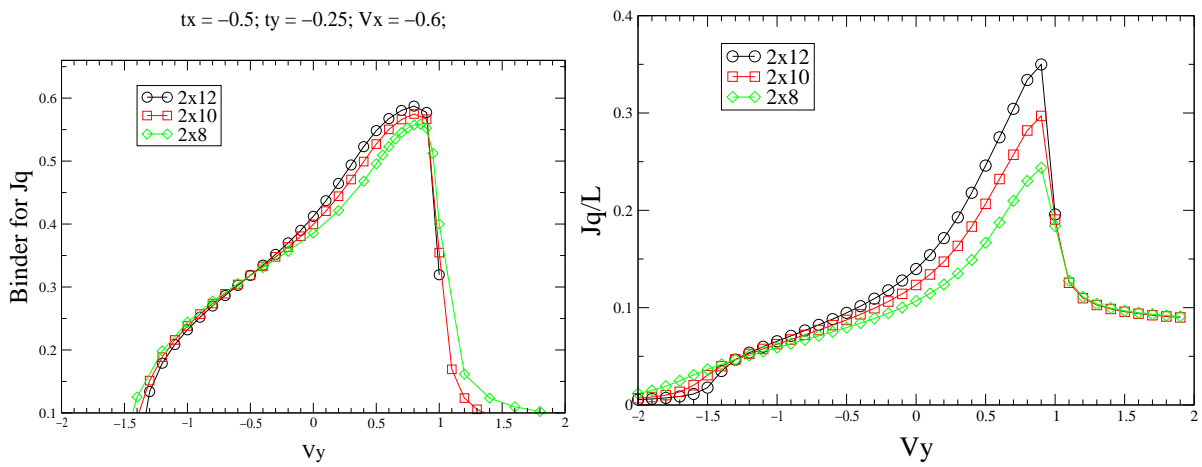


FIG. VI.24: À gauche, cumulants de Binder pour le facteur de structure des courants transverses J_q avec $q = \pi$ et $\phi = \pi$. À droite, le facteur de structure J_q dans la même configuration.

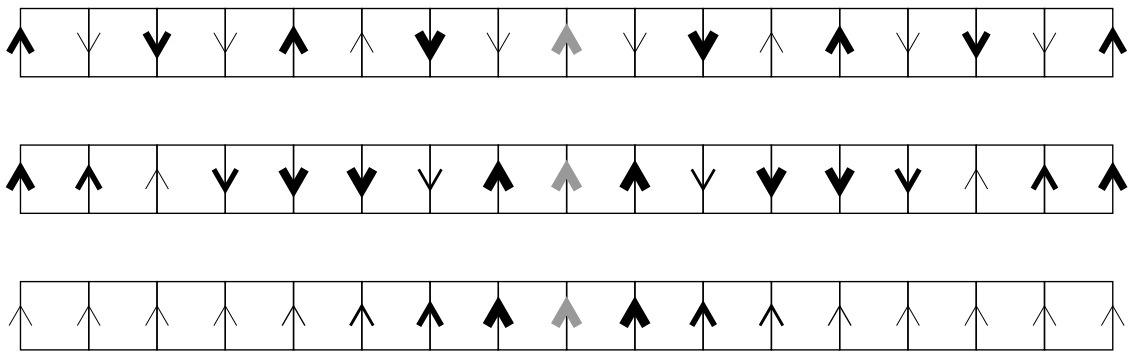


FIG. VI.25: Corrélations de courants transverses signalant la présence de vortex quasi-ordonnés pour un flux augmentant de bas en haut. D'après des calculs de diagonalisation exacte sur une échelle 2×16 . L'épaisseur de la flèche est proportionnelle à la valeur de la corrélation.

Chapitre VII

Modèle de Hubbard de spin 3/2 attractif

Ce chapitre aborde la question du modèle de Hubbard de spin 3/2 à une dimension dont on établira le diagramme de phase pour certaines régions de paramètres. La présentation et la discussion des résultats se fera en utilisant les mêmes concepts propres à la physique quantique unidimensionnelle et une phénoménologie parfois analogue à celle des échelles de spin. Après avoir rappelé les modèles de Hubbard $SU(N)$, leur lien avec les modèles d'échelles et quelques résultats connus dans le cas répulsif, on discutera la possibilité de réalisation expérimentale dans le contexte des gaz d'atomes froids piégés dans des réseaux optiques. Un des points particulièrement intéressant de ces systèmes est la possibilité d'ajuster les interactions sur site à des valeurs positives ou négatives. En physique du solide, il est en effet difficile d'avoir des interactions attractives locales entre fermions. On verra que si le cas $SU(2)$ est bien compris (voir chapitre II) et se résume à une phase BCS de type Luther-Emery à $U < 0$, le cas $SU(4)$ et le modèle plus général de spin 3/2 présentent eux une plus grande diversité de phases observables. On étudiera dans un premier temps le diagramme de phase au quart-remplissage (un atome par site) du modèle de spin 3/2. Puis, le rôle du remplissage fera apparaître une phase superfluide moléculaire (objets liés de quatre fermions) dans le modèle $SU(4)$.

1 hamiltoniens et motivations expérimentales

1.1 Modèle de Hubbard $SU(N)$: le cas répulsif

Le modèle de Hubbard $SU(N)$ est défini par l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i=1}^L \sum_{s=1}^N [c_{i+1s}^\dagger c_{is} + c_{is}^\dagger c_{i+1s}] + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^L \left(\sum_{s=1}^N n_{is} \right)^2 \quad (\text{VII.1})$$

où les opérateurs c_{is}^\dagger sont les opérateurs de création d'un fermion de « couleur » s au site i . Cette couleur peut être un degré de liberté de spin ou un degré de liberté orbital ou un mélange des deux. Ainsi, pour $N = 2$ on retrouve le modèle de Hubbard avec $s = \uparrow, \downarrow$. Si on prend $N = 3$, ce modèle peut être vu comme trois chaînes de fermions sans spin et sans interaction couplées par un terme $V_\perp = U$, s représentant alors l'indice de la chaîne. De manière plus générale, le modèle peut être vue comme N chaînes de fermions sans spin couplées par une interaction $V_\perp = U$ et avec conditions aux bords périodiques dans la direction y . Pour $N = 4$, on peut également voir le modèle comme deux chaînes de Hubbard couplées par une

interaction $V_{\perp} = U$. Le nom du modèle provient de sa symétrie particulière $U(1) \times SU(N)$. $U(1)$ est simplement l'invariance de jauge globale qui entraîne la conservation de la charge. $SU(N)$ concerne les couleurs ou degrés de liberté de spin. L'hamiltonien précédent est en effet invariant selon une rotation R_N de $SU(N)$. Les générateurs de ces rotations sont $N^2 - 1$ matrices \mathcal{T} qui vérifient $[\mathcal{T}^{\alpha}, \mathcal{T}^{\beta}] = i f^{\alpha\beta\gamma} \mathcal{T}^{\gamma}$ où les $f^{\alpha\beta\gamma}$ sont des constantes caractéristiques. C'est la généralisation des matrices de Pauli au cas $N \geq 2$.

Le cas répulsif $U > 0$ a été étudié par Assaraf *et al.* avec un atome par site¹ [299]. Alors qu'un isolant de Mott existe dès que $U > 0$ pour le modèle $SU(2)$, ce qui est compris comme une absence de transition de Mott [14], les cas $N > 2$ présentent une valeur critique U_c pour l'ouverture du gap de charge (voir figure VII.1). Pour $SU(2)$, le gap s'ouvre comme $\exp(-A/U)$ tandis que pour $N > 2$, il s'ouvrirait comme $\exp(-A/\sqrt{U - U_c})$ avec les valeurs $U_c \simeq 2.2t$ pour $N = 3$ et $U_c \simeq 2.8t$ pour $N = 4$. Cette transition est bien entendu due aux processus de umklapp pertinents pour ce remplissage commensurable. Le paramètre de Luttinger du mode de charge K_c vaut 1 pour $U = 0$. La valeur critique de ce K_c pour ouvrir le gap de charge est $2/N$ ce qui semble en accord avec l'existence d'une valeur finie de U pour $N > 2$ mais pas pour $N = 2$. Numériquement, l'interaction répulsive diminue K_c jusqu'à atteindre la valeur critique comme le montre la figure VII.2. Pour ce qui est de la partie spin, $N - 1$ modes bosoniques existent pour $U > 0$ dans les phases métalliques à faible U et dans la phase de Mott.

1.2 Modèle de Hubbard spin 3/2 et atomes froids piégés dans les réseaux optiques

Les atomes froids offrent la possibilité d'étudier des gaz de bosons et de fermions piégés dans des réseaux optiques et par là, de reproduire certaines situations de la physique de la matière condensée. Pour une revue récente, on peut consulter la référence [300]. Les atomes sont confinés dans un piège harmonique dont les dimensions peuvent être anisotropes et obtenir ainsi un confinement quasi-unidimensionnel si l'énergie de Fermi \mathcal{E}_F est très petite devant l'énergie caractéristique du mode transverse $\hbar\omega_{\perp}$. Le réseau optique est créé à l'aide d'ondes stationnaires donnant un potentiel² $V(x, y, z) = V_x \sin^2 k_x x + V_y \sin^2 k_y y + V_z \sin^2 k_z z$ qui permet donc d'obtenir des réseaux 1D, 2D ou 3D à l'intérieur du puits harmonique plus grand. Le pas du réseau est donc $\lambda/2$ avec λ la longueur d'onde des lasers. Les atomes peuvent sauter de site en site par effet tunnel si bien que l'intégrale d'échange peut être contrôlée par la profondeur des puits, c'est-à-dire en ajustant la puissance des lasers. Les interactions entre atomes sont essentiellement locales ce qui correspond bien à un modèle de Hubbard. Cette interaction entre atomes est elle-aussi contrôlable expérimentalement : lorsque deux atomes diffusent l'un sur l'autre, l'interaction effective dépend de la structure interne des niveaux atomiques et va être soit attractive, soit répulsive suivant la forme du potentiel d'interaction. Or, les positions relatives des niveaux dépendent du champ magnétique extérieur et sont donc ajustables : on appelle résonance de Feshbach la fréquence du champ magnétique qui fait passer le système d'un état-lié à un état diffusif pour le potentiel d'interaction, c'est-à-dire le passage d'interactions attractives à répulsives. Enfin, les degrés de liberté internes des

¹Lorsqu'on a un atome par site, le remplissage correspondant est $1/N$ et dépend donc de N .

²La force exercée sur les atomes est d'origine dipolaire et proportionnelle au gradient de l'intensité lumineuse.

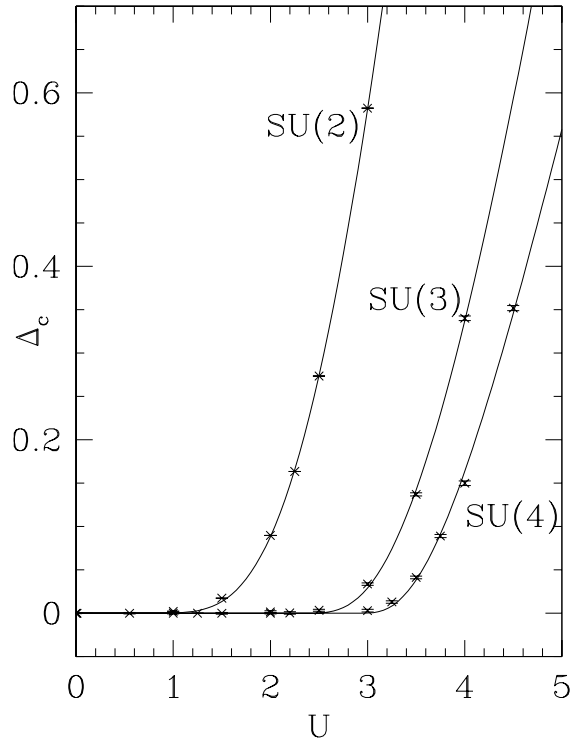


FIG. VII.1: Ouverture du gap de charge dans les modèles $SU(N)$ avec un atome par site ($t = 1$). D'après des calculs de Monte-Carlo quantique par Assaraf et al. [299].

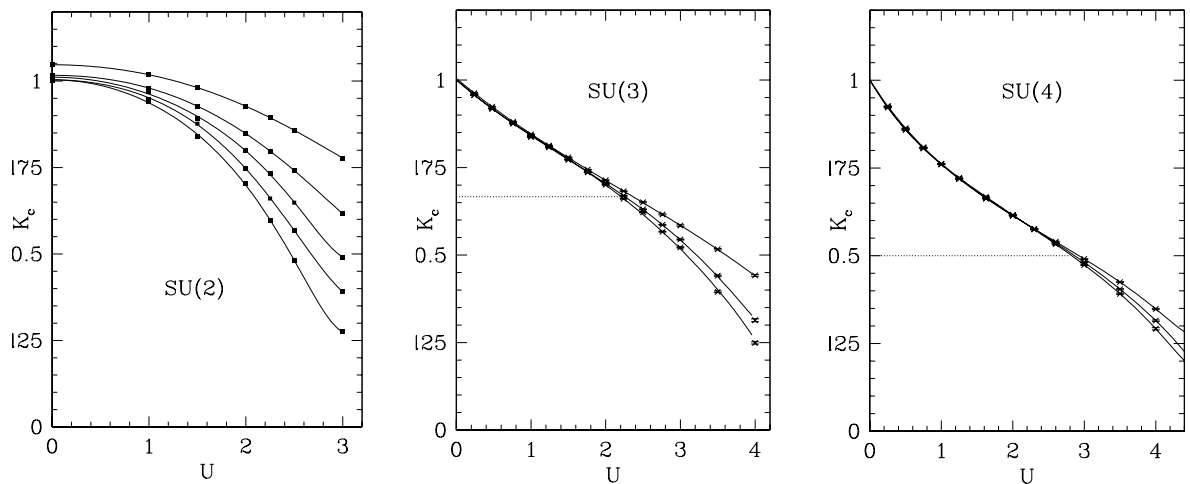


FIG. VII.2: Valeurs de K_c pour les modèles $SU(N)$ montrant le passage par la valeur critique $2/N$ pour $N = 3$ et $N = 4$ à une valeur finie de U ($t = 1$). D'après des calculs de Monte-Carlo quantique par Assaraf et al. [299].

atomes sont les états hyperfins. On peut séparer ces niveaux avec un champ magnétique pour ne conserver à basse énergie qu'un petit nombre de niveaux pertinents et quasi-dégénérés. On pourrait ainsi réaliser le Hubbard avec N couleurs pour $N = 2, 3, 4, \dots$. Cependant, les températures atteintes actuellement pour les gaz fermioniques sont de l'ordre de $0.2\mathcal{E}_F$ ce qui est trop grand pour voir des effets collectifs à N-corps caractéristiques de la physique de basse énergie. Tous les paramètres expérimentaux à ajuster ne sont pas non plus totalement indépendants comme le champ magnétique.

