

# Chapitre 3

## Réseaux optiques dans le régime des liaisons fortes

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Les fonctions de Wannier</b> . . . . .	<b>2</b>
1-1	Une nouvelle base . . . . .	2
1-2	Fonctions de Wannier dans l'espace réciproque . . . . .	3
1-3	L'hamiltonien en termes de fonctions de Wannier . . . . .	3
1-4	Le cas multi-dimensionnel . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Potentiel sinusoïdal fortement modulé</b> . . . . .	<b>5</b>
2-1	Largeur des bandes permises . . . . .	5
2-2	Éléments de matrice des sauts entre voisins . . . . .	5
2-3	Spectre de liaisons fortes . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Hamiltonien de Hubbard</b> . . . . .	<b>7</b>
3-1	L'hamiltonien à une particule (pas d'interaction) . . . . .	7
3-2	Le signe du coefficient tunnel . . . . .	8
3-3	Les interactions dans le modèle de Hubbard . . . . .	8
3-4	Illustration : les paires répulsives liées . . . . .	10
<b>4</b>	<b>Le cas d'un super-réseau</b> . . . . .	<b>12</b>
4-1	L'arbitraire de phase . . . . .	12
4-2	Le mélange de différentes bandes . . . . .	12
4-3	L'hamiltonien de Hubbard pour le super-réseau . . . . .	13
4-4	Bandes plates . . . . .	14
<b>5</b>	<b>Références</b> . . . . .	<b>17</b>

---

Les ondes de Bloch décrites au cours précédent sont au mouvement dans un potentiel périodique ce que les ondes planes sont au mouvement d'une particule libre. États propres de l'hamiltonien et de l'opérateur translation, elles sont délocalisées dans tout l'espace. Elles forment une base orthogonale de l'espace des états, qu'on peut normaliser au sens habituel des bases continues en imposant

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n,q}^*(x) \psi_{n',q'}(x) dx = \delta_{n,n'} \delta(q - q'), \quad (3.1)$$

où le premier  $\delta$ , portant sur l'indice de bande  $n$ , est un symbole de Kronecker et le second  $\delta$ , portant sur le quasi-moment  $q$ , une distribution de Dirac. On s'est placé ici à une dimension pour simplifier les notations, mais l'extension à plusieurs dimensions est immédiate.

Pour de nombreux problèmes, il est utile d'introduire une deuxième base de l'espace de Hilbert, elle aussi orthonormée et constituée de fonctions localisées au voisinage des minima locaux du réseau (« sites ») appelées *fonctions de Wannier* (Wannier 1937). L'hamiltonien à une particule écrit dans la base des fonctions de Wannier est très intuitif : il correspond à des termes de sauts entre sites plus ou moins proches, dont l'amplitude dépend de la hauteur des barrières de potentiel entre puits.

Dans la limite des *liaisons fortes*, qui correspond pour le potentiel sinusoïdal  $V_0 \sin^2(kx)$  à la situation où  $V_0$  est grand devant l'énergie de recul  $E_r$ , on peut se limiter à des sauts entre sites adjacents. Nous étudierons cette limite, en nous plaçant dans la situation où seule une bande d'énergie, la

bande fondamentale par exemple, contribue de manière significative à la dynamique. On obtient alors l'*hamiltonien de Hubbard*, qui permet d'illustrer de nombreux phénomènes physiques. Nous montrerons en particulier comment prendre en compte les interactions entre particules dans le cadre de ce modèle, et nous donnerons quelques exemples de formes de bandes d'énergie très intéressante qui apparaissent pour des réseaux de forme plus complexe que le simple cas sinusoidal.

## 1 Les fonctions de Wannier

### 1-1 Une nouvelle base

Pour définir la base des fonctions de Wannier, on commence par se donner une série de points équidistants  $x_j, j \in \mathbb{Z}$ , séparés les uns des autres par la distance  $a$ . Dans la suite, nous prendrons ces points aux minima du potentiel  $V(x) : x_j = ja = j\lambda/2$ . On définit alors la fonction de Wannier  $w_{j,n}$  pour la bande  $n$  par :

$$w_{n,j}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \psi_{n,q}(x) e^{-ijaq} dq, \quad (3.2)$$

Il est immédiat de montrer à partir de la définition (3.2) que les fonctions de Wannier  $w_{n,j}$  se déduisent les unes des autres (à  $n$  donné) par translation :

$$w_{n,0}(x - ja) = w_{n,j}(x). \quad (3.3)$$

Il suffit donc de caractériser les fonctions de Wannier  $w_{n,0}(x)$  pour les connaître toutes. La définition (3.2) peut s'inverser pour donner<sup>1</sup>

$$\psi_{n,q}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \sum_{j \in \mathbb{Z}} w_{n,0}(x - ja) e^{ijaq}, \quad (3.5)$$

1. On utilise pour les fonctions en jeu ici la relation

$$\sum_{j \in \mathbb{Z}} e^{iqja} = (2\pi/a) \delta(q). \quad (3.4)$$

où la distribution  $\delta(q)$  est à un élément du réseau réciproque près (les multiples de  $2\pi/a$  à 1D).

et, pour la partie périodique  $u_{n,q}$  des ondes de Bloch :

$$u_{n,q}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \sum_{j \in \mathbb{Z}} w_{n,0}(x - ja) e^{-iq(x-ja)}. \quad (3.6)$$

La définition des fonctions de Wannier dépend de la phase qu'on donne à chaque onde de Bloch, cette phase étant à ce stade arbitraire. Pour un potentiel symétrique par réflexion [ $V(x) = V(-x)$ ] et pour des bandes d'énergie  $I_n$  disjointes, Kohn (1959) a montré qu'il y a un choix unique pour cette phase qui garantit que la fonction de Wannier (i) est réelle, (ii) est paire ou impaire vis à vis de  $x = 0$  ou  $x = a/2$ , (iii) décroît exponentiellement vite à l'infini. Pour le réseau en  $\sin^2(kx)$ , un choix de phase pertinent correspond à prendre  $\psi_{n,q}(0)$  réel positif pour tout  $q$  si  $n$  est pair, et  $d\psi_{n,q}/dx|_{x=0}$  réel positif si  $n$  est impair. Ceci entraîne

$$\psi_{n,q}(-x) = \psi_{n,q}^*(x) = \psi_{n,-q}(x). \quad (3.7)$$

On vérifie alors à partir de la définition (3.2) que la fonction de Wannier  $w_{0,0}(x)$  est paire vis à vis de  $x = 0$ . Les fonctions de Wannier associées au site  $j = 0$  pour plusieurs valeurs du potentiel  $V_0$  sont tracées sur la figure 3.1. Pour un potentiel nul, cette fonction de Wannier est proportionnelle<sup>2</sup> à  $\text{sinc}(kx)$ .