Pour des niveaux hyperfins $F = 3/2$, on a quatre couleurs sur chaque site rendant possible la réalisation du modèle SU(4) pour U positif mais aussi négatif. En réalité, le modèle SU(4) n'est pas le modèle de Hubbard le plus général qui puisse être écrit pour un système de spin 3/2. En effet, pour des spins-1/2, seuls les singulets sur site sont autorisés en vertu du principe de Pauli. Pour des spin 3/2, on peut avoir l'état singulet mais également un état quintuplet (de spin total 2) sur site et a priori l'énergie de répulsion est différente pour chacun de ces états. Cette énergie est noté U_0 pour le singulet et U_2 pour le quintuplet. L'hamiltonien s'écrit ainsi

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i,\alpha} [c_{\alpha,i}^\dagger c_{\alpha,i+1} + \text{H.c.}] + U_0 \sum_i P_{00,i}^\dagger P_{00,i} + U_2 \sum_{i,m} P_{2m,i}^\dagger P_{2m,i}, \quad (\text{VII.2})$$

avec $c_{\alpha,i}^\dagger$ l'opérateur de création d'un fermion dans un des états $\alpha = \pm 1/2, \pm 3/2$. Les opérateurs singulet et quintuplet dans l'Eq. (VII.2) sont définis à l'aide des coefficients de Clebsch-Gordan $P_{JM,i}^\dagger = \sum_{\alpha\beta} \langle JM | \alpha\beta \rangle c_{\alpha,i}^\dagger c_{\beta,i}^\dagger$. Cet hamiltonien peut être réécrit en fonction de l'opérateur densité $n_i = \sum_{\alpha} c_{\alpha,i}^\dagger c_{\alpha,i}$ et de l'opérateur singulet $P_{00,i}^\dagger = P_i^\dagger = c_{\frac{3}{2},i}^\dagger c_{-\frac{3}{2},i}^\dagger - c_{\frac{1}{2},i}^\dagger c_{-\frac{1}{2},i}^\dagger$ ainsi :

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i,\alpha} [c_{\alpha,i}^\dagger c_{\alpha,i+1} + \text{H.c.}] + \frac{U}{2} \sum_i n_i^2 + V \sum_i P_i^\dagger P_i. \quad (\text{VII.3})$$

Les paramètres d'interaction valent alors $U = 2U_2$ et $V = U_0 - U_2$. On retrouve le modèle SU(4) lorsque $U_0 = U_2$, c'est-à-dire $V = 0$. Le modèle a deux paramètres libres, U/t et V/t et nous allons maintenant étudier le diagramme de phase pour $V \leq 0$ pour un atome par site qui correspond donc ici au quart-remplissage.

2 Diagramme de phase au quart-remplissage

2.1 Ordres en compétition : déconfinement des paires de Cooper

La forme (VII.3) de l'hamiltonien de spin 3/2 met naturellement en évidence la compétition entre deux types d'ordre [301]. Pour $V = 0$ et $U < 0$, il faut maximiser la densité de particules sur site conduisant à la formation de « molécules » ou quartets constitués de quatre particules. Le paramètre d'ordre associé est $Q_i = c_{-\frac{3}{2},i} c_{-\frac{1}{2},i} c_{\frac{1}{2},i} c_{\frac{3}{2},i}$. Bien sûr, cette image n'est valable que pour $|U| \ll t$. Au contraire, si $U = 0$ et $V < 0$, on abaissera l'énergie en augmentant la « densité » de paire $P_i^\dagger P_i$. Il s'agit d'une phase BCS du fait que les états liés sont entre deux particules et non quatre. Afin de préciser cette compétition, on remarque que l'hamiltonien (VII.3) a une symétrie discrète \mathbb{Z}_2 notée \mathcal{U} dont la transformation est

$c_{\alpha,i} \rightarrow e^{i\pi/2} c_{\alpha,i}$. Or, il est clair que $\mathcal{U}P_i\mathcal{U}^\dagger = -P_i$ et $\mathcal{U}Q_i\mathcal{U}^\dagger = Q_i$. Ainsi, si cette symétrie n'est pas brisée, le paramètre d'ordre P ne pourra pas s'ordonner. Autrement dit, la phase BCS ne peut exister que si cette symétrie est brisée. Si l'on interprète l'ordre de quartet Q comme un état lié de deux paires de Cooper, la transition entre la phase BCS et la phase quartet (on appelle pour l'instant phase quartet la phase où le paramètre d'ordre BCS est désordonné) est une transition de confinement des paires de Cooper. Enfin, lorsqu'on forme les objets paires de Cooper ou quartets, ceux-ci vont avoir naturellement deux types de fluctuations dominantes, soit des fluctuations de charges (on parlera d'onde de densité) soit des fluctuations superfluides. En suivant la nomenclature de la Réf. [301], on parlera de phase ADW (Atomic Density-Wave) pour la phase avec quartets où les fluctuations de charge dominant, de phase MS (Molecular Superfluid) ou phase quartet pour la phase où les quartets ont des fluctuations superfluide dominantes. C'est l'équivalent de la compétition CDW et supraconductivité d -wave pour les échelles de spins dopées. Lorsque la symétrie \mathcal{U} est brisée, la phase superfluide est appelée simplement phase BCS tandis que la phase avec fluctuations de charge dominantes est appelée MDW (Molecular Density-Wave). Enfin, pour un remplissage commensurable, les phases avec fluctuations de charge dominantes peuvent se transformer en phase de Mott brisant spontanément la symétrie de translation. Nous allons maintenant préciser tout cela en étudiant numériquement le diagramme de phase et en utilisant les résultats de bosonisation tirés de l'article [301].

2.2 Diagramme de phase numérique

Pour caractériser les différentes phases, on a calculé par DMRG les corrélations suivantes : $G(x) = \langle c_{\alpha,i}^\dagger c_{\alpha,i+x} \rangle$, $N(x) = \langle n_i n_{i+x} \rangle$, $P(x) = \langle P_i P_{i+x}^\dagger \rangle$ et $Q(x) = \langle Q_i Q_{i+x}^\dagger \rangle$ qui sont respectivement la fonction de Green, les corrélations de densité, de paires et de quartets. Le diagramme de phase au quart-remplissage est donné sur la figure VII.3 et on rappelle que le vecteur de Fermi est alors $k_F = \pi/4$. Avant de discuter les différentes régions de ce diagramme, on précise que les calculs ont été effectués en utilisant la réécriture du modèle (VII.3) en un modèle d'échelle de Hubbard :

$$\mathcal{H}^L = -t_{\parallel}^L \sum_{i,p=1,2} \left[c_{i+1,p}^\dagger c_{i,p} + h.c. \right] + U^L \sum_{i,p=1,2} n_{i,p,\uparrow} n_{i,p,\downarrow} + V_{\perp}^L \sum_i n_{i,1} n_{i,2} + J_{\perp}^L \sum_i \mathbf{S}_{i,1} \cdot \mathbf{S}_{i,2},$$

avec comme paramètres

$$U^L = 2U_2 = U, \quad V_{\perp}^L = \frac{U_0 + 3U_2}{2} = U + \frac{V}{2}, \quad J_{\perp}^L = 2(U_2 - U_0) = -2V.$$

L'algorithme DMRG converge très bien lorsque $V \leq 0$ avec des poids rejetés de l'ordre de 10^{-13} en conservant 1400 états pour $U/t = -4$ sur la ligne SU(4) par exemple. Lorsque U est plus petit ($U/t = -1$), il est nécessaire de conserver un peu plus d'états ($M = 2000$) pour avoir un poids rejeté de l'ordre de 10^{-6} . On a vérifié que les fonctions de corrélations dépendaient peu du nombre d'états gardés, la chute des corrélations à longue distance étant essentiellement due aux conditions aux bords ouvertes (voir chapitre II). D'autre part, Sylvain Capponi a effectué des calculs de Monte-Carlo quantique déterminantal [192] qui s'avérait plus efficace à faible $V/t, U/t$. Les conditions aux bords périodiques sont utilisées dans ce dernier cas et les fonctions de corrélations de densité convergent particulièrement bien.

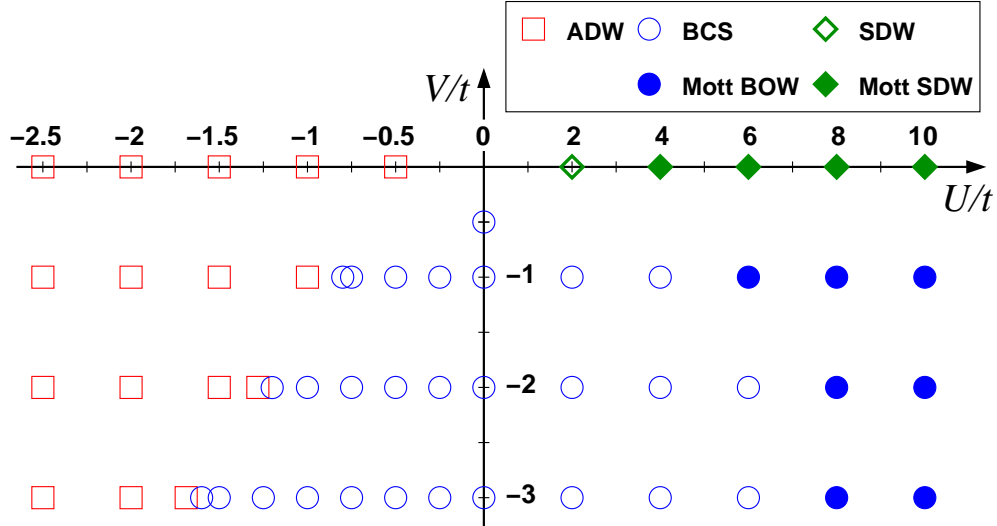


FIG. VII.3: *Diagramme de phase du modèle de spin 3/2 dans la région $V \leq 0$ défini par (VII.3) et au quart-remplissage (un atome par site). D'après des calculs de Monte-Carlo quantique et de DMRG. Se référer au texte pour les définitions des différentes phases. Extrait de la publication [4].*

2.2.1 Phase confinée

Commençons par la phase ADW du diagramme de phase VII.3. Il s'agit de la phase confinée où les fonctions de Green et de corrélations de paires sont à courte portée comme le montre la figure VII.4. En revanche, les corrélations de quartet $Q(x)$ sont algébriques avec un vecteur d'onde dominant $q = 0$. La bosonisation prédit un comportement algébrique dans cette phase pour $Q(x)$ et $N(x)$ selon

$$Q(x) \sim x^{-2/K_d} \quad \text{et} \quad N(x) \sim \cos\left(\frac{\pi}{2}x\right) x^{-K_d/2}, \quad (\text{VII.4})$$

avec K_d une variation sur la notation de l'exposant de Luttinger du mode de charge. Les oscillations de densité à $2k_F$ dominant donc si $K_d < 2$ (phase ADW) tandis que la phase quartet à proprement parler existe si $K_d > 2$ (phase MS). On a évalué K_d de deux manières, soit en ajustant la décroissance algébrique dans les fonctions de corrélations de quartet obtenues par DMRG, soit en utilisant le comportement à $q = 0$ de la transformée de Fourier des corrélations de densité grâce au Monte-Carlo quantique

$$K_d = \frac{\pi}{4} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{N(q)}{q}.$$

Le comportement de K_d sur la ligne SU(4) ($V = 0$) est rapporté sur la figure VII.4. Pour $U = 0$, on a $K_d = 1$ puisque les particules sont sans interaction et perturbativement, pour ce remplissage, on peut évaluer K_d selon :

$$K_d = \frac{1}{\sqrt{1 + [V + 3U]/(\sqrt{2}\pi t)}}. \quad (\text{VII.5})$$

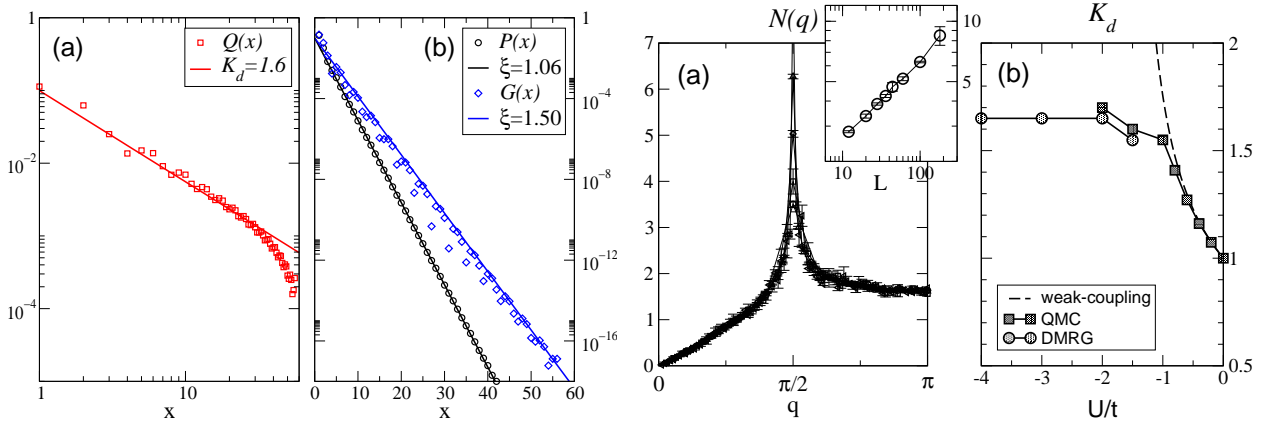


FIG. VII.4: **Phase confinée ADW.** À gauche, les corrélations de quartet $Q(x)$ sont algébriques tandis que les corrélations BCS et la fonction de Green sont exponentielles. Le paramètre de Luttinger K_d tiré de ces corrélations est inférieur à 2 ce qui correspond à une phase ADW. À droite, le facteur de structure de la densité $N(q)$ montre un pic divergent avec la taille à $2k_F = \pi/2$ et le comportement en $q = 0$ donne accès au paramètre de Luttinger K_d . Celui-ci suit le régime perturbatif à faible U/t avant de saturer dans la limite de couplage fort. Extrait de la publication [4].

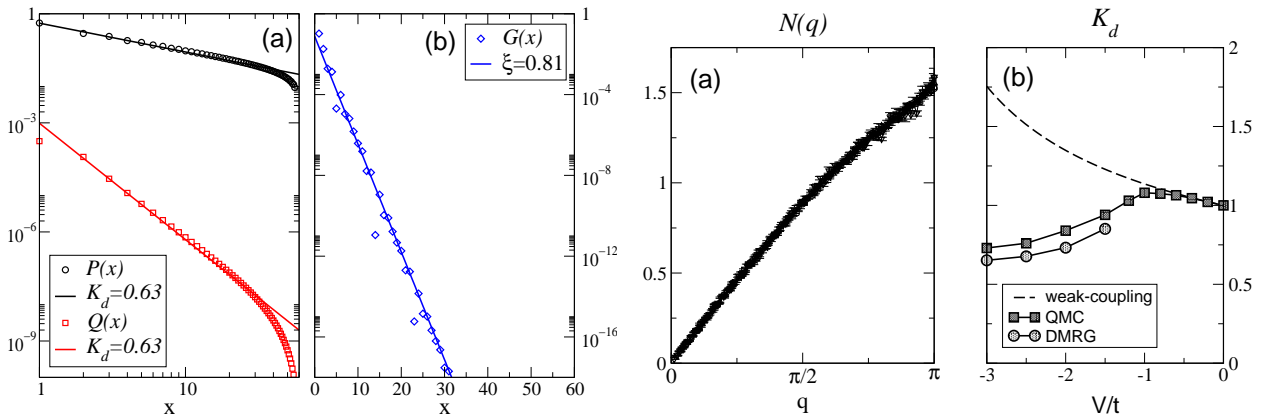


FIG. VII.5: **Phase déconfinée BCS.** À gauche, les corrélations BCS et quartet sont toutes deux algébriques, mais avec une domination nette des corrélations BCS, tandis que la fonction de Green est exponentielle traduisant la présence de pairing dans le système. À droite, le facteur de structure de la densité $N(q)$ présente cette fois un pic à $4k_F = \pi$ qui ne diverge pas. Le paramètre de Luttinger suit le comportement perturbatif avant de décroître dans le régime de fort couplage. Extrait de la publication [4].

On retrouve bien une augmentation de K_d pour des interactions attractives. Ce comportement perturbatif est bien vérifié pour $|U/t| \lesssim 1$. Pour des interactions plus fortes, l'exposant sature vers une valeur inférieure à deux. On n'a donc pas trouvé de preuves claires de l'existence d'une phase MS au quart-remplissage mais ce point, ainsi que la saturation des exposants, sera plus précisément discuté dans la section 3.

2.2.2 Phase déconfinée

Les propriétés du système sur la ligne $U = 0$, $V < 0$ sont rapportées sur la figure VII.5. Cette fois, la fonction de Green est bien exponentielle traduisant un gap fini pour les excitations à une particule, tandis que les corrélations de quartets et de paires sont algébriques. Ces dernières dominent car elles ont l'exposant le plus petit. Les prédictions de bosonisation pour les corrélations algébriques dans cette phase sont :

$$P(x) \sim x^{-1/(2K_d)}, \quad Q(x) \sim x^{-2/K_d} \quad \text{et} \quad N(x) \sim \cos(\pi x) x^{-2K_d}. \quad (\text{VII.6})$$

Les fluctuations de charges sont cette fois à $4k_F$ avec un exposant $2K_d$ ce qui souligne l'analogie avec la compétition $4k_F$ -CDW et SC dans les échelles dopées. Ces comportements sont très bien vérifiés numériquement comme le montre la figure VII.5. On notera que l'on n'a pas naïvement $Q(x) \sim P(x)^2$ mais $Q(x) \sim P(x)^4$ rendant les corrélations quartets nettement sous-dominantes. De la même manière que pour la phase confinée, on a évalué le comportement de K_d sur cette ligne en utilisant les corrélations BCS en DMRG et $N(q)$ en Monte-Carlo quantique (voir la figure VII.5). Le comportement perturbatif (VII.5) est bien vérifié avec une augmentation de K_d à faible V/t , mais une décroissance à fort V/t est observée. Les corrélations MDW domineraient dans le système si $K_d < 1/2$ (comme pour les échelles dopées). Or, au quart-remplissage, les processus de umklapp peuvent ouvrir un gap si $K = 1/2$. La phase MDW sera donc remplacée par une phase de Mott pour ce remplissage commensurable ce qui sera discuté juste après la transition d'Ising.

2.2.3 Transition d'Ising

Avant de parler de la phase de Mott, il est intéressant de montrer numériquement la nature de la transition Ising associée à la brisure de symétrie \mathbb{Z}_2 . Dans la référence [301], il a été prédit un comportement universel pour le rapport $R(x) = P(x)^4/Q(x)$ à la transition. Dans la phase BCS, ce rapport est sensiblement constant pour $x \gg a$ d'après (VII.6). Dans la phase ADW, ce rapport est exponentiel en raison du comportement à courte-portée de $P(x)$. Plus précisément, il a été montré [301] que le paramètre d'ordre Ising de la transition noté $\sigma(x)$, était relié à ce rapport via $R(x) \sim \langle \sigma(x)\sigma(0) \rangle^4$ dans la phase confinée (pour laquelle $\langle \sigma(x) \rangle = 0$) et $\langle \sigma(x) \rangle = \sigma \neq 0$ ainsi que $R(x) \sim \sigma^8$ pour la phase déconfinée. À la transition, le rapport doit avoir un comportement critique $R(x) \sim 1/x$ universel [301]. Numériquement, nous avons pu calculer le rapport $R(x)$ d'après les corrélations DMRG et l'accord est remarquable avec ces prédictions (voir la figure VII.6). Cela est rendu possible grâce à la très bonne convergence de l'algorithme dans ces régimes de paramètres et au fait que les contributions à $4k_F$ dans ces corrélations sont bien négligeables. $R(x)$ a été calculé pour le point $x = 45$ sur une chaîne $L = 60$ et on a vérifié que le comportement dépendait peu de x pour $20 \leq x \leq 50$. Ces résultats numériques démontrent bien la nature Ising de la transition.

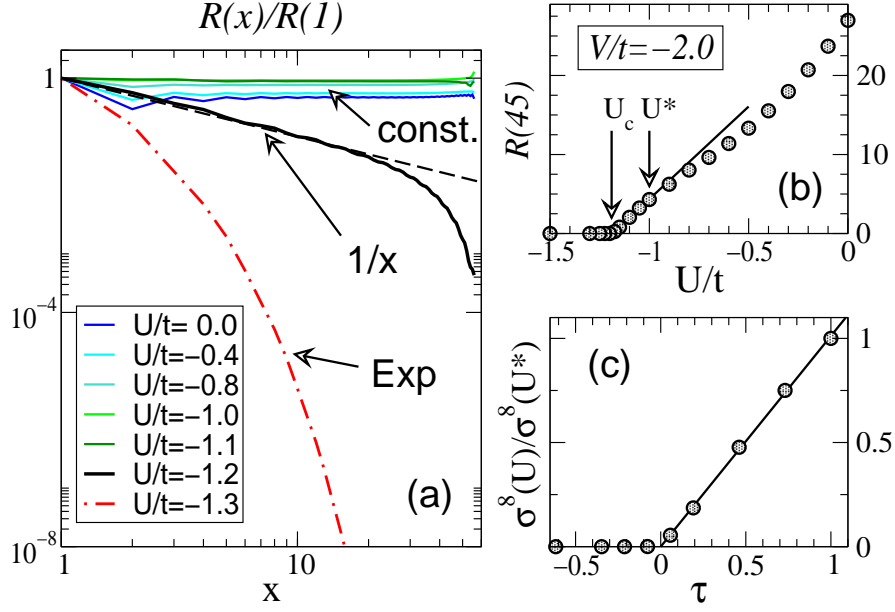


FIG. VII.6: **Transition BCS-ADW.** Résultats DMRG sur le long de la ligne $V = -2t$ en fonction de U . (a) Le rapport $R(x) = P(x)^4/Q(x)$ normalisé montrant le régime critique universel en $1/x$ proche de la transition pour $U \simeq U_c$. (b) Valeur du rapport pour la distance $x = 45$, $R(x)$ est proportionnel à $U - U_c$ pour $U_c \leq U \leq U^*$, ce qui définit $U^* = -t$ et l'extrapolation linéaire donne $U_c = -1.19t$. (c) Si on trace $R(U) = \sigma(U)^8$ en fonction $\tau = (U - U_c)/(U^* - U_c)$, avec σ le paramètre d'ordre Ising, la nature Ising de la transition se manifeste par la linéarité au voisinage de la transition. Extrait de la publication [4].

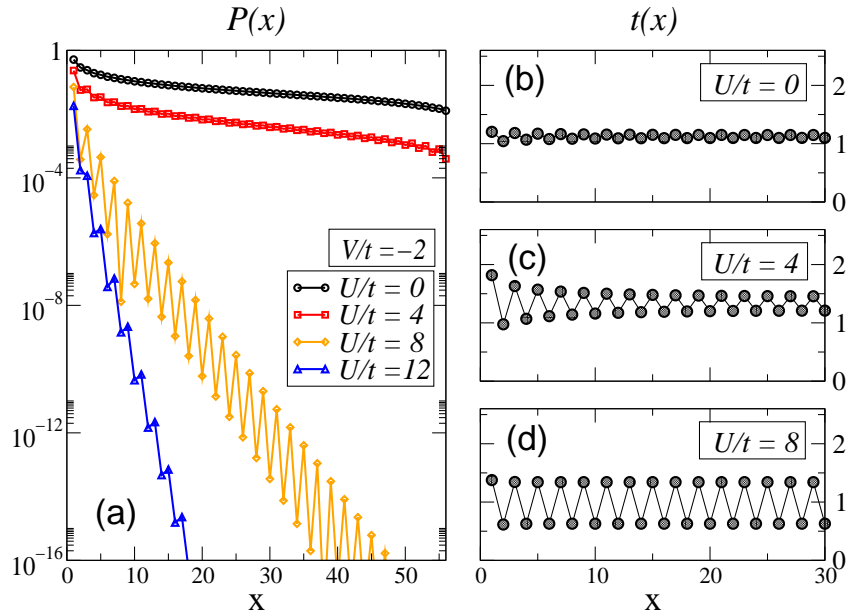


FIG. VII.7: **Transition de Mott à $U > 0, V < 0$.** Les corrélations BCS deviennent à courte portée tandis que le lien cinétique $t(x)$ s'ordonne avec $q = \pi$ lorsqu'on franchit la transition. Extrait de la publication [4].

2.2.4 Transition de Mott à $U > 0$

En compétition avec la phase BCS à $V < 0$, une phase de Mott peut se produire lorsque $K_d = 1/2$. En augmentant $U > 0$, on s'attend à une diminution de K_d avec cette interaction répulsive. Le comportement des corrélations BCS lorsque U augmente est rapporté sur la figure VII.7. On voit clairement le passage à des corrélations exponentielles à fort U manifestant la présence d'un gap pour les excitations à deux particules. Les degrés de libertés de spin sont en fait également gappés dans cette phase car $V < 0$. Elle n'est donc pas la continuité de la phase de Mott SDW (Spin Density-Wave) présente à $V = 0$ et fort $U < U_c$ d'après les résultats de Assaraf *et al.* présentés au début du chapitre (sur le diagramme de phase de la figure VII.3, la transition de Mott à $V = 0$ entre une phase métallique SDW et Mott SDW est représentée par des losanges). De plus, cette phase de Mott brise l'invariance par translation et un paramètre d'ordre local s'ordonne : il s'agit de l'énergie cinétique locale $t(x) = \langle \sum_{\alpha} c_{\alpha,x+1}^{\dagger} c_{\alpha,x} + \text{H.c.} \rangle$ ce qui en fait une phase assez similaire à la phase BDW vue à la fin du chapitre VI. La densité locale est quant à elle quasiment uniforme. Qualitativement, lorsque U est positif et grand, le système garde un atome par site et toutes les double, triple ou quadruple occupations sont très au-dessus en énergie. Lorsque $V = 0$, il reste le degré de liberté de spin et la phase est SDW. Lorsqu'on a un $V < 0$, les double occupations avec une paire locale sont stabilisées par le V bien que plus hautes en énergie, il y a donc formation de « dimères » entre deux sites voisins grâce aux processus de sauts conduisant à une double dégénérescence du fondamental. Cette phase est par conséquent dénommée Mott BOW (Bond Order-Wave) sur le diagramme de phase de la figure VII.3. Notez enfin que \mathcal{U} est brisée dans cette phase tandis qu'elle ne l'est pas dans la phase SDW.