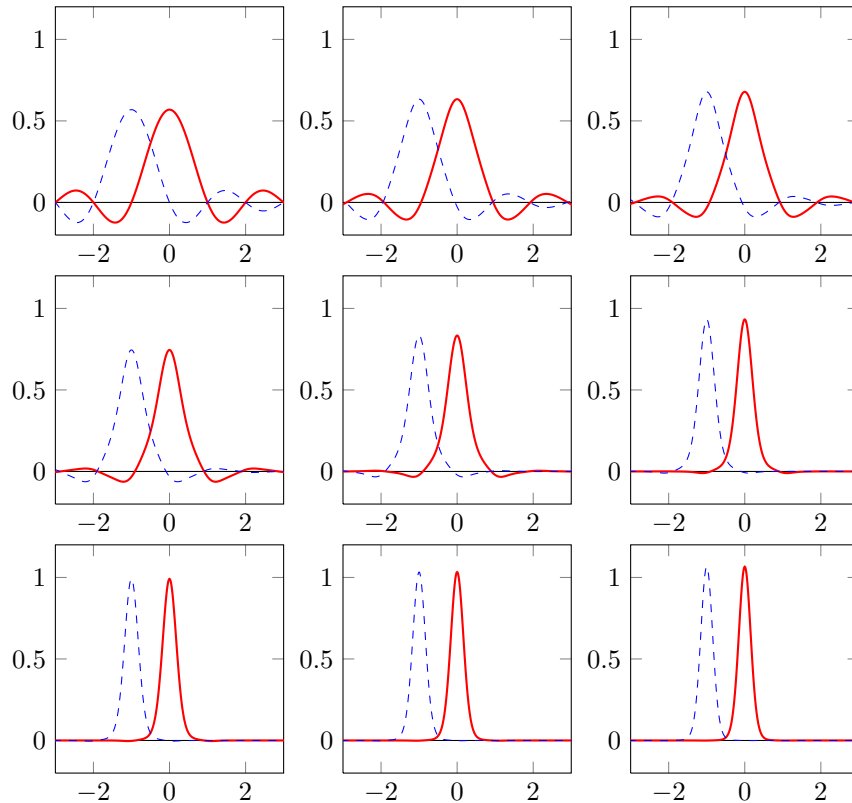
En utilisant le fait que les fonctions de Bloch forment une base orthonormée de l'espace des fonctions de carré sommable de la variable  $x$ , on peut facilement vérifier en utilisant (3.2-3.5) que l'ensemble des fonctions de Wannier forme lui aussi une base orthonormée de l'espace des fonctions :

$$\int w_{n,j}(x) w_{n',j'}(x) dx = \delta_{n,n'} \delta_{j,j'}. \quad (3.8)$$

Notons que chaque fonction de Wannier  $w_{n,j}(x)$  doit nécessairement prendre des valeurs positives et négatives, pour assurer l'orthogonalité entre elle-même et la fonction de Wannier décalée d'une quantité  $a$ ,  $w_{n,j \pm 1}(x)$ .

2. Elle ne décroît pas exponentiellement à l'infini car l'hypothèse de W. Kohn de bandes d'énergie disjointes n'est pas vérifiée.

**Fonctions de Wannier pour la bande fondamentale**



**FIGURE 3.1.** Fonctions de Wannier  $w_{0,0}(x)$  en fonction de  $kx/\pi$  pour le potentiel périodique  $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$ . De gauche à droite, et de haut en bas :  $V_0/E_x = (0, 0.5, 1)$  ;  $(2, 4, 8)$  ;  $(12, 16, 20)$ . Les pointillés indiquent la fonction de Wannier décalée d'un site ( $w_{0,-1}(x)$ ).

**1-2 Fonctions de Wannier dans l'espace réciproque**

Définissons la transformée de Fourier  $\tilde{w}_n(\kappa)$  de la fonction de Wannier centrale  $w_{n,0}(x)$  :

$$\tilde{w}_n(\kappa) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} w_{n,0}(x) e^{-ix\kappa} dx. \tag{3.9}$$

Il est alors assez simple de montrer que cette fonction est directement reliée au développement de la fonction de Bloch sur la base des ondes planes. Plus précisément, on a

$$\psi_{n,q}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sum_{j \in \mathbb{Z}} \tilde{w}_n(q + 2\pi j/a) e^{ix(q+2\pi j/a)}. \tag{3.10}$$

On pourra prouver ce résultat soit en reportant la définition (3.2) dans la transformée de Fourier (3.9), soit en utilisant la formule sommatoire de Poisson.

Cette formule donne un nouvel éclairage sur les fonctions de Wannier : le module carré de leur transformée de Fourier donne le poids des différentes composantes du peigne d'impulsion qui forme chaque fonction de Bloch. Notons qu'en absence de réseau, on sait que les fonctions de Bloch sont des ondes planes : une seule dent du peigne est non nulle ; par exemple, pour la bande fondamentale,  $\psi_{0,q}(x) \propto e^{ixq}$  pour  $q$  dans l'intervalle  $]-\pi/a, +\pi/a]$  correspondant à la zone de Brillouin. La transformée de Fourier  $\tilde{w}_0(\kappa)$  est alors une fonction créneau, constante sur cet intervalle [égale à  $(a/2\pi)^{1/2}$ ] et nulle partout ailleurs.

**1-3 L'hamiltonien en termes de fonctions de Wannier**

Dans la base des fonctions de Bloch, l'hamiltonien décrivant le mouvement d'une particule est par définition diagonal

$$H = \sum_n \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dq E_n(q) |\psi_{n,q}\rangle \langle \psi_{n,q}| = \sum_n \int dq E_n(q) \hat{a}_{n,q}^\dagger \hat{a}_{n,q}, \tag{3.11}$$

où nous avons adopté dans le membre de droite une notation en seconde quantification, plus commode pour traiter ultérieurement les problèmes

d'interaction entre particules. Dans cette notation, l'opérateur  $\hat{a}_{n,q}$  détruit une particule dans l'onde de Bloch  $\psi_{n,q}$ .

Le changement de base (3.5), qui s'écrit en seconde quantification

$$\hat{a}_{n,q} = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \sum_j e^{ijaq} \hat{b}_{n,j}, \quad (3.12)$$

où  $\hat{b}_{n,j}$  détruit une particule dans la fonction de Wannier  $w_{n,j}$ , conduit à l'expression suivante pour l'hamiltonien :

$$\hat{H} = \sum_n \sum_{j,j'} J_n(j-j') \hat{b}_{n,j}^\dagger \hat{b}_{n,j'}. \quad (3.13)$$

L'interprétation de cet hamiltonien est simple : il décrit le saut de la particule du site  $x_{j'} = j'a$  vers le site  $x_j = ja$  avec l'amplitude  $J_n(j-j')$  qui dépend que la bande  $n$  considérée et de la distance entre les deux sites. Par construction,  $J_n(j-j')$  est égal à l'élément de matrice de l'hamiltonien entre deux fonctions de Wannier

$$J_n(j) = \int w_{n,j}^*(x) \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right) w_{n,0}(x) dx, \quad (3.14)$$

et vérifie la propriété

$$J_n(-j) = J_n^*(j), \quad (3.15)$$

qui garantit que  $\hat{H}$  dans (3.13) est hermitien. Si les fonctions de Wannier peuvent être choisies réelles,  $J_n(j)$  est également réel et  $J_n(-j) = J_n(j)$ .

L'élément de matrice  $J_n(j)$  s'écrit en fonction des énergies  $E_n(q)$  :

$$J_n(j) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dq E_n(q) e^{ijaq}, \quad (3.16)$$

relation qui peut s'inverser pour donner

$$E_n(q) = \sum_{j \in \mathbb{Z}} J_n(j) e^{-ijaq}, \quad (3.17)$$

$$= 2 \sum_{j=1}^{\infty} J_n(j) \cos(jaq), \quad (3.18)$$

où la deuxième ligne est vraie si les fonctions de Wannier peuvent être choisies réelles. Bandes d'énergies et amplitudes de sauts entre voisins (plus ou moins proches) sont donc reliées par des relations de type transformée de Fourier. Le coefficient  $J_n(0)$  correspond simplement à la moyenne uniforme de l'énergie  $E_n(q)$  sur la zone de Brillouin.