3 Émergence des quartets à basse densité

3.1 Arguments pour chercher les quartets à basse densité

Parmi les phases attendues pour le modèle de spin 3/2, l'étude précédente ne montrait pas l'existence de phase quartet ou MS. C'est ce que nous allons maintenant étudier et jouer non pas sur les paramètres U, V mais sur le remplissage en atomes. La densité a en effet une grande influence sur le paramètre de Luttinger du mode de charge. Les résultats obtenus seront discutés plus généralement pour le cas $SU(N)$ dont on étudiera les cas pair et impair les plus simples à savoir $N = 2, 3$ et 4. En préambule, rappelons les résultats du chapitre II sur les fonctions de Green de fermions et de bosons. Les opérateurs bosonisés donnent en première approximation

$$\psi_F^{\dagger}(x) \sim e^{ik_F x} e^{i(\phi(x) - \theta(x))} \quad (\text{VII.7})$$

$$\psi_B^{\dagger}(x) \sim e^{-i\theta(x)} \quad (\text{VII.8})$$

et les fonctions de Green sont alors paramétrées par le paramètre de Luttinger K

$$\langle \psi_F(x) \psi_F^{\dagger}(0) \rangle \sim e^{ik_F x} \left(\frac{\alpha}{x} \right)^{(K+1/K)/2} \quad (\text{VII.9})$$

$$\langle \psi_B(x) \psi_B^{\dagger}(0) \rangle \sim \left(\frac{\alpha}{x} \right)^{\frac{1}{2K}}, \quad (\text{VII.10})$$

Dans la suite, on notera désormais K le paramètre de Luttinger du mode de charge. En se limitant au modèle $SU(N)$ pour l'instant avec $U < 0$ et grand, on s'attend à former des « molécules » de N -fermions. Les modes de spins sont gelés pour $U < 0$ si bien que seul subsiste le mode de charge pour la description de basse énergie. Ces molécules sont associées au paramètre d'ordre $M_i^\dagger = c_{1,i}^\dagger c_{2,i}^\dagger \cdots c_{N,i}^\dagger$ dont les corrélations $M(x) = \langle M_i M_{i+x}^\dagger \rangle$ se comportent comme

$$M(x) \sim x^{-1/(2K/N)} \quad \text{pour } N \text{ pair} \quad (\text{VII.11})$$

$$M(x) \sim \sin(k_F x) x^{-(K/N+N/K)/2} \quad \text{pour } N \text{ impair} \quad (\text{VII.12})$$

Si le nombre de fermions est pair, ces molécules sont par conséquent de manière effective des bosons, comme c'est le cas des quartets. Si N est impair, la molécule est alors un fermion. Dans les deux cas, le paramètre de Luttinger effectif pour ces molécules est $K^{\text{eff}} = K/N$ d'après les relations (VII.9) et (VII.10). Ces considérations sont également en accord avec le comportement algébrique des fluctuations de densité $N(x) \sim \cos(2k_F x) x^{-2K/N}$. Notez que ces dernières ne dépendent pas de la statistique des molécules. De la compétition entre fluctuations de charge et fluctuations superfluides, on en déduit que la phase moléculaire superfluide existe si $K > N/2$ pour N pair et si $K > N/\sqrt{3}$ pour N impair.

Où pouvons-nous espérer trouver des valeurs de K suffisamment grandes pour réaliser ces phases ? Pour se faire une idée, on peut étudier quelques cas limites. Tout d'abord, si $U = 0$, on sait que $K = 1$ quelle que soit la densité n et que perturbativement, $K = 1/\sqrt{1 + U(N-1)/(\pi v_F)}$ augmente avec $U < 0$. Pour $|U|/t \gg 1$, très qualitativement, on va former des molécules dont le terme de saut effectif sur le réseau sera de l'ordre de $t^N/|U|^{N-1}$ à un facteur près. Si on est à suffisamment faible densité, on peut négliger les interactions résiduelles entre molécules qui se comportent alors comme des bosons de cœur dur ou des fermions sans spin suivant la parité de N . Dans les deux cas, les fluctuations de densité à $2k_F$ sont en x^{-2} et on s'attend donc à ce que $K^{\text{eff}} \rightarrow 1$ et donc que $K \rightarrow N$ dans le régime de fort couplage et faible densité. C'est dans cette région que l'on peut espérer trouver une phase superfluide moléculaire. Terminons par une discussion sur l'effet possible de remplissages commensurables lorsqu'on va faire évoluer la densité. Tout d'abord, la commensurabilité à considérer en premier est le demi-remplissage où la densité vaut $n = N/2$. Le K critique pour lequel les processus de umklapp ouvrent un gap de charge est $N/2$ pour la transition à n fixée en faisant varier U (transition Mott- U ou transition C-IC à n fixée). Si l'on approche la commensurabilité à U fixé mais en faisant varier n (transition Mott- δ ou transition C-IC à U fixé), la valeur critique est $N/4$. Ce sera utile pour la discussion des diagrammes de phase. Comme $K > 3/4$, les autres commensurabilités (quart-remplissage, etc...) ne vont pas donner lieu à d'ouverture de gaps pour $N = 2, 3, 4$ donc il n'est pas besoin de les discuter. Pour des N plus grands, il pourrait y avoir l'ouverture d'un gap de charge au quart-remplissage par exemple.

3.2 Calculs numériques et diagramme de phase $SU(4)$

Pour déterminer le K numériquement, la méthode d'exploitation des corrélations a été améliorée pour mieux prendre en compte les effets de taille finie en utilisant les résultats de théorie conforme de la Réf. [131] (voir aussi le chapitre II). L'extraction de K à partir des

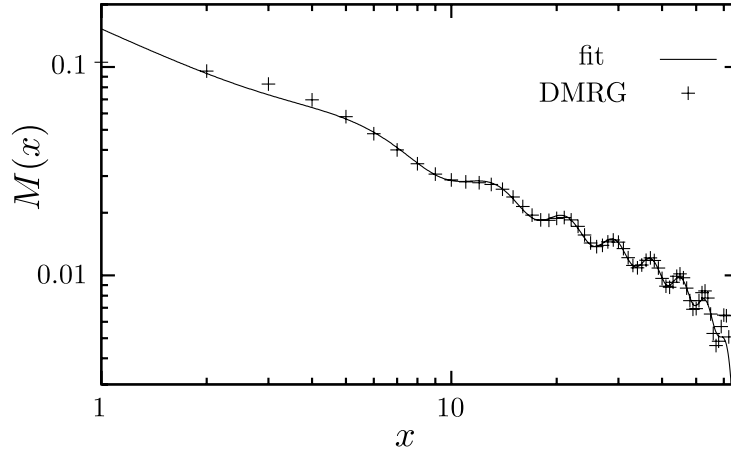


FIG. VII.8: Ajustement par la fonction (VII.13) de la fonction de corrélations de quartets obtenue pour $U/t = -4$, $V/t = -2$, $L = 128$ et $n = 0.5$ par DMRG. Extrait de la publication [5].

fonctions de corrélations³ quartet a été réalisée en utilisant un ajustement par la fonction

$$f(x, x' = L/2) = \left[\frac{\sqrt{d(2x|2L)d(2x'|2L)}}{d(x+x'|2L)d(x-x'|2L)} \right]^{2/K} (A + B \cos(\pi n + \varphi)) , \quad (\text{VII.13})$$

où l'oscillation à $2k_F$ a été rajoutée « à la main » pour capter le comportement des oscillations. L'essentiel est cependant dans la prise en compte de la chute des corrélations pour $x \rightarrow L/2$ par l'utilisation de la distance conforme. Si l'on enlève le terme oscillant pour ne prendre en compte que la partie à $q = 0$, des valeurs de K similaires sont trouvées. Un exemple de fit est donné sur la figure VII.8. Le comportement de la fonction $K(n)$ obtenu est représenté sur la figure VII.9 et montre clairement qu'on dépasse $K = 2$ pour une densité $n < n_c \lesssim 1$ en couplage fort. On a interpolé ces courbes pour tracer des lignes de niveau de K en fonction de n et de U . Le diagramme de phase ainsi déterminé est représenté sur la figure VII.10 et montre une large phase quartet à basse densité. On a vérifié que la fonction de Green et les corrélations BCS demeuraient bien exponentielles dans cette région. Les lignes de niveaux de K sont presque parallèles à fort U de sorte qu'une densité critique $n_c < 2$ est toujours nécessaire pour obtenir la phase quartet. Enfin, on peut évoquer le comportement au voisinage du demi-remplissage sur la base des résultats précédent. Le K critique de la transition Mott- U étant ici $K = 2$, comme $K = 1$ pour $U = 0$, un gap s'ouvre immédiatement dès que $U < 0$. Pour l'approche de la commensurabilité dans la transition Mott- δ , le K critique est ici $K = 1$ ce qu'on retrouve bien numériquement. Dans le diagramme de phase, on a donc partout $K > 1$.

Avant d'aborder brièvement le cas $SU(3)$, précisons que l'émergence de la phase quartet à basse densité n'est pas due à la symétrie particulière du modèle $SU(4)$. Des corrélations

³Notez qu'on pourrait extraire K de façon plus précise à partir des oscillations de Friedel de la densité qui ont une erreur plus petite que les fonctions de corrélations avec le poids rejeté. Cependant, à faible densité, la longueur d'onde de ces oscillations augmente comme $1/n$ et il faut des systèmes d'autant plus grand. Dans notre cas, on a la chance d'avoir un poids rejeté très petit qui permet d'avoir des corrélations très bien convergées et ayant un terme dominant à $q = 0$ qui facilite l'ajustement.

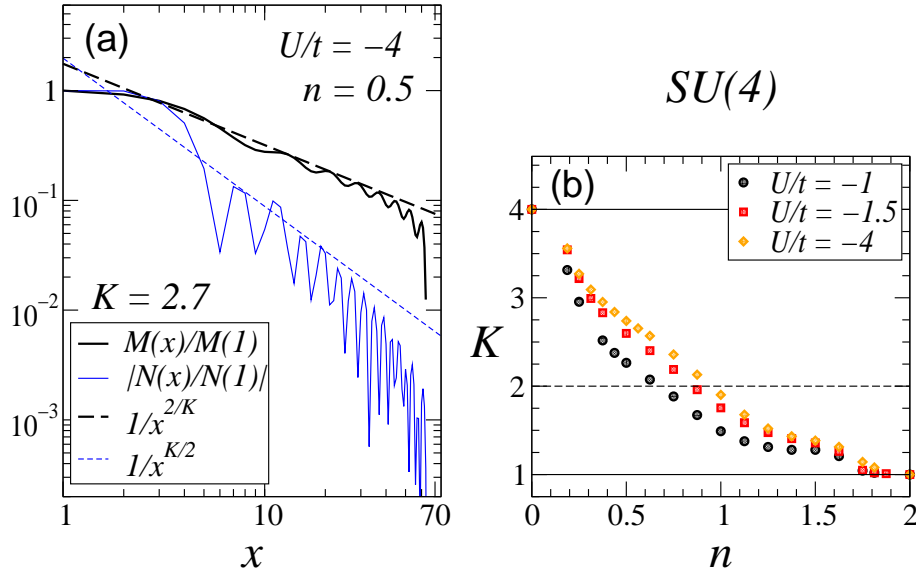


FIG. VII.9: À gauche, corrélations $M(x) = Q(x)$ et $N(x)$ à basse densité montrant la domination des fluctuations superfluides dans le modèle $SU(4)$. À droite, évolution du paramètre de Luttinger K tiré du fit des corrélations quartets montrant l'évolution depuis $K = 1 = N/4$ au voisinage de la commensurabilité $n = 2$ (demi-remplissage) et $K = 4 = N$ à très basse densité. Les courbes $K(n)$ n'évolue quasiment pas numériquement lorsque $|U|/t \gtrsim 2$, correspond à l'entrée dans le régime de couplage fort. Extrait de la publication [5].

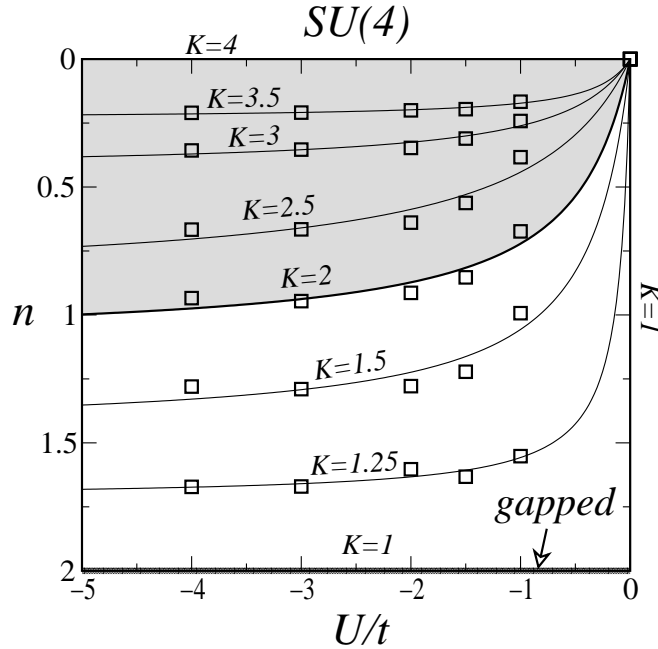


FIG. VII.10: **Diagramme de phase du modèle $SU(4)$ pour $U < 0$ mettant en évidence une large phase quartet (MS) à basse densité.** Pour les différents cas limites, se reporter au texte. Extrait de la publication [5].