#### 1-4 Le cas multi-dimensionnel

Considérons une particule mobile à trois dimensions dans le potentiel périodique

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \sin^2(kx) + V_0' \sin^2(ky) + V_0'' \sin^2(kz). \quad (3.19)$$

Comme l'hamiltonien peut s'écrire comme la somme  $\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$ , on peut chercher ses états propres sous la forme de produits d'ondes de Bloch selon chacune des directions :

$$\Psi_{\mathbf{n},\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \psi_{n_x,q_x}(x) \psi_{n_y,q_y}(y) \psi_{n_z,q_z}(z), \quad (3.20)$$

le quasi-moment  $\mathbf{q}$  étant choisit dans la première zone de Brillouin qui est dans ce cas un cube centré en 0 et de côté  $2\pi/a$ .

On peut définir comme pour le cas uni-dimensionnel des fonctions de Wannier associées à chaque site du réseau cubique  $\mathbf{j}a = (j_x, j_y, j_z)a$  :

$$w_{\mathbf{n},\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{3/2} \int_{\text{Z.B.}} \Psi_{\mathbf{n},\mathbf{q}}(\mathbf{r}) d^3q = w_{n_x,j_x}(x) w_{n_y,j_y}(y) w_{n_z,j_z}(z). \quad (3.21)$$

On peut de même définir et calculer les éléments de matrice de l'hamiltonien entre deux fonctions de Wannier quelconques :

$$\langle w_{\mathbf{n},\mathbf{j}} | \hat{H} | w_{\mathbf{n}',\mathbf{j}'} \rangle = \int w_{\mathbf{n},\mathbf{j}}(\mathbf{r}) (\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z) w_{\mathbf{n}',\mathbf{j}'}(\mathbf{r}) d^3r. \quad (3.22)$$

Comme à 1D, ces coefficients ne sont non nuls que si  $\mathbf{n} = \mathbf{n}'$  : les « sauts » d'un site à l'autre ne se font qu'à l'intérieur d'une même bande, ce qui est naturel puisque ces bandes correspondent à des sous-espaces propres de l'hamiltonien. Un autre résultat, plus surprenant à première vue, apparaît quand on évalue (3.22) : les sauts ne peuvent se faire que selon les axes du réseau. En effet, l'élément de matrice (3.22) s'écrit comme la somme de

trois termes provenant des contributions de  $\hat{H}_x$ ,  $\hat{H}_y$ ,  $\hat{H}_z$ , la contribution de  $\hat{H}_x$  par exemple s'écrivant

$$\left( \int w_{n_x, j_x} \hat{H}_x w_{n_x, j'_x} dx \right) \delta_{j_y, j'_y} \delta_{j_z, j'_z} = J_{n_x} (j_x - j'_x) \delta_{j_y, j'_y} \delta_{j_z, j'_z}. \quad (3.23)$$

Les sauts selon les diagonales du réseau sont bien sûr présents *in fine* dans cette description, mais ils résultent de combinaisons de sauts selon les axes  $x, y, z$ . Cette remarque indique qu'il faut se méfier du caractère apparemment très intuitif des fonctions de Wannier : ce sont des outils de calcul puissants, en particulier dans le cas des potentiels fortement modulés que nous allons étudier ci-dessous, mais ils ont également certains aspects déroutants ; nous en verrons un autre exemple plus loin lorsque nous discuterons les conséquences de l'arbitraire de phase des fonctions de Bloch.

## 2 Potentiel sinusoïdal fortement modulé

Intéressons-nous maintenant au cas important en pratique des potentiels à forte modulation  $V_0 \gg E_r$ . Dans cette limite, on s'attend à ce que l'influence de l'effet tunnel, qui permet à une particule de sauter d'un puits à un puits voisin même si son énergie est inférieure à  $V_0$ , devienne de plus en plus faible. Si l'effet tunnel joue un rôle négligeable, on prévoit que les niveaux d'énergie seront similaires à ceux de chaque puits individuel, au moins pour les énergies  $E \ll V_0$ . Les bandes d'énergie doivent donc s'affiner, pour tendre vers des niveaux d'énergie discrets.

### 2-1 Largeur des bandes permises

L'étude quantitative des états propres et des énergies associées confirme ce scénario. Commençons par regarder comment la largeur  $W_n$  des bandes varie avec  $V_0$ . Cette variation est tracée sur la figure 3.2 pour les quatre premières bandes d'énergie et on y voit une décroissance rapide de  $W_n$  avec  $V_0$ . Dans la limite des grands  $V_0$ , on peut établir une expression analytique approchée pour les largeurs des bandes les plus basses (Campbell 1955). En particulier, on obtient pour la bande fondamentale une décroissance

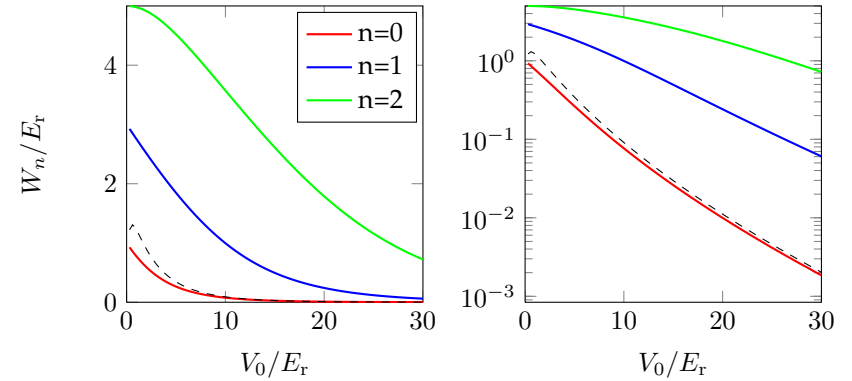


FIGURE 3.2. Courbes continues : largeur  $W_n$  des trois premières bandes d'énergie du potentiel sinusoïdal en fonction de  $V_0$ , en coordonnées linéaires (à gauche) et logarithmiques (à droite). La courbe en tiret est la valeur asymptotique (3.24) pour la largeur de la bande fondamentale.

exponentielle de la largeur avec  $(V_0/E_r)^{1/2}$  :

$$\frac{W_0}{E_r} \approx \frac{16}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{V_0}{E_r} \right)^{3/4} \exp \left[ -2 \left( \frac{V_0}{E_r} \right)^{1/2} \right], \quad (3.24)$$

prédiction tracée en ligne tiretée sur la figure (3.2). La précision relative de cette approximation est meilleure que 20% dès que  $V_0 > 10 E_r$ .