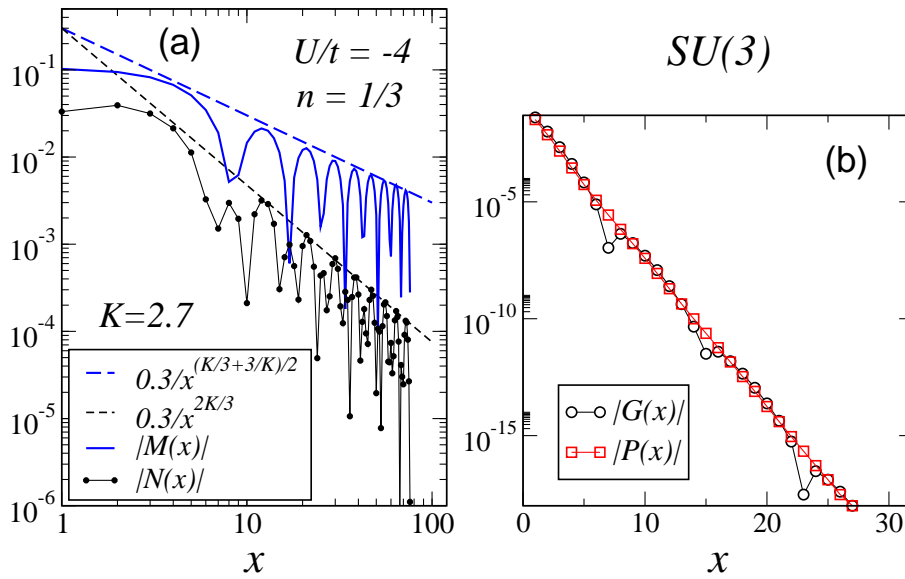


FIG. VII.11: À gauche, corrélations $M(x)$ et $N(x)$ à basse densité montrant la domination des fluctuations superfluides dans le modèle $SU(3)$. À droite, la fonction de Green et les corrélations BCS sont bien exponentielles. Extrait de la publication [5].

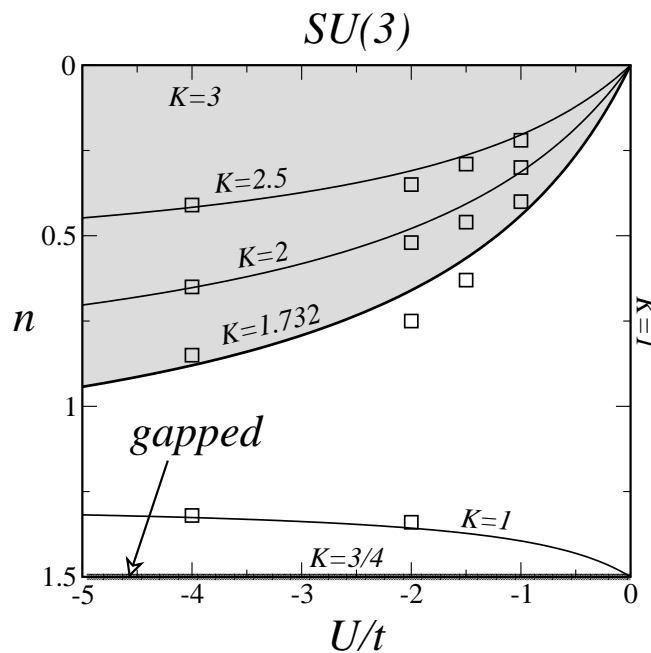


FIG. VII.12: **Diagramme de phase du modèle $SU(3)$ pour $U < 0$ mettant en évidence une large phase moléculaire superfluide à basse densité.** Pour les différents cas limites, se reporter au texte. Extrait de la publication [5].

quartet dominantes existent aussi pour $V \neq 0$ comme le montre la figure VII.8, la ligne SU(4) n'est donc qu'une ligne particulière au sein d'une phase plus large dans le plan U, V . De plus, l'analogie avec une échelle de Hubbard sans t_\perp mais avec $V_\perp = U$ sur la ligne SU(4) permet de justifier qualitativement l'existence de la phase quartet. En effet, sortons de la symétrie SU(4) en prenant $V_\perp = 0$. Alors, les deux chaînes de Hubbard sont découplées. Or, une chaîne de Hubbard correspond au cas SU(2) et, pour $U < 0$, l'hamiltonien est exactement soluble par Ansatz de Bethe (voir chapitre II). Ces résultats exacts montrent que $1 \leq K_{\text{SU}(2)} \leq 2$ pour $U < 0$ et aussi que $K_{\text{SU}(2)} \rightarrow 2$ dans la limite de faible densité avec une saturation de $K_{\text{SU}(2)}$ dans la limite de couplage fort. Lorsqu'on branche V_\perp , il s'agit d'une simple interaction densité-densité et on obtient pour les modes symétriques et anti-symétriques de l'échelle

$$K_\pm = K_{\text{SU}(2)} / \sqrt{1 \pm \frac{V_\perp K_{\text{SU}(2)}}{\pi u_{\text{SU}(2)}}}. \quad (\text{VII.14})$$

Le paramètre K_+ est égal à K pour le modèle SU(4) lorsque $V_\perp = U$ et on voit que $V_\perp < 0$ donne $K_+ > K_{\text{SU}(2)}$ si bien que comme $K_{\text{SU}(2)} \rightarrow 2$ à faible densité, il y a de bonnes chances pour que $K_+ > 2$ dans cette même limite, et ce, même si $V_\perp \neq U$ (en dehors du point SU(4)). Les résultats obtenus sont donc plus généraux que le cas spécifique étudié ici, favorisant ainsi la possibilité de leur réalisation expérimentale.

3.3 Analogies et différences avec les modèles SU(2) et SU(3)

Que se passe-t-il pour $N = 2$ et $N = 3$? Le cas SU(2) a été plus ou moins déjà discuté au chapitre II et ci-dessus. Précisons simplement qu'il n'y pas de phase isolante au demi-remplissage puisque le K critique est alors $K = 1$ et que $K > 1$ pour les interactions attractives. Il y a quels que soient $U < 0$ et n une large phase Luther-Emery avec domination des fluctuations BCS qui coïncide dans ce cas particulier avec la phase moléculaire superfluide. Ainsi, l'existence d'une valeur critique de la densité pour réaliser cette phase est caractéristique du cas $N > 2$. D'autre part, le cas $N = 3$ est particulièrement intéressant car N est impair et que la molécule ainsi formée est un fermion. Sylvain Capponi a réalisé dans ce cas des calculs DMRG en utilisant l'hamiltonien de trois chaînes de fermions sans spins couplées présenté au début de ce chapitre. Les résultats obtenus sont donnés sur les figures VII.11 et VII.12. De façon remarquable, les corrélations $M(x)$ montrent sans équivoque une oscillation à k_F caractéristique d'une molécule fermionique. De même que pour SU(4), une densité critique doit être franchie pour voir émerger la phase moléculaire superfluide. Au demi-remplissage, une phase gappée est présente puisque le K critique de la transition Mott- U est cette fois $3/2 > 1$. Proche du demi-remplissage, $K \rightarrow 3/4$ est bien observé numériquement sur quelques points à fort U . La ligne $K = 1$ entre donc dans le diagramme à la différence des cas $N = 2$ et $N = 4$.

4 Conclusion partielle

Ce chapitre a permis d'étudier la richesse du modèle de Hubbard de spin 3/2 pour des interactions attractives avec notamment une transition de confinement des paires de Cooper et l'émergence de superfluidité moléculaire à basse densité. Les phases les plus intéressantes

physiquement sont réalisées pour des conditions de densité et d'interactions peu restrictives ce qui rend envisageable leur observation expérimentale. De plus, une certaine phénoménologie se dégage de cette étude laissant espérer que de telles phases puissent éventuellement être stabilisées à plus grande dimension mais aussi pour des conditions expérimentales réalistes (présence d'un piège, température, etc. . .). Pour ce qui est de l'effet possible de la température, l'échelle d'énergie du gap à une particule sur la ligne $SU(4)$ est environ $0.5U/t$ et ce gap évolue très peu avec la densité (données non présentées). Une phase moléculaire superfluide ne pourrait être stabilisée que très en-dessous de cette échelle d'énergie. Le reste du diagramme de phase de la figure VII.3 pour $U > 0$ a été abordé numériquement mais dans ce cas, la convergence du DMRG est moins bonne et le mapping vers un modèle d'échelle de Hubbard montre que les deux chaînes ont des densités locales déphasées dans ce régime. L'approfondissement de ce travail nécessiterait peut-être une écriture directe du modèle de spin 3/2 sur une chaîne en DMRG afin de pouvoir gérer au mieux les symétries sur site au cours de l'algorithme. En contrepartie, le nombre d'états sur site serait doublé ce qui augmentera le temps CPU et la mémoire, mais il y aura aussi moins de pas DMRG pour la même taille. Pour terminer, les longueurs de corrélations étant relativement petites dans la limite de couplage fort, la diagonalisation exacte pourrait également s'avérer très utile dans la région $U < 0, V > 0$.

Conclusion générale

Effets de commensurabilité et plateaux irrationnels, phase supraconductrice inhomogène, anomalies de la susceptibilité orbitale au voisinage des phases onde de densité de charge et onde de densité de liens, apparition de fluctuations de courant transverse : le champ magnétique conduit à une physique étonnamment riche dans les échelles de spins dopées. La phénoménologie développée pourrait avoir des conséquences expérimentales visibles si le couplage inter-échelles ou le désordre ne détruisent pas ces phases proposées à partir d'une échelle isolée. L'émergence de nouveaux canaux d'appariement à fort champ et les crossovers correspondants sont caractéristiques d'un état supraconducteur dont le mécanisme a pour origine les fluctuations de spins. Ces observations pourraient trouver un écho de façon plus générale dans les composés supraconducteurs de basse dimensionnalité à fortes corrélations électroniques.

Après avoir introduit les notions indispensables à la compréhension de la physique quantique en dimension une et les méthodes numériques qui y sont les plus adaptées, cette thèse discutait d'abord le rôle d'un terme d'échange cyclique dans les échelles dopées. Ce terme cyclique, qui trouve son origine dans les processus d'échanges à quatre corps, induit de la frustration et détruit les résonances de l'état fondamental RVB de l'échelle de spin. La modification de l'environnement magnétique entraîne une destruction de la supraconductivité au point critique quantique magnétique. Inversement, la présence de trous diminue la contribution de ces processus élémentaires et rouvre le gap de spin lorsqu'on dope la phase isolante au point critique. Le mode magnétique résonnant qui est l'état lié d'une paire de trous avec l'excitation magnon dans les échelles dopées est robuste pour les valeurs expérimentales observées de l'échange cyclique mais serait détruit avant l'approche du point critique.

Les plateaux d'aimantation contrôlés par le dopage observés en présence d'effet Zeeman peuvent être considérés comme un prolongement de ce mode magnétique résonnant à dopage fini. Une autre façon d'interpréter ces plateaux d'aimantation est un effet de commensurabilité sur les électrons \uparrow dû à la présence de fortes interactions : ces plateaux existent donc de façon continue avec le dopage en trous. Lorsque l'aimantation est non nulle dans l'échelle, les corrélations supraconductrices acquièrent des oscillations typiques d'une phase FFLO. Un corollaire de cette inhomogénéité de la phase supraconductrice est le dépassement de la limite théorique de Pauli dans les échelles dopées. Ce résultat suggère qu'un tel dépassement comme observé dans les expériences n'est pas incompatible avec de la supraconductivité singulet. D'autre part, le canal triplet $S^z = 0$ donne des corrélations algébriques à fort champ magnétique traduisant l'évolution du mécanisme d'appariement avec l'aimantation.

En raison du gap de spin dans les échelles dopées, la contribution des électrons de conduction à la susceptibilité magnétique est dominée par l'effet orbital à très basse température. La présence d'un flux perturbe considérablement la structure de bande des échelles conduisant à une transition vers une phase C1S1 puis une réentrée de la phase C1S0 dans les limites de

couplages faible et fort. Une des conséquences de l'introduction d'un champ magnétique est que la brisure de la symétrie par renversement du temps qu'il implique autorise l'apparition de fluctuations de courant détruites par le gap de spin en son absence. De plus, le calcul de la susceptibilité orbitale à champ nul montre qu'elle permet de sonder la nature différente des phases commensurables à $\delta = 1/4$ et $\delta = 1/2$. Pour cette dernière, nous avons montré qu'il s'agissait d'une phase onde de densité de liens. Enfin, l'étude préliminaire d'un modèle d'échelle bosonique a montré la possibilité d'avoir l'équivalent des phases de vortex 2D en brisant l'invariance par translation pour certaines valeurs des paramètres comme prédit par les résultats de bosonisation.

Le dernier chapitre de ce manuscrit était dédié au diagramme de phase du modèle de Hubbard attractif de spin $3/2$ décrivant la physique d'atomes froids piégés dans des réseaux optiques. Grâce à la très bonne convergence de l'algorithme DMRG dans cette situation, nous avons pu mettre en évidence de façon exacte la nature Ising de la transition entre une phase BCS et une phase d'objets contenant quatre fermions : les quartets. Ces derniers rentrent dans un état superfluide si la densité d'atomes est suffisamment faible, ce qui constitue une nouvelle phase dans les systèmes fortement corrélés.

Publications

- [1] G. Roux, S. R. White, S. Capponi, A. Läuchli, and D. Poilblanc, *Doped two-leg ladder with ring exchange: Exact diagonalization and density matrix renormalization group computations*, *Phys. Rev. B* **72**, 014523 (2005), 5 pages, [cond-mat/0504027](#).
- [2] G. Roux, S. R. White, S. Capponi, and D. Poilblanc, *Zeeman effect in superconducting two-leg ladders: irrational magnetization plateaus and exceeding the Pauli limit*, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 087207 (2006), 4 pages, [cond-mat/0512025](#).
- [3] G. Roux, E. Orignac, P. Pujol, and D. Poilblanc, *Bosonization and density-matrix renormalization group studies of the Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov phase and irrational magnetization plateaus in coupled chains*, *Phys. Rev. B* **75**, 245119 (2007), 17 pages, [cond-mat/0610397](#).
- [4] S. Capponi, G. Roux, P. Azaria, E. Boulat, and P. Lecheminant, *Confinement vs Deconfinement of Cooper Pairs in One-Dimensional Spin-3/2 Fermionic Cold Atoms*, *Phys. Rev. B* **75**, 100503(R) (2007), 4 pages, [cond-mat/0612456](#).
- [5] S. Capponi, G. Roux, P. Azaria, E. Boulat, P. Lecheminant, and S. R. White, *Molecular superfluid phase in one-dimensional multicomponent fermionic cold atoms* (2007), 4 pages, [arXiv:0706.0609](#).
- [6] G. Roux, E. Orignac, S. R. White, and D. Poilblanc, *Diamagnetism of doped two-leg ladders and probing the nature of their commensurate phases*, en préparation (2007), 14 pages.

Les références finales non précisées devraient être disponibles sur arXiv en cliquant [ici](#).

Bibliographie

- [1] L. D. Landau, Sov. Phys. JETP **5**, 101 (1957).
- [2] L. D. Landau, Sov. Phys. JETP **3**, 920 (1957).
- [3] L. D. Landau, Sov. Phys. JETP **8**, 70 (1958).
- [4] P. Nozières, *Theory of Interacting Fermi systems* (W. A. Benjamin, New York, 1961).
- [5] R. Shankar, Rev. Mod. Phys. **66**, 129 (1994), [doi](#).
- [6] T. Giamarchi, *Quantum Physics in one Dimension*, International series of monographs on physics No. 121 (Oxford University Press, Oxford, 2004), [web](#).
- [7] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer-Verlag, 1994).
- [8] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966), [doi](#).
- [9] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism* Series in Modern Condensed Matter Physics Vol. 5 (World Scientific, 1999), [web](#).
- [10] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems*, Frontiers in Physics No. 82 (Addison-Wesley, Boulder, 1991), [web](#).
- [11] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **277**, 237 (1963), [web](#).
- [12] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963), [web](#).
- [13] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **281**, 401 (1964), [web](#).
- [14] E. H. Lieb and F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968), [doi](#).
- [15] A. Georges and G. Kotliar, Phys. Rev. B **45**, 6479 (1992), [doi](#).
- [16] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996), [doi](#).
- [17] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998), [doi](#).
- [18] N. F. Mott, Proc. Phys. Soc. Sect. A **62**, 416 (1949), [doi](#).
- [19] N. F. Mott, Rev. Mod. Phys. **40**, 677 (1968), [doi](#).
- [20] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions* (Taylor and Francis, London, 1990), [web](#).
- [21] R. Bulla, T. Costi, and T. Pruschke, *The numerical renormalization group method for quantum impurity systems*, (2007), unpublished, [eprint](#).
- [22] L. P. Lévy, *Magnétisme et Supraconductivité* (CNRS Editions - EDP Sciences, 1997).
- [23] C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. **150**, 327 (1966), [doi](#).
- [24] C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. **150**, 321 (1966), [doi](#).
- [25] P. W. Anderson, Mater. Res. Bull. **8**, 153 (1973).
- [26] S. Liang, B. Douçot, and P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **61**, 365 (1988), [doi](#).
- [27] C. Lhuillier and G. Misguish, *Frustrated Quantum Magnets*, in *High Magnetic Fields*, edited by C. Berthier, L. P. Lévy, and G. Martinez, Lecture notes in physics Vol. 595, p. 161, Springer, (2002), [web](#).

- [28] J. D. Reger and A. P. Young, Phys. Rev. B **37**, 5978 (1988), [doi](#).
- [29] W. Marshall, Proc. Phys. Soc. A **232**, 48 (1955), [web](#).
- [30] P. W. Anderson, Phys. Rev. **86**, 694 (1952), [doi](#).
- [31] E. Lieb, T. D. Schultz, and D. C. Mattis, Ann. Phys. **16**, 407 (1961).
- [32] I. Affleck, in *Fields, Strings and Critical Phenomena*, edited by E. Brézin and J. Zinn-Justin, Les Houches, Amsterdam, Elsevier Science Publishers, (1988).
- [33] F. D. M. Haldane, J. Phys. C **15**, 1309 (1982).
- [34] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 1029 (1988), [doi](#).
- [35] S. R. White and D. A. Huse, Phys. Rev. B **48**, 3844 (1993), [doi](#).
- [36] E. Jeckelmann, D. J. Scalapino, and S. R. White, Phys. Rev. B **58**, 9492 (1998), [doi](#).
- [37] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986), [doi](#).
- [38] F. C. Zhang and T. M. Rice, Phys. Rev. B **37**, 3759(R) (1988), [doi](#).
- [39] J. Bobroff, *Étude par RMN des corrélations magnétiques dans les supraconducteurs à haute température critique : effets des impuretés*, PhD thesis, Université Paris Sud, (1997), [web](#).
- [40] Y. Kohsaka *et al.*, Science **315**, 1380 (2007), [doi](#).
- [41] G. S. Uhrig, K. P. Schmidt, and M. Gruninger, Phys. Rev. Lett. **93**, 267003 (2004), [doi](#).
- [42] P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987), [doi](#).
- [43] D. Poilblanc and T. M. Rice, Phys. Rev. B **39**, 9749 (1989), [doi](#).
- [44] H. J. Schulz, Phys. Rev. Lett. **64**, 1445 (1990), [doi](#).
- [45] J. Zaanen and O. Gunnarsson, Phys. Rev. B **40**, 7391 (1989), [doi](#).
- [46] S. A. Kivelson, E. Fradkin, and V. J. Emery, Nature **393**, 550 (1998), [eprint](#).
- [47] J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura, and S. Uchida, Nature **375**, 561 (1995), [doi](#).
- [48] J. M. Tranquada *et al.*, Nature **429**, 534 (2004), [doi](#).
- [49] S. R. White and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **80**, 1272 (1998), [doi](#).
- [50] D. Jérôme, Chem. Rev. **104**, 5565 (2004), [doi](#).
- [51] D. Jérôme and H. J. Schulz, Adv. Phys. **31**, 299 (1982), [doi](#).
- [52] C. Bourbonnais and D. Jérôme, *The normal phase of quasi-one-dimensional organic superconductors*, in *Advances in Synthetic Metals, Twenty years of Progress in Science and Technology*, edited by S. L. P. Bernier and G. Bidan, Proc. of Int. Conf. of Science and Technology of Synthetic Metals (ICSM'98), pp. 206–301, New York, Elsevier, (1999), [eprint](#).
- [53] T. Ishiguro, *Superconductivity Under High Magnetic Fields in Low-Dimensional Organic Salts*, in *High Magnetic Fields*, edited by C. Berthier, L. P. Lévy, and G. Martinez, Lecture notes in physics Vol. 595, p. 301, Springer, (2002), [web](#).
- [54] W. Kang, S. T. Hannahs, and P. M. Chaikin, Phys. Rev. Lett. **70**, 3091 (1993), [doi](#).
- [55] I. J. Lee *et al.*, Phys. Rev. Lett. **88**, 017004 (2001), [doi](#).
- [56] I. J. Lee, P. M. Chaikin, and M. J. Naughton, Phys. Rev. B **62**, 14669(R) (2000), [doi](#).
- [57] I. J. Lee, P. M. Chaikin, and M. J. Naughton, Phys. Rev. B **65**, 180502 (2002), [doi](#).
- [58] R. Casalbuoni and G. Nardulli, Rev. Mod. Phys. **76**, 263 (2004), [doi](#).
- [59] P. Fulde and R. A. Ferrell, Phys. Rev. **135**, A550 (1964), [doi](#).

- [60] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. **47**, 1136 (1964).
- [61] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP **20**, 762 (1965).
- [62] J. Shinagawa *et al.*, *On the superconducting state of the organic conductor (TMTSF)₂ClO₄*, (2007), unpublished, [eprint](#).
- [63] T. M. Rice, Z. Phys. B **103**, 165 (1997), [doi](#).
- [64] M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, and Y. Kitaoka, Phys. Rev. Lett. **73**, 3463 (1994), [doi](#).
- [65] S. R. White, R. M. Noack, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **73**, 886 (1994), [doi](#).
- [66] B. Frischmuth, B. Ammon, and M. Troyer, Phys. Rev. B **54**, 3714(R) (1996), [doi](#).
- [67] Z. Hiroi, M. Azuma, M. Takano, and Y. Bando, J. Solid State Chem. **95**, 230 (1991), [doi](#).
- [68] A. Gellé, *Étude ab initio de la structure électronique des composés d'oxyde de cuivre incommensurables Sr_{14-x}Ca_xCu₂₄O₄₁*, PhD thesis, Université Toulouse III, (2004), [web](#).
- [69] M. Troyer, H. Tsunetsugu, and D. Würtz, Phys. Rev. B **50**, 13515 (1994), [doi](#).
- [70] K. Ishida *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **63**, 3222 (1994), [doi](#).
- [71] K. Ishida *et al.*, Phys. Rev. B **53**, 2827 (1996), [doi](#).
- [72] F. Mila, Eur. Phys. J. B **6**, 201 (1998), [doi](#).
- [73] T. M. Rice, *Low Dimensional Magnets*, in *High Magnetic Fields*, edited by C. Berthier, L. P. Lévy, and G. Martinez, Lecture notes in physics Vol. 595, p. 139, Springer, (2002), [web](#).
- [74] C. A. Hayward, D. Poilblanc, and L. P. Lévy, Phys. Rev. B **54**, 12649(R) (1996), [doi](#).
- [75] G. Chaboussant *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 2713 (1998), [doi](#).
- [76] G. Chaboussant *et al.*, Phys. Rev. Lett. **79**, 925 (1997), [doi](#).
- [77] M. Clemancey *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 167204 (2006), [doi](#).
- [78] B. C. Watson *et al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5168 (2001), [doi](#).
- [79] Z. Honda, K. Katsumata, A. Kikkawa, and K. Yamada, Phys. Rev. Lett. **95**, 087204 (2005), [doi](#).
- [80] C. P. Landee, M. M. Turnbull, C. Galeriu, J. Giantsidis, and F. M. Woodward, Phys. Rev. B **63**, 100402 (2001), [doi](#).
- [81] D. C. Cabra, A. Honecker, and P. Pujol, Phys. Rev. Lett. **79**, 5126 (1997), [doi](#).
- [82] D. C. Cabra, A. Honecker, and P. Pujol, Phys. Rev. B **58**, 6241 (1998), [doi](#).
- [83] E. Dagotto, Rep. Prog. Phys. **62**, 1525 (1999), [doi](#).
- [84] E. Dagotto and T. M. Rice, Science **271**, 618 (1996), [web](#).
- [85] E. Dagotto, J. Riera, and D. Scalapino, Phys. Rev. B **45**, 5744 (1992), [doi](#).
- [86] S. Gopalan, T. M. Rice, and M. Sigrist, Phys. Rev. B **49**, 8901 (1994), [doi](#).
- [87] Z. Hiroi, J. Solid State Chem. **123**, 223 (1996), [doi](#).
- [88] B. Normand, D. F. Agterberg, and T. M. Rice, Phys. Rev. Lett. **82**, 4296 (1999), [doi](#).
- [89] B. Normand and T. M. Rice, Phys. Rev. B **56**, 8760 (1997), [doi](#).
- [90] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979), [doi](#).
- [91] E. Orignac and T. Giamarchi, Phys. Rev. B **56**, 7167 (1997), [doi](#).
- [92] E. Orignac, *Effet de désordre dans les échelles*, PhD thesis, Université Paris Sud, (1998).