### 2-2 Éléments de matrice des sauts entre voisins

À cette réduction de la largeur des bandes les plus basses est associée une localisation de plus en plus forte des fonctions de Wannier, clairement visible sur la figure 3.1. Cette forte localisation des fonctions de Wannier a elle-même une conséquence sur les amplitudes de sauts  $J_n(j)$  qui caractérisent l'hamiltonien (3.13). Si les fonctions de Wannier  $w_{n,0}(x)$  et  $w_{n,j}(x)$  ne prennent pas de valeurs significatives en une même région de l'espace, l'amplitude de saut  $J_n(j)$  donnée en (3.14) est négligeable. Plus précisément, on peut montrer que l'amplitude  $J_n(j)$  décroît exponentiellement avec la distance  $j$ , avec la même distance caractéristique que la fonction de

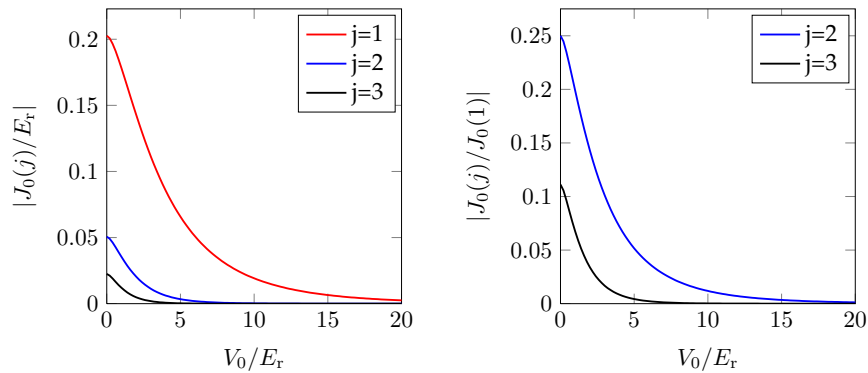


FIGURE 3.3. Éléments de matrice associés aux sauts de longueur  $j$ , en fonction de  $V_0$ .

Wannier elle-même. Quand  $V_0/E_r$  augmente, les amplitudes  $J_n(j)$  ( $j \geq 2$ ) pour les sauts « à longue portée » de longueur  $j$  décroissent donc plus vite que l'amplitude  $J_n(1)$  des sauts entre proches voisins. On a tracé sur la figure 3.3 la variation des éléments de matrice associés aux sauts  $J_0(j)$  ainsi que les rapports  $J_0(j)/J_0(1)$  pour les premières valeurs de  $j$ , en se limitant à la bande fondamentale  $n = 0$ . On note en particulier que pour  $V_0 \gtrsim 10 E_r$ , tous les éléments de matrice pour les sauts « distants », c'est-à-dire  $j > 1$ , sont inférieures à 1% de l'élément de matrice pour un saut entre proches voisins ( $j = 1$ ). Si on considère que dans cette situation les amplitudes  $J_0(j)$  ( $j \geq 2$ ) peuvent être négligées, on réalise alors le régime des liaisons fortes, où la dynamique des atomes dans le réseau est régie quasi-exclusivement par les sauts entre proches voisins.

Quand la largeur de  $w_{0,0}(x)$  devient très petite devant la période  $a$  du potentiel, au plus un terme de la somme (3.5) contribue en un point  $x$  donné. On en déduit que dans ce cas asymptotique, la distribution de probabilité  $|\psi_{n,q}(x)|^2$  ne dépend pas de  $q$  et est à peu près égale à la somme de la distribution de probabilité des fonctions de Wannier.

### 2-3 Spectre de liaisons fortes

Considérons le cas limite des très grands  $V_0$ , pour lequel l'effet tunnel entre puits voisins devient très faible, au moins pour les énergies permises les plus basses. On peut alors étudier le spectre du mouvement d'une particule en linéarisant le potentiel de piégeage au voisinage du fond du potentiel, soit pour le puits centré sur  $x = 0$  :

$$kx \ll 1 \quad \Rightarrow \quad V(x) \approx V_0 k^2 x^2. \quad (3.25)$$

En fait, pour  $|kx| = 1/2$ , cette approximation harmonique est valable avec une précision de 10%. On obtient alors un hamiltonien d'oscillateur harmonique, de pulsation  $\omega$  telle que

$$\hbar\omega = 2\sqrt{V_0 E_r}, \quad (3.26)$$

avec un spectre en  $(n + 1/2)\hbar\omega$ . Une condition nécessaire pour que cette approximation harmonique soit valable pour les premiers niveaux de l'oscillateur est que l'extension de l'état fondamental

$$a_{\text{oh}} = (\hbar/m\omega)^{1/2} \quad (3.27)$$

vérifie l'hypothèse de (3.25),  $ka_{\text{oh}} \ll 1$ , ce qui peut encore s'écrire

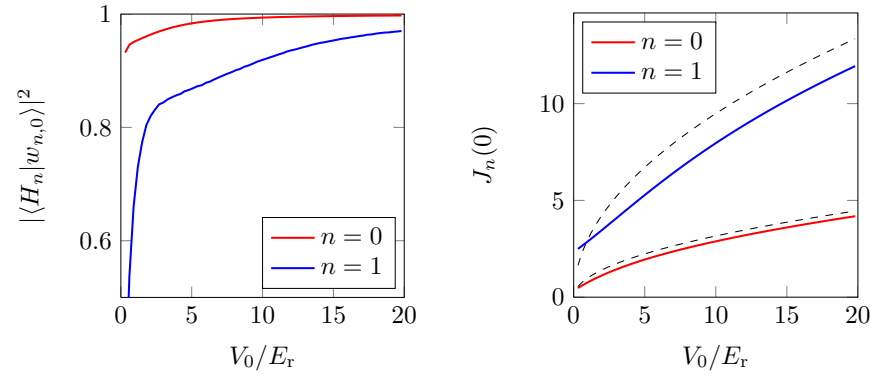
$$ka_{\text{oh}} = (E_r/V_0)^{1/4} \ll 1. \quad (3.28)$$

On a alors la succession d'inégalités :

$$E_r \ll \hbar\omega \ll V_0. \quad (3.29)$$

Le critère (arbitraire)  $ka_{\text{oh}} \leq 1/2$  entraîne  $V_0/E_r \geq 16$ , ou encore  $\omega \geq 8\omega_r$ . Avec cette contrainte « minimale », on trouve deux états liés ( $E_0 \approx 4E_r$ ,  $E_1 \approx 12E_r$ ) à l'intérieur de chaque puits de potentiel.

On a tracé pour  $n = 1, 2$  sur la figure 3.4 (gauche) le module carré du produit scalaire entre la fonction de Wannier  $w_{n,0}(x)$  et l'état attendu pour un potentiel harmonique, la fonction de Hermite  $H_n(x)$ . Pour la bande fondamentale, ce recouvrement prend très vite des valeurs proches de 1 ( $> 0.97$  pour  $V_0/E_r > 3$ ). La figure 3.4 (droite) compare les énergies moyennes des deux premières bandes  $\bar{E}_n = J_n(0)$ , avec la prédiction



**FIGURE 3.4.** Gauche : recouvrement  $|\langle H_n | w_{n,0} \rangle|^2$  entre les fonctions de Wannier  $w_{n,0}(x)$  et les fonctions de Hermite  $H_n(x)$ . Droite : énergies moyennes  $\bar{E}_n = J_n(0)$ , comparées à la valeur attendue pour un puits harmonique  $(n + 1/2)\hbar\omega$ .

$(n + 1/2)\hbar\omega$ . Les énergies moyennes réelles sont inférieures à la prédiction harmonique (d'une quantité  $\sim E_r$ ), ce qui s'explique bien en considérant la première correction « sub-harmonique » au potentiel  $\sin^2(kx)$ .