- [93] M. Sigrist, AIP Conf. Proc. **789**, 165 (2005), [doi](#).
- [94] E. Orignac, D. Poilblanc, and T. Giamarchi, *Pour la Science* **305**, 58 (2003), [web](#).
- [95] A. Gozar and G. Blumberg, *Collective Spin and Charge Excitations in $(Sr,La)_{14-x}Ca_xCu_{24}O_{41}$ Quantum Spin Ladders*, p. 653, *Frontiers in Magnetic Materials* (Springer-Verlag, 2005), [eprint](#).
- [96] T. Vuletić *et al.*, Phys. Rev. Lett. **90**, 257002 (2003), [doi](#).
- [97] N. Motoyama *et al.*, Europhys. Lett. **58**, 758 (2002), [doi](#).
- [98] M. Uehara *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 2764 (1996), [doi](#).
- [99] T. Osafune, N. Motoyama, H. Eisaki, and S. Uchida, Phys. Rev. Lett. **78**, 1980 (1997), [doi](#).
- [100] K. Magishi *et al.*, Phys. Rev. B **57**, 11533 (1998), [doi](#).
- [101] N. Nücker *et al.*, Phys. Rev. B **62**, 14384 (2000), [doi](#).
- [102] T. Imai, K. R. Thurber, K. M. Shen, A. W. Hunt, and F. C. Chou, Phys. Rev. Lett. **81**, 220 (1998), [doi](#).
- [103] K.-i. Kumagai, S. Tsuji, M. Kato, and Y. Koike, Phys. Rev. Lett. **78**, 1992 (1997), [doi](#).
- [104] R. S. Eccleston, M. Azuma, and M. Takano, Phys. Rev. B **53**, 14721(R) (1996), [doi](#).
- [105] R. S. Eccleston *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1702 (1998), [eprint](#), [doi](#).
- [106] R. Klingeler *et al.*, Phys. Rev. B **73**, 014426 (2006), [doi](#).
- [107] R. Klingeler *et al.*, Phys. Rev. B **72**, 184406 (2005), [doi](#).
- [108] M. Isobe, Y. Uchida, and E. Takayama-Muromachi, Phys. Rev. B **59**, 8703 (1999), [doi](#).
- [109] P. Abbamonte *et al.*, Nature **431**, 1078 (2004), [doi](#).
- [110] G. Blumberg *et al.*, Science **297**, 584 (2002), [doi](#).
- [111] B. Gorshunov *et al.*, Phys. Rev. B **66**, 060508 (2002), [doi](#).
- [112] T. Osafune, N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, and S. Tajima, Phys. Rev. Lett. **82**, 1313 (1999), [doi](#).
- [113] A. Rusydi *et al.*, Phys. Rev. B **75**, 104510 (2007), [doi](#).
- [114] A. Rusydi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 016403 (2006), [doi](#).
- [115] N. Fujiwara *et al.*, J. of Phys. : Condens. Matter **17**, S929 (2005), [doi](#).
- [116] N. Fujiwara *et al.*, Phys. Rev. Lett. **90**, 137001 (2003), [doi](#).
- [117] D. Jérôme, P. Auban-Sauzier, and Y. Piskunov, *Two Prototypes of One-Dimensional Conductors : $(TM)_2X$ and Cuprates Spin Ladders*, in *High Magnetic Fields*, edited by C. Berthier, L. P. Lévy, and G. Martinez, Lecture notes in physics Vol. 595, Springer, (2002), [web](#).
- [118] M. Isobe *et al.*, Phys. Rev. B **57**, 613 (1998), [doi](#).
- [119] H. Mayaffre *et al.*, Science **279**, 345 (1998), [doi](#).
- [120] Y. Piskunov *et al.*, Eur. Phys. J. B **13**, 417 (2000), [doi](#).
- [121] Y. Piskunov *et al.*, Eur. Phys. J. B **24**, 443 (2001), [doi](#).
- [122] Y. Piskunov, D. Jérôme, P. Auban-Senzier, P. Wzietek, and A. Yakubovsky, Phys. Rev. B **69**, 014510 (2004), [doi](#).
- [123] Y. Piskunov, D. Jérôme, P. Auban-Senzier, P. Wzietek, and A. Yakubovsky, Phys. Rev. B **72**, 064512 (2005), [doi](#).
- [124] T. Nakanishi *et al.*, Phys. Rev. B **72**, 054520 (2005), [doi](#).
- [125] T. Nagata *et al.*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1090 (1998), [doi](#).

-
- [126] D. Braithwaite *et al.*, Solid State Com. **114**, 533 (2000), [doi](#).
- [127] T. Yamauchi, Y. Ueda, and N. Mōri, Phys. Rev. Lett. **89**, 057002 (2002), [doi](#).
- [128] S. Sasaki *et al.*, *chain-driven superconductivity of copper oxide identified by nuclear resonance*, (2006), unpublished, [eprint](#).
- [129] M.-L. Doublet and M.-B. Lepetit, Phys. Rev. B **71**, 075119 (2005), [doi](#).
- [130] M. Matsukawa *et al.*, Physica C **411**, 101 (2004), [doi](#).
- [131] M. A. Cazalilla, J. Phys. B **37**, S1 (2004), [doi](#).
- [132] D. Sénéchal, *An Introduction to Bosonization*, in *Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons*, edited by D. Sénéchal, A. M. Tremblay, and C. Bourbonnais, CRM Series in Mathematical Physics, p. 139, Springer, (2003), [eprint](#).
- [133] J. Voit, Rep. Prog. Phys. **58**, 977 (1995), [eprint](#), [doi](#).
- [134] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **47**, 1840 (1981), [doi](#).
- [135] J. L. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge Lecture Notes in Physics No. 5 (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1996), [doi](#).
- [136] I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **56**, 746 (1986), [doi](#).
- [137] S. R. White, I. Affleck, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **65**, 165122 (2002), [doi](#).
- [138] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys **5**, 544 (1950), [doi](#).
- [139] P. Jordan and E. Wigner, Z. Phys. **47**, 631 (1928).
- [140] F. D. M. Haldane, J. Phys. C **14**, 2585 (1981).
- [141] V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **37**, 107 (1976), [doi](#).
- [142] V. J. Emery, A. Luther, and I. Peschel, Phys. Rev. B **13**, 1272 (1976), [doi](#).
- [143] A. Luther and V. J. Emery, Phys. Rev. Lett. **33**, 589 (1974), [doi](#).
- [144] J. M. Kosterlitz, J. Phys. C **7**, 1046 (1974), [doi](#).
- [145] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973), [doi](#).
- [146] G. I. Japaridze and A. A. Nersesyan, JETP Lett. **27**, 334 (1978).
- [147] V. L. Pokrovsky and A. L. Talapov, Phys. Rev. Lett. **42**, 65 (1979), [doi](#).
- [148] H. J. Schulz, Sol. State Comm. **34**, 455 (1980).
- [149] H. J. Schulz, Phys. Rev. B **22**, 5274 (1980), [doi](#).
- [150] M. Oshikawa, M. Yamanaka, and I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **78**, 1984 (1997), [doi](#).
- [151] M. Yamanaka, M. Oshikawa, and I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **79**, 1110 (1997), [doi](#).
- [152] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **119**, 1153 (1960), [doi](#).
- [153] P. Gagliardini, S. Haas, and T. M. Rice, Phys. Rev. B **58**, 9603 (1998), [doi](#).
- [154] F. Alet, A. M. Walczak, and M. P. A. Fisher, Physica A **369**, 122 (2006), [eprint](#), [doi](#).
- [155] M. B. Hastings, Phys. Rev. B **69**, 104431 (2004), [doi](#).
- [156] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **45**, 1358 (1980), [doi](#).
- [157] H. A. Bethe, Z. Phys. **71**, 205 (1931).
- [158] H. J. Schulz, Phys. Rev. Lett. **64**, 2831 (1990), [doi](#).
- [159] T. Giamarchi and B. S. Shastry, Phys. Rev. B **51**, 10915 (1995), [doi](#).
- [160] S. Ejima, F. Gebhard, and S. Nishimoto, Europhys. Lett. **70**, 492 (2005), [doi](#).
- [161] K. Penc and F. Mila, Phys. Rev. B **49**, 9670 (1994), [doi](#).
- [162] F. Mila and X. Zotos, Europhys. Lett. **24**, 133 (1993).
- [163] A. Schwartz *et al.*, Phys. Rev. B **58**, 1261 (1998), [doi](#).

- [164] M. Ogata, M. U. Luchini, S. Sorella, and F. F. Assaad, Phys. Rev. Lett. **66**, 2388 (1991), [doi](#).
- [165] S. P. Strong and A. J. Millis, Phys. Rev. Lett. **69**, 2419 (1992), [doi](#).
- [166] S. P. Strong and A. J. Millis, Phys. Rev. B **50**, 9911 (1994), [doi](#).
- [167] M. Greven, R. J. Birgeneau, and U. J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **77**, 1865 (1996), [doi](#).
- [168] L. Balents and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **53**, 12133 (1996), [doi](#).
- [169] M. Fabrizio, Phys. Rev. B **48**, 15838 (1993), [doi](#).
- [170] M. Fabrizio, A. Parola, and E. Tosatti, Phys. Rev. B **46**, 3159 (1992), [doi](#).
- [171] A. M. Finkel'stein and A. I. Larkin, Phys. Rev. B **47**, 10461 (1993), [doi](#).
- [172] D. V. Khveshchenko and T. M. Rice, Phys. Rev. B **50**, 252 (1994), [doi](#).
- [173] N. Nagaosa, Sol. State Comm. **94**, 495 (1995), [doi](#).
- [174] H. J. Schulz, Phys. Rev. B **53**, 2959(R) (1996), [doi](#).
- [175] H.-H. Lin, L. Balents, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **58**, 1794 (1998), [doi](#).
- [176] H. J. Schulz, *SO(N) symmetries in the two-chain model of correlated fermions*, (1998), unpublished, [eprint](#).
- [177] C. A. Hayward, D. Poilblanc, R. M. Noack, D. J. Scalapino, and W. Hanke, Phys. Rev. Lett. **75**, 926 (1995), [doi](#).
- [178] R. M. Noack, S. R. White, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **73**, 882 (1994), [doi](#).
- [179] D. J. Scalapino, S. R. White, and I. Affleck, Phys. Rev. B **64**, 100506(R) (2001), [doi](#).
- [180] T. Siller, M. Troyer, T. M. Rice, and S. R. White, Phys. Rev. B **63**, 195106 (2001), [doi](#).
- [181] J. O. Fjærestad, J. B. Marston, and U. Schollwöck, Ann. Phys. **321**, 894 (2006), [doi](#).
- [182] U. Schollwöck, S. Chakravarty, J. O. Fjærestad, J. B. Marston, and M. Troyer, Phys. Rev. Lett. **90**, 186401 (2003), [doi](#).
- [183] C. Bourbonnais, *Electronic Phases of Low-Dimensional Conductors*, in *High Magnetic Fields*, edited by C. Berthier, L. P. Lévy, and G. Martinez, Lecture notes in physics Vol. 595, p. 235, Springer, (2002), [eprint](#), [web](#).
- [184] C. Bourbonnais, B. Guay, and R. Wortis, *Renormalization Group Technique for Quasi-one-Dimensional Interacting Fermion Systems at Finite Temperature*, in *Theoretical Methods for Strongly Correlated Electrons*, edited by D. Sénéchal, A. M. Tremblay, and C. Bourbonnais, CRM Series in Mathematical Physics, p. 77, Springer, (2003), [eprint](#).
- [185] T. Giamarchi, Chem. Rev. **104**, 5037 (2004), [doi](#).
- [186] S. Sachdev, Science **288**, 475 (2000), [eprint](#).
- [187] C. Bourbonnais and L. G. Caron, Physica **143B**, 450 (1986).
- [188] C. Bourbonnais and L. G. Caron, Int. J. Mod. Phys. B **5**, 1033 (1991), [doi](#).
- [189] S. Capponi, *Etude théorique du rôle des processus interchaines dans les liquides de Luttinger couplés*, PhD thesis, Université Toulouse III, (1999), [web](#).
- [190] R. M. Konik, T. M. Rice, and A. M. Tsvelik, Phys. Rev. Lett. **96**, 086407 (2006), [doi](#).
- [191] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994), [doi](#).
- [192] F. F. Assaad, *Quantum Monte Carlo Methods on Lattices : The Determinantal Approach*, in *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems : From Theory to Algorithms*, edited by J. Grotendorst, D. Marx, and A. Muramatsu, NIC Vol. 10, p. 99, Jülich, John von Neumann Institute for Computing, (2002), [web](#).

-
- [193] D. M. Ceperley, Rev. Mod. Phys. **67**, 279 (1995), [doi](#).
- [194] S. Sorella and L. Capriotti, Phys. Rev. B **61**, 2599 (2000), [doi](#).
- [195] M. Troyer, F. Alet, S. Trebst, and S. Wessel, AIP Conf. Proc. **690**, 156 (2003), [doi](#).
- [196] T. F. Chan, L. de Pillis, and H. van der Vorst, Numerical Algorithms **17**, 51 (1998), [doi](#).
- [197] N. Laflorencie and D. Poilblanc, *Simulations of Pure and Doped Low-Dimensional Spin-1/2 Gapped Systems*, in *Quantum Magnetism*, edited by U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, and R. Bishop, Lecture Notes in Physics Vol. 645, pp. 227–252, Springer Berlin, (2004), [web](#).
- [198] R. M. Noack and S. R. Manmana, AIP Conf. Proc. **789**, 93 (2005), [doi](#).
- [199] A. Dorneich, *New computational techniques for strongly correlated electron systems*, PhD thesis, Universität Würzburg, (2001), [web](#).
- [200] A. M. Läuchli, *Quantum Magnetism and Strongly Correlated Electrons in Low Dimensions*, PhD thesis, ETH Zürich, (2002), [web](#).
- [201] J. K. Cullum and R. A. Willoughby, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations* Classics in Applied Mathematics Vol. 1 (SIAM, Philadelphia, 2002), [doi](#).
- [202] C. Lanczos, J. Res. Natl. Bur. Stand. **45**, 255 (1950), [web](#).
- [203] G. H. Golub and C. F. V. Loan, *Matrix Computation* (Johns Hopkins University Press, 1996), [web](#).
- [204] E. R. Davidson, J. Comp. Phys. **17**, 87 (1975).
- [205] D. Poilblanc, Phys. Rev. B **44**, 9562 (1991), [doi](#).
- [206] J. Jaklič and P. Prelovšek, Phys. Rev. B **49**, 5065 (1994), [doi](#).
- [207] D. Poilblanc, D. J. Scalapino, and S. Capponi, Phys. Rev. Lett. **91**, 137203 (2003), [doi](#).
- [208] S. R. White, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993), [doi](#).
- [209] S. R. White and R. M. Noack, Phys. Rev. Lett. **68**, 3487 (1992), [doi](#).
- [210] U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005), [doi](#).
- [211] S. R. White, Phys. Rep. **301**, 187 (1998), [doi](#).
- [212] S. R. White and R. Noack, *The Density Matrix Renormalization Group*, in *Density-Matrix Renormalization : a new numerical method in physics*, edited by I. Peschel, X. Wang, M. Kaulke, and K. Hallberg, Lecture Notes in Physics Vol. 528, p. 27, Springer, (1999).
- [213] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975), [doi](#).
- [214] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992), [doi](#).
- [215] S. Capponi, A. Läuchli, and M. Mambrini, Phys. Rev. B **70**, 104424 (2004), [doi](#).
- [216] C. J. Morningstar and M. Weinstein, Phys. Rev. Lett. **73**, 1873 (1994), [doi](#).
- [217] I. Peschel, M. Kaulke, and O. Legeza, Ann. Phys. (Berlin) **8**, 153 (1999), [eprint](#).
- [218] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes : The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, 1986), [web](#).
- [219] J. I. Latorre, E. Rico, and G. Vidal, Quant. Inf. Comput. **4**, 48 (2004), [eprint](#).
- [220] P. Calabrese and J. Cardy, J. Stat. Mech. : Theor. Exp. **6**, 06002 (2004), [doi](#).
- [221] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, Phys. Rev. Lett. **90**, 227902 (2003),