Dans la suite, nous utiliserons fréquemment l'expression approchée pour la fonction de Wannier de la bande fondamentale  $w_{0,0}(x) \approx H_0(x)$ , ce qui s'écrit explicitement

$$w_{0,0}(x) \approx \frac{1}{(\pi a_{\text{oh}}^2)^{1/4}} e^{-x^2/(2a_{\text{oh}}^2)}. \quad (3.30)$$

### 3 Hamiltonien de Hubbard

Dans le cas d'un potentiel de forte modulation, on peut souvent se limiter à des états qui appartiennent à la bande fondamentale. Ceci correspond à une diminution considérable de l'espace de Hilbert et permet de simplifier fortement les notations et les calculs. Nous allons détailler ici les principaux ingrédients de cette approche sur le cas très simple du potentiel en  $V_0 \sin^2(kx)$  que nous avons considéré jusqu'à maintenant. Nous verrons comment introduire les interactions dans ce formalisme et nous

illustrerons leur rôle sur une expérience remarquable, la mise en évidence de paires d'atomes liées, bien qu'étant en interaction répulsive.

Notons que le potentiel sinusoïdal considéré dans ce paragraphe a la particularité de n'avoir qu'un site dans sa cellule unité, ce qui rend le traitement de la physique à une particule très simple. Nous reviendrons un peu plus tard sur ce modèle de Hubbard dans le cas un peu plus compliqué (et plus riche) de cellules unités à deux sites.

#### 3-1 L'hamiltonien à une particule (pas d'interaction)

Plaçons-nous donc dans cette approximation et supposons de plus que seuls les éléments de matrice  $J_{n=0}(j=0)$  (sur site) et  $J_{n=0}(j=1)$  (entre proches voisins) prennent des valeurs significatives. Le terme  $\bar{E}_0 = J_0(0)$  est une constante donnant l'énergie sur site, que nous décalerons à partir de maintenant à  $\bar{E}_0 = 0$ . En posant

$$J = -J_{n=0}(j=1), \quad J \text{ étant alors positif}, \quad (3.31)$$

l'hamiltonien est alors très simple

$$\hat{H} = -J (\hat{T} + \hat{T}^\dagger) \quad (3.32)$$

où  $\hat{T}$  est l'opérateur qui translate la particule d'un site vers la droite :

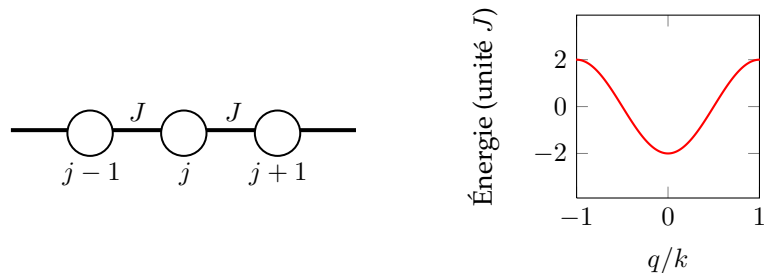
$$\hat{T} = \sum_{j \in \mathbb{Z}} |w_{j+1}\rangle \langle w_j|. \quad (3.33)$$

Nous avons noté les fonctions de Wannier  $w_j \equiv w_{0,j}$  puisque nous limitons notre espace de travail à la bande  $n=0$ . Nous utiliserons aussi une écriture du même hamiltonien en seconde quantification :

$$\hat{H} = -J \sum_j \hat{b}_{j+1}^\dagger \hat{b}_j + \text{h.c.}, \quad (3.34)$$

où  $\hat{b}_j^\dagger$  crée une particule sur le site  $j$  avec la fonction d'onde  $w_j(x)$ .

Dans ce modèle de Hubbard, représenté graphiquement sur la figure 3.5, la seule fonction périodique sur le réseau est dans cette approximation



**FIGURE 3.5.** Représentation graphique du modèle de Hubbard 1D décrit par l'hamiltonien (3.34) à gauche, et spectre correspondant à droite (cf. eq. (3.38)).

à une bande :

$$|u\rangle = \sum_j |w_j\rangle \quad (3.35)$$

et les états de Bloch sont de la forme

$$|\psi_q\rangle = \sum_j e^{ijaq} |w_j\rangle. \quad (3.36)$$

Si on reporte cette forme dans l'équation aux valeurs propres pour l'hamiltonien, on obtient l'équation très simple

$$-J (e^{iaq} + e^{-iaq}) = E \quad (3.37)$$

c'est-à-dire

$$E(q) = -2J \cos(aq), \quad (3.38)$$

Le spectre  $E_0(q) \equiv E(q)$  de la bande fondamentale est donc sinusoïdal dans ce cas, ce qui était prévisible puisqu'on ne garde qu'une seule de ses composantes de Fourier dans (3.17).

La bande fondamentale a pour largeur<sup>3</sup>  $4J$ . Cette largeur peut être identifiée avec l'expression approchée (3.24) obtenue dans la limite  $V_0 \gg E_r$ , ce qui fournit l'expression approchée de  $J$

$$\frac{J}{E_r} \approx \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{V_0}{E_r} \right)^{3/4} \exp \left[ -2 \left( \frac{V_0}{E_r} \right)^{1/2} \right]. \quad (3.39)$$

3. Dans le cas carré à 2D (cubique à 3D), chaque atome a 4 (6) proches voisins, et la largeur de cette bande devient  $8J$  ( $12J$ ).

### 3-2 Le signe du coefficient tunnel

Nous avons indiqué lors de la définition de l'élément de matrice tunnel  $J$  du modèle de liaisons fortes [cf. (3.31)] que ce coefficient est toujours positif. Ceci entraîne que l'état de Bloch  $|\psi_{q=0}\rangle$ , d'énergie  $-2J$  est l'état fondamental de la particule sur le réseau. Au contraire, si  $J$  était négatif, l'état fondamental serait  $|\psi_{q=k}\rangle$ , d'énergie  $+2J$ .

Pour prouver cette propriété, utilisons le théorème de Sturm–Liouville. Restreignons-nous à un réseau de taille finie  $L$  (multiple de  $a$ ). Le potentiel  $V(x)$  étant régulier, on sait qu'on peut classer les états propres de l'hamiltonien par énergie croissante en fonction du nombre de leur nœuds : l'état fondamental n'a pas de zéro, le premier état excité a un nœud, etc. Dans un double puits par exemple, l'état antisymétrique est toujours au dessus de l'état symétrique. Or la fonction de bord de bande  $\psi_k(x)$  vérifie

$$\psi_k(x) = \sum_j (-1)^j w_j(x) \quad \Rightarrow \quad \psi_k(x+a) = -\psi_k(x). \quad (3.40)$$

Cette fonction s'annule donc nécessairement entre 0 et  $a$ . Sur le segment de longueur  $L = Na$ , elle a au moins  $N$  nœuds et ne peut pas être l'état fondamental.  $J$  ne peut donc pas être négatif. Nous verrons plus tard que cette conclusion peut être invalidée si on élargit la classe des hamiltoniens disponibles en considérant des potentiels dépendant explicitement du temps.

### 3-3 Les interactions dans le modèle de Hubbard

Décrivons maintenant comment les interactions entre particules sont prises en compte dans ce modèle de liaisons fortes, avec une dynamique restreinte à la bande fondamentale. Nous prendrons l'exemple de bosons sans spin, mais le formalisme s'étend sans difficulté au cas d'un gaz de fermions non polarisés.

L'hamiltonien d'interaction à courte portée (onde  $s$  pour des bosons) vaut dans l'approximation du pseudo-potentiel

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{g}{2} \int \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x) dx, \quad (3.41)$$



où l'opérateur champ  $\hat{\psi}(x)$  détruit une particule au point  $x$ . Cet opérateur s'écrit en termes des fonctions de Wannier

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_{n,j} w_{n,j}(x) \hat{b}_{n,j}. \quad (3.42)$$

Quand on insère ce développement dans (3.41), on obtient une expression compliquée, faisant intervenir des termes qui couplent les différentes bandes et les différents sites du réseau :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} &= \frac{g}{2} \sum_{n_1,j_1} \sum_{n_2,j_2} \sum_{n_3,j_3} \sum_{n_4,j_4} \hat{b}_{n_3,j_3}^\dagger \hat{b}_{n_4,j_4}^\dagger \hat{b}_{n_1,j_1} \hat{b}_{n_2,j_2} \\ &\times \int w_{n_1,j_1}(x) w_{n_2,j_2}(x) w_{n_3,j_3}(x) w_{n_4,j_4}(x) dx \end{aligned} \quad (3.43)$$

Toutefois, pour un réseau profond ( $V_0 \gg E_r$ ) et si on exclut le voisinage d'une résonance de Feshbach, l'énergie d'interaction par atome reste petite devant l'écart  $\hbar\omega$  entre la bande fondamentale et la première bande excitée. Ceci conduit à deux simplifications successives :

- On peut restreindre le développement de  $H_{\text{int}}$  à la bande fondamentale  $n = 0$ , comme on l'a fait pour l'énergie cinétique. La somme sur  $n_1, n_2, n_3, n_4$  disparaît de (3.43) et on ne garde plus que le terme  $n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 0$ .
- Dès que la profondeur du réseau dépasse une dizaine de  $E_r$ , le recouvrement entre deux fonctions de Wannier sur deux sites différents,  $w_{0,j}(x)$  et  $w_{0,j'}(x)$ , devient négligeable (voir figure 3.1). L'intégrale sur  $x$  apparaissant dans (3.43) ne prend donc des valeurs significativement différentes de 0 que si tous les indices  $j$  qui y figurent sont égaux entre eux. L'intégrale résultante

$$\int w_{0,j}^4(x) dx \quad (3.44)$$

est alors indépendante de  $j$ , puisque la fonction  $w_{0,j}$  est simplement la translatée de  $w_{0,0}$  par la distance  $ja$ .

Le développement de  $\hat{H}_{\text{int}}$  est alors considérablement simplifié. Il ne reste plus que les termes décrivant l'interaction sur site et le résultat s'écrit :

$$\hat{H}_{\text{int}} \approx \frac{U}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1), \quad (3.45)$$

où on a introduit l'opérateur nombre de particules sur le site  $j$ ,  $\hat{n}_j = \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j$  et utilisé  $\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_j = \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j - \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j = \hat{n}_j^2 - \hat{n}_j$ . Notons qu'on a omis ici d'écrire l'indice de bande  $n$  puisqu'on se restreint à  $n = 0$ . L'énergie  $U$  est l'énergie à fournir pour mettre deux atomes sur le même site ; elle s'écrit explicitement

$$U = g \int w_{0,0}^4(x) dx \approx \frac{g}{\sqrt{2\pi} a_{\text{oh}}}, \quad (3.46)$$

où nous avons utilisé l'approximation gaussienne (3.30) pour la fonction de Wannier de la bande fondamentale.

Comme nous l'avons indiqué, le formalisme présenté ici porte sur des bosons sans spin. Indiquons sans démonstration (elle est simple à établir) comment l'expression (3.47) est modifiée pour un gaz de fermions de spin  $1/2$ , toujours en interaction à courte portée :

$$\hat{H}_{\text{int}} \approx U \sum_j \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow}. \quad (3.47)$$

Les opérateurs  $\hat{n}_{j,\uparrow}$  et  $\hat{n}_{j,\downarrow}$  ont pour valeurs propres 0 et 1, puisqu'on ne peut pas mettre plus d'un fermion dans un état donné, en l'occurrence la fonction de Wannier  $w_j$  avec un certain état de spin.

Les calculs ci-dessus ont été menés pour un réseau 1D. Ils se transposent directement au cas 3D pour un réseau cubique et on obtient

$$U^{(3D)} = \frac{g^{(3D)}}{(\sqrt{2\pi} a_{\text{oh}})^3}. \quad (3.48)$$

Le couplage  $g^{(3D)}$  s'exprime en terme de la longueur de diffusion  $a_d$  sous la forme

$$g^{(3D)} = \frac{4\pi\hbar^2 a_d}{m}, \quad (3.49)$$

et (3.48) s'écrit alors

$$\frac{U^{(3D)}}{E_r} = \sqrt{\frac{8}{\pi}} k a_d \left( \frac{V_0}{E_r} \right)^{3/4}. \quad (3.50)$$

Discutons maintenant la valeur de ce coefficient  $U$ . Nous ferons cette discussion dans le cas 3D puisque nous avons l'expression explicite (3.50)

à notre disposition. En dehors d’une résonance de Feshbach, la longueur de diffusion a une échelle nanométrique (3 nm pour  $^{23}\text{Na}$ , 5 nm pour  $^{87}\text{Rb}$ ). Puisque la lumière utilisée pour le réseau a une longueur d’onde  $\lambda$  micro-métrique, le produit  $ka_d = 2\pi a_d/\lambda$  est petit, entre  $10^{-2}$  et  $10^{-1}$ . Le produit  $V_0/E_r$  ne dépasse en général pas quelques dizaines : au delà de cette valeur, l’effet tunnel entre sites devient complètement négligeable et le réseau n’est plus qu’une collection de pièges indépendants. Le coefficient  $U$  est donc en général plus petit que l’énergie de recul. Rappelons par ailleurs qu’il est important que  $Un_j(n_j - 1)/2$  reste petit devant  $\hbar\omega = 2\sqrt{V_0E_r}$  pour que la restriction à la bande fondamentale soit légitime.

Cette valeur relativement faible  $U \lesssim E_r$  n’empêche pas aux interactions de pouvoir jouer un rôle considérable et de faire apparaître un état fondamental fortement corrélé (Jaksch et al. 1998). Pour comprendre ce point, il faut comparer la force de ces interactions, caractérisée par  $U$ , à l’énergie cinétique, caractérisée par le coefficient tunnel  $J$ . Les effets à  $N$  corps deviennent importants quand les interactions prennent le pas sur l’énergie cinétique, et cela peut se produire pour des réseaux relativement peu profonds, en raison de la décroissance exponentielle du coefficient  $J$  avec  $V_0/E_r$  [cf. eq. (3.39)].

En résumé, la mise en place d’un réseau optique permet de cumuler deux effets favorisant la physique à  $N$  corps :

- Il réduit fortement le terme d’énergie cinétique, grâce à la décroissance exponentielle de  $J$  avec  $V_0/E_r$  [cf. eq. (3.39)].
- Il augmente modérément le terme d’interaction, grâce à la croissance en loi de puissance de  $U$  avec  $V_0/E_r$  [cf. eq. (3.50)].