- doi.
- [222] I. P. McCulloch and M. Gulácsi, *Europhys. Lett.* **57**, 852 (2002), [doi](#).
- [223] S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3633 (1996), [doi](#).
- [224] S. R. White, *Phys. Rev. B* **72**, 180403 (2005), [doi](#).
- [225] S. R. White and A. L. Chernyshev, *Neel order in square and triangular lattice Heisenberg models*, (2007), unpublished, [eprint](#).
- [226] A. E. Feiguin, S. R. White, D. J. Scalapino, and I. Affleck, *Probing the pairing symmetry and pair charge stiffness of doped $t - J$ ladders*, (2006), unpublished, [eprint](#).
- [227] G. Misguich, *Modèle d'échange multiple sur réseau triangulaire : Liquide de spins quantiques en deux dimensions et magnétisme des films d' ^3He solide*, PhD thesis, Université Paris 6, (1999), [web](#).
- [228] M. Roger, J. H. Hetherington, and J. M. Delrieu, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 1 (1983), [doi](#).
- [229] D. J. Thouless, *Proc. Phys. Soc.* **86**, 893 (1965), [doi](#).
- [230] V. Gritsev, B. Normand, and D. Baeriswyl, *Phys. Rev. B* **69**, 094431 (2004), [doi](#).
- [231] P. Lecheminant and K. Totsuka, *Phys. Rev. B* **71**, 020407(R) (2005), [doi](#).
- [232] A. Läuchli, G. Schmid, and M. Troyer, *Phys. Rev. B* **67**, 100409 (2003), [doi](#).
- [233] A. Läuchli, J. C. Domenge, C. Lhuillier, P. Sindzingre, and M. Troyer, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 137206 (2005), [doi](#).
- [234] B. Sutherland, *Phys. Rev. B* **12**, 3795 (1975), [doi](#).
- [235] S. Brehmer, H.-J. Mikeska, M. Müller, N. Nagaosa, and S. Uchida, *Phys. Rev. B* **60**, 329 (1999), [doi](#).
- [236] A. Bühler, U. Löw, K. P. Schmidt, and G. S. Uhrig, *Phys. Rev. B* **67**, 134428 (2003), [doi](#).
- [237] K. Hijii and K. Nomura, *Phys. Rev. B* **65**, 104413 (2002), [doi](#).
- [238] K. Hijii, S. Qin, and K. Nomura, *Phys. Rev. B* **68**, 134403 (2003), [doi](#).
- [239] C. Knetter, K. P. Schmidt, and G. S. Uhrig, *Eur. Phys. Jour. B* **36**, 525 (2003), [doi](#).
- [240] M. Müller, T. Vekua, and H.-J. Mikeska, *Phys. Rev. B* **66**, 134423 (2002), [doi](#).
- [241] M. Müller, T. Vekua, and H. J. Mikeska, *Jour. of Magn. and Magn. Mat.* **272**, 904 (2004), [doi](#).
- [242] T. S. Nunner, P. Brune, T. Kopp, M. Windt, and M. Grüninger, *Phys. Rev. B* **66**, 180404 (2002), [doi](#).
- [243] K. P. Schmidt, H. Monien, and G. S. Uhrig, *Phys. Rev. B* **67**, 184413 (2003), [doi](#).
- [244] K. P. Schmidt and G. S. Uhrig, *Mod. Phys. Lett. B* **19**, 1179 (2005), [eprint](#), [doi](#).
- [245] T. Sakai and Y. Hasegawa, *Phys. Rev. B* **60**, 48 (1999), [doi](#).
- [246] C. J. Calzado, C. de Graaf, E. Bordas, R. Caballol, and J.-P. Malrieu, *Phys. Rev. B* **67**, 132409 (2003), [doi](#).
- [247] C. J. Calzado and J.-P. Malrieu, *Phys. Rev. B* **69**, 094435 (2004), [doi](#).
- [248] J.-Y. P. Delannoy, M. J. P. Gingras, P. C. W. Holdsworth, and A.-M. S. Tremblay, *Phys. Rev. B* **72**, 115114 (2005), [doi](#).
- [249] R. Coldea *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5377 (2001), [doi](#).
- [250] A. A. Katanin and A. P. Kampf, *Phys. Rev. B* **66**, 100403(R) (2002), [doi](#).
- [251] A. M. Toader *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 197202 (2005), [doi](#).
- [252] A. Gößling *et al.*, *Phys. Rev. B* **67**, 052403 (2003), [doi](#).

- [253] N. Haga and S.-i. Suga, Phys. Rev. B **67**, 134432 (2003), [doi](#).
- [254] M. Matsuda, K. Katsumata, R. S. Eccleston, S. Brehmer, and H.-J. Mikeska, Phys. Rev. B **62**, 8903 (2000), [doi](#).
- [255] S. Notbohm *et al.*, Phys. Rev. Lett. **98**, 027403 (2007), [doi](#).
- [256] J. des Cloizeaux and J. J. Pearson, Phys. Rev. **128**, 2131 (1962), [doi](#).
- [257] D. Poilblanc, O. Chiappa, J. Riera, S. R. White, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **62**, 14633(R) (2000), [doi](#).
- [258] D. Poilblanc, E. Orignac, S. R. White, and S. Capponi, Phys. Rev. B **69**, 220406(R) (2004), [doi](#).
- [259] N. Dupuis, G. Montambaux, and C. A. R. Sá de Melo, Phys. Rev. Lett. **70**, 2613 (1993), [doi](#).
- [260] H. Frahm and C. Sobiella, Phys. Rev. Lett. **83**, 5579 (1999), [doi](#).
- [261] D. C. Cabra, A. De Martino, A. Honecker, P. Pujol, and P. Simon, Phys. Lett. A **268**, 418 (2000), [doi](#).
- [262] D. C. Cabra, A. De Martino, A. Honecker, P. Pujol, and P. Simon, Phys. Rev. B **63**, 094406 (2001), [doi](#).
- [263] D. C. Cabra, A. De Martino, P. Pujol, and P. Simon, Europhys. Lett. **57**, 402 (2002), [doi](#).
- [264] T. Pruschke and H. Shiba, Phys. Rev. B **46**, 356 (1992), [doi](#).
- [265] K. Yang, Phys. Rev. B **63**, 140511 (2001), [doi](#).
- [266] M. Troyer, H. Tsunetsugu, and T. M. Rice, Phys. Rev. B **53**, 251 (1996), [doi](#).
- [267] M. Y. Kagan, S. Haas, and T. M. Rice, Physica B **284**, 1964 (2000), [eprint](#).
- [268] T. M. Rice, S. Haas, M. Sigrist, and F.-C. Zhang, Phys. Rev. B **56**, 14655 (1997), [doi](#).
- [269] S. R. White and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **57**, 3031 (1998), [doi](#).
- [270] Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966), [doi](#).
- [271] A. Bianchi, R. Movshovich, C. Capan, P. G. Pagliuso, and J. L. Sarrao, Phys. Rev. Lett. **91**, 187004 (2003), [doi](#).
- [272] R. Konik, F. Lesage, A. W. W. Ludwig, and H. Saleur, Phys. Rev. B **61**, 4983 (2000), [doi](#).
- [273] E. Orignac, G. Roux, P. Pujol, and D. Poilblanc, *The $SO(6)$ model for doped two-leg ladder with Zeeman effect*, (2007), unpublished.
- [274] H. Shimahara and D. Rainer, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 3591 (1997), [doi](#).
- [275] A. Buzdin, S. Tollis, and J. Cayssol, Phys. Rev. Lett. **95**, 167003 (2005), [doi](#).
- [276] Y. Ohta, S. Nishimoto, T. Shirakawa, and Y. Yamaguchi, Phys. Rev. B **72**, 012503 (2005), [doi](#).
- [277] Y. Shin, M. W. Zwierlein, C. H. Schunck, A. Schirotzek, and W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **97**, 030401 (2006), [doi](#).
- [278] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Mécanique quantique* (Éditions Mir, New York, 1982), [web](#).
- [279] E. Brown, Phys. Rev. **133**, A1038 (1964), [doi](#).
- [280] W. Kohn, Phys. Rev. **115**, 1460 (1959), [doi](#).
- [281] W. Kohn, Phys. Rev. **133**, A171 (1964), [doi](#).
- [282] R. E. Peierls, Z. Phys. **80**, 763 (1933), [doi](#).

- [283] J. M. Luttinger, Phys. Rev. **84**, 814 (1951), [doi](#).
- [284] P. G. Harper, Proc. Phys. Soc. A **68**, 874 (1955), [doi](#).
- [285] D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B **14**, 2239 (1976), [doi](#).
- [286] S. T. Carr, B. N. Narozhny, and A. A. Nersesyan, Phys. Rev. B **73**, 195114 (2006), [doi](#).
- [287] B. N. Narozhny, S. T. Carr, and A. A. Nersesyan, Phys. Rev. B **71**, 161101(R) (2005), [doi](#).
- [288] E. Orignac and T. Giamarchi, Phys. Rev. B **64**, 144515 (2001), [doi](#).
- [289] A. F. Albuquerque and G. B. Martins, J. Phys. : Condens. Matter **17**, 2419 (2005), [doi](#).
- [290] T. Kjeldaas and W. Kohn, Phys. Rev. **105**, 806 (1957), [doi](#).
- [291] J. E. Hebborn and E. H. Sondheimer, Phys. Rev. Lett. **2**, 150 (1959), [doi](#).
- [292] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Physique des solides* (EDP Sciences, 2003).
- [293] H.-H. Lin, L. Balents, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **56**, 6569 (1997), [doi](#).
- [294] K. Penc and J. Sólyom, Phys. Rev. B **44**, 12690 (1991), [doi](#).
- [295] C. M. Varma and A. Zawadowski, Phys. Rev. B **32**, 7399 (1985), [doi](#).
- [296] K. Binder, Phys. Rev. Lett. **47**, 693 (1981), [doi](#).
- [297] K. Hijii, A. Kitazawa, and K. Nomura, Phys. Rev. B **72**, 014449 (2005), [doi](#).
- [298] Y. Nishiyama, Eur. Phys. J. B **17**, 295 (2000), [doi](#).
- [299] R. Assaraf, P. Azaria, M. Caffarel, and P. Lecheminant, Phys. Rev. B **60**, 2299 (1999), [doi](#).
- [300] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, *Many-Body Physics with Ultracold Gases*, (2007), unpublished, [eprint](#).
- [301] P. Lecheminant, E. Boulat, and P. Azaria, Phys. Rev. Lett. **95**, 240402 (2005), [doi](#).

Résumé

Cette thèse aborde des questions relatives à la physique des échelles de spins dopées connues pour être un supraconducteur quasi-unidimensionnel et non conventionnel. Un accent particulier est mis sur les propriétés sous champ magnétique. Les modèles d'électrons fortement corrélés sur ces échelles sont étudiés en utilisant les méthodes numériques adaptées à la physique unidimensionnelle que sont la diagonalisation exacte et le groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG). Les résultats sont également éclairés par les interprétations issues de la théorie du liquide de Luttinger. La prise en compte d'un terme d'échange cyclique met tout d'abord en évidence le rôle des fluctuations magnétiques dans le mécanisme d'appariement des trous. Son influence sur la dynamique des excitations de spin est également présentée. Ces excitations sont ensuite sondées en couplant le spin des électrons au champ magnétique par effet Zeeman. On montre alors l'existence de plateaux d'aimantation contrôlés par le dopage en trous ainsi que d'une phase supraconductrice inhomogène de type FFLO associée à un dépassement de la limite de Pauli. Lorsqu'un flux traverse l'échelle, le champ magnétique se couple à la charge de l'électron par effet orbital. La réponse diamagnétique orbitalaire de l'échelle dopée permet de sonder les phases commensurables du modèle t-J présentes à faible J/t . Des fluctuations de courant transverse sont également observées dès que le champ magnétique est branché. Enfin, ce manuscrit rapporte des résultats numériques sur le modèle de Hubbard attractif de spin $3/2$ qui révèlent l'existence d'une phase moléculaire superfluide d'états liés à quatre fermions : les quartets. La compétition observée entre fluctuations de charge et superfluidité est mise en perspective avec les résultats sur les échelles dopées.

Abstract

This thesis deals with the physics of doped two-leg ladders which are a quasi one-dimensional and unconventional superconductor. We particularly focus on the properties under magnetic field. Models for strongly correlated electrons on ladders are studied using exact diagonalization and density-matrix renormalization group (DMRG). Results are also enlightened by using the bosonization technique. Taking into account a ring exchange highlights the relation between the pairing of holes and the spin gap. Its influence on the dynamics of the magnetic fluctuations is also tackled. Afterwards, these excitations are probed by the magnetic field by coupling it to the spin degree of freedom of the electrons through Zeeman effect. We show the existence of doping-dependent magnetization plateaus and also the presence of an inhomogeneous superconducting phase (FFLO phase) associated with an exceeding of the Pauli limit. When a flux passes through the ladder, the magnetic field couples to the charge degree of freedom of the electrons via orbital effect. The diamagnetic response of the doped ladder probes the commensurate phases of the t-J model at low J/t . Algebraic transverse current fluctuations are also found once the field is turned on. Lastly, we report numerical evidences of a molecular superfluid phase in the spin- $3/2$ attractive Hubbard model: at a density low enough, bound states of four fermions, called quartets, acquire dominant superfluid fluctuations. The observed competition between the superfluid and density fluctuations is connected to the physics of doped ladders.