### 3-4 Illustration : les paires répulsives liées

Cette compétition entre énergie cinétique et énergie d’interaction a été mise en évidence à de multiples reprises dans les réseaux optiques au cours des dix dernières années<sup>4</sup>. La manifestation la plus célèbre est probablement la transition de phase entre le régime superfluide et le régime *isolant*

4. Cette compétition se produit aussi dans un gaz uniforme ; pour un fluide de densité  $\rho$ , correspondant à une distance moyenne entre particules  $\ell = \rho^{-1/3}$ , on peut évaluer une énergie cinétique caractéristique  $\hbar^2/(m\ell^2)$ . Cette dernière doit être comparée à l’énergie d’interaction qui vaut à un facteur multiplicatif près  $\hbar^2 a_d \rho/m$ . Le rapport entre ces deux énergies fait

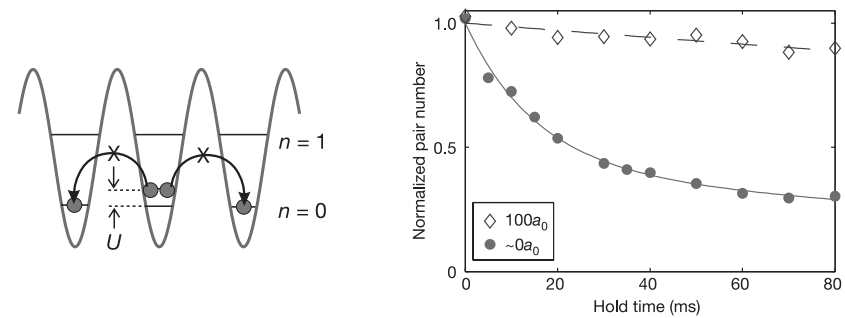


FIGURE 3.6. Gauche : principe de l’expérience de Winkler et al. (2006): des atomes en interaction répulsive sont préparés sur un même site d’un réseau. Si l’interaction est assez forte, les atomes restent ensemble en dépit de la répulsion. Droite : évolution du nombre de paires en présence de répulsion (longueur de diffusion de 5 nm, i.e.  $100a_0$ ) et absence de répulsion (longueur de diffusion nulle). Ces figures sont extraites de Winkler et al. (2006).

de Mott pour une valeur critique du rapport  $U/J$ , pour un remplissage donné du réseau, par exemple un atome par site (Fisher et al. 1989; Jaksch et al. 1998; Greiner et al. 2002). Nous aurons l’occasion de décrire en détail ce phénomène dans un cours ultérieur.

Nous l’illustrerons ici par un phénomène, plus simple à décrire théoriquement, qui porte sur l’existence de paires liées en présence d’interactions répulsives (cf. figure 3.6). Ce phénomène a été mis en évidence et interprété par le groupe d’Innsbruck (Winkler et al. 2006). On part d’un gaz de molécules de  $\text{Rb}_2$ , préparées au voisinage d’une résonance de Feshbach (à  $\sim 1000$  G). Ces molécules sont confinées aux minima d’un réseau optique cubique de haute intensité, avec un taux de remplissage relativement faible ( $\sim 0.3$ ). À un instant donné, on abaisse la profondeur du réseau selon une direction pour autoriser l’effet tunnel selon cet axe. Simultanément on varie le champ magnétique pour s’éloigner de la résonance de Feshbach, ce qui a pour effet de dissocier les paires. L’interaction entre les deux atomes qui formaient la paire devient répulsive et elle est caractérisée

apparaître le facteur  $(\rho a_d^3)^{1/3}$ . Quand ce paramètre est petit devant 1 (gaz dilué), une description en terme de champ moyen (équation de Gross-Pitaevskii) est une bonne approximation, alors que le fluide devient fortement corrélé quand ce paramètre devient d’ordre unité.

par la longueur de diffusion  $a_d = +5$  nm (environ 100 rayons de Bohr  $a_0$ ). On s'attendrait naïvement à ce que les paires d'atomes se séparent d'autant plus rapidement que cette répulsion est forte. Il n'en est rien, comme on peut le voir sur la figure 3.6. Alors que les paires se séparent assez vite si le coefficient  $U$  est nul, une répulsion forte les maintient ensemble !

L'explication de ce phénomène est simple, au moins sur le plan qualitatif. La paire liée a une énergie  $U$  ; si cette énergie est grande devant la largeur de bande  $4J$  (ou plutôt  $8J$  car chaque atome de la paire a une bande de largeur  $4J$  à sa disposition), alors on ne peut pas convertir cette énergie d'interaction en énergie cinétique.

On peut assez facilement déterminer l'expression exacte de l'état lié correspondant (Winkler et al. 2006). L'hamiltonien de Hubbard des deux atomes (que nous supposons ici discernables) dans le réseau s'écrit

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -J \left( \hat{T}(1) + \hat{T}^\dagger(1) \right) - J \left( \hat{T}(2) + \hat{T}^\dagger(2) \right) \\ & + U \sum_{j_1, j_2} \delta_{j_1, j_2} |w_{j_1}, w_{j_2}\rangle \langle w_{j_1}, w_{j_2}|, \end{aligned} \quad (3.51)$$

où nous avons noté  $|j_1, j_2\rangle$  l'état tel que l'atome 1 occupe le site  $w_{j_1}$  et l'atome 2 occupe le site  $w_{j_2}$ . L'opérateur  $\hat{T}(\alpha)$  déjà introduit plus haut déplace la particule  $\alpha$  d'un site vers la droite.

Comme toujours dans un problème à deux corps, on a intérêt à introduire les variables du centre de masse et de la coordonnée relative. Posons donc

$$c = j_1 + j_2, \quad r = j_1 - j_2, \quad |c, r\rangle \equiv |w_{j_1}, w_{j_2}\rangle \quad (3.52)$$

la position du centre de masse étant  $ac/2$  (multiple ou demi-multiple de  $a$ ). L'hamiltonien se réécrit en fonction de ces nouvelles variables :

$$\hat{H} = -J \left( \hat{T}(c) + \hat{T}^\dagger(c) \right) \otimes \left( \hat{T}(r) + \hat{T}^\dagger(r) \right) + U \hat{1}_c \otimes \hat{P}_0. \quad (3.53)$$

où  $\hat{T}(c)$  et  $\hat{T}(r)$  sont les opérateurs de saut d'un site vers droite, pour le centre de masse et pour la variable relative, et où  $\hat{P}_0$  est le projecteur sur l'état  $|r = 0\rangle$ , correspondant au cas où les deux atomes sont sur le même site :

$$\hat{P}_0 = |r = 0\rangle \langle r = 0|. \quad (3.54)$$

À  $r$  fixé, le mouvement du centre de masse décrit par (3.53) est celui d'une particule libre sur un réseau et ses états propres sont les ondes de Bloch

$$|\Psi_q\rangle = \sum_{c \in \mathbb{Z}} e^{icq/2} |c\rangle. \quad (3.55)$$

On va donc chercher les états propres de  $\hat{H}$  sous la forme

$$|\Psi_q\rangle \otimes |\Phi\rangle, \quad \text{avec} \quad |\Phi\rangle = \sum_{r \in \mathbb{Z}} \alpha_r |r\rangle. \quad (3.56)$$

Précisons le domaine de variation du quasi-moment  $q$  pour le mouvement du centre de masse. À partir de l'expression (3.55) dans laquelle  $c$  est un entier, l'intervalle  $-\pi < qa/2 \leq \pi$  (de largeur  $4\pi/a$ ) semblerait naturel. En fait, on peut réduire cet intervalle d'un facteur 2 en remarquant que

$$|\Psi_q\rangle \otimes |\Phi\rangle = |\Psi_{q \pm 2\pi/a}\rangle \otimes |\tilde{\Phi}\rangle, \quad \text{avec} \quad |\tilde{\Phi}\rangle = \sum_r (-1)^r \alpha_r |r\rangle, \quad (3.57)$$

cette identité provenant de  $(-1)^c = (-1)^{j_1+j_2} = (-1)^{j_1-j_2} = (-1)^r$ . Pour éviter les doubles comptages, nous restreindrons donc les valeurs de  $q$  à

$$-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}. \quad (3.58)$$

Injectons maintenant la forme (3.56) dans l'équation aux valeurs propres pour l'hamiltonien (3.53). Pour une valeur de  $q$  donnée, nous obtenons :

$$-J_q \left( \hat{T}(r) + \hat{T}^\dagger(r) \right) |\Phi\rangle + U \hat{P}_0 |\Phi\rangle = E |\Phi\rangle, \quad (3.59)$$

où nous avons posé

$$J_q = 2J \cos(qa/2). \quad (3.60)$$

Cette équation s'écrit en termes des coefficients  $\alpha_j$  du développement de  $|\Phi\rangle$  :

$$\begin{aligned} j \neq 0 & \quad -J_q (\alpha_{j+1} + \alpha_{j-1}) = E \alpha_j \\ j = 0 & \quad -J_q (\alpha_1 + \alpha_{-1}) = (E - U) \alpha_0. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Ce système admet deux types de solutions : (i) des états de diffusion pour lesquels  $\alpha_j$  est une fonction trigonométrique de  $j$ , (ii) un état lié, pour lequel  $\alpha_j$  décroît exponentiellement avec  $|j|$ . C'est ce deuxième type de solution qui nous intéresse ici. On peut vérifier simplement que

$$\alpha_j = \alpha_0 e^{-\beta|j|} (-1)^j \quad (3.62)$$

est solution du système (3.61) si on prend

$$E_q = [U^2 + 4J_q^2]^{1/2}, \quad \beta_q = \ln [2J_q/(E_q - U)]. \quad (3.63)$$

Pour chaque valeur du moment  $q$  du centre de masse, il y a donc un état lié de la paire d'atomes. L'énergie de cet état lié est comme on s'y attendait de l'ordre de  $U$  si on choisit  $U \gg J$ . Cet état lié étant un état propre de l'hamiltonien, une paire de particules préparée dans cet état y restera indéfiniment, même si son énergie est supérieure à celle du continuum des états de diffusion (la bande d'énergie de largeur  $4J$ ).

## 4 Le cas d'un super-réseau

La simplicité de la définition des fonctions de Wannier pour le réseau sinusoïdal est un peu trompeuse. Pour des réseaux plus compliqués, par exemple des potentiels présentant plusieurs minima locaux par période  $a$ , il n'est pas toujours évident de choisir la « bonne » base de fonctions de Wannier, correspondant à l'intuition de fonctions d'onde bien localisées au voisinage de ces minima locaux.

Nous n'allons pas décrire ici les principes généraux de la recherche de ces fonctions de Wannier de localisation maximale. On pourra consulter à ce sujet l'article de revue récent de Marzari et al. (2012). Dans ce qui suit, nous indiquons simplement la nature du problème et nous l'illustrons sur un exemple simple.

### 4-1 L'arbitraire de phase

La propriété requise pour les fonctions de Bloch est de former une base normalisée d'états propres de l'hamiltonien et de l'opérateur translation. En absence de dégénérescence (au moins à 1D), elles sont donc définies à une phase près : on peut multiplier  $\psi_{n,q}(x)$  par une phase  $e^{i\theta_n(q)}$  tout en continuant à satisfaire cette propriété<sup>5</sup>.

5. Nous avons indiqué plus haut que nous imposons aux fonctions de Bloch d'être périodiques en  $q$ ,  $\psi_{n,q+2\pi/a} = \psi_{n,q}$ , ce qui impose à  $\theta_n(q)$  d'être également périodique en  $q$ .

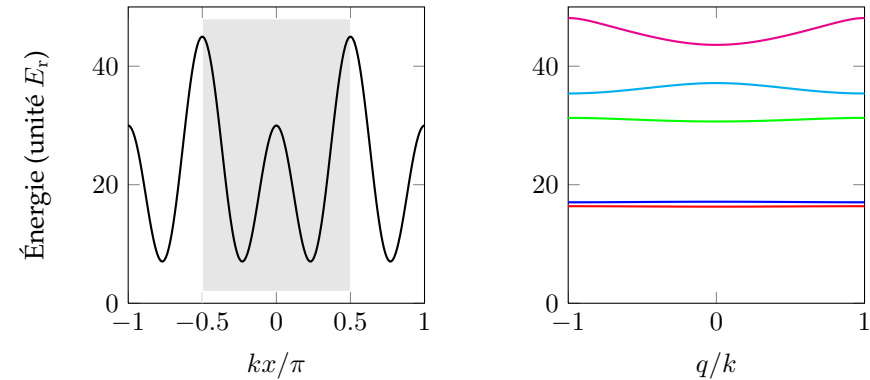


FIGURE 3.7. Gauche : super-réseau  $V(x)/E_T = 15[\sin^2(kx) + 2\cos^2(2kx)]$ . La zone grisée représente la cellule unité centrale, localisée entre  $kx/\pi = -1/2$  et  $kx/\pi = 1/2$  (c'est-à-dire entre  $x = -a/2$  et  $x = a/2$ ). Droite : spectre de bande pour ce super-réseau. Les deux bandes les plus basses, quasi-plates, sont bien séparées du reste du spectre.

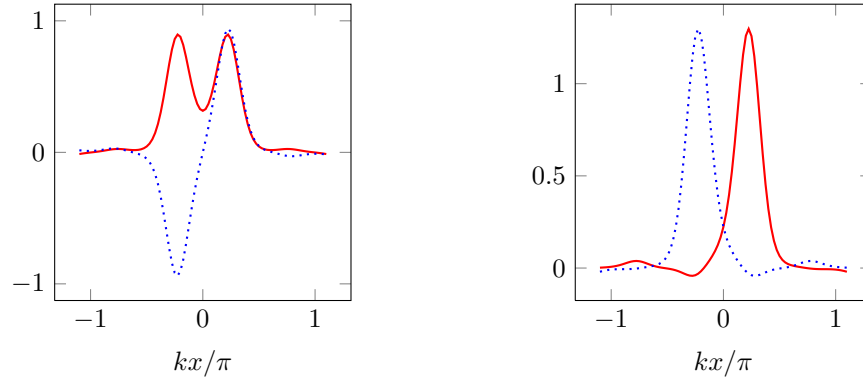
Si cet arbitraire de phase n'a aucune incidence sur la variation spatiale des fonctions de Bloch, il peut jouer une influence considérable sur la forme de la fonction de Wannier

$$w_{n,0}(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \psi_{n,q}(x) dq. \quad (3.64)$$

On peut donc exploiter cet arbitraire de phase pour construire « sur mesure » une base de fonctions de Wannier optimisant un critère donné.

### 4-2 Le mélange de différentes bandes

Une deuxième subtilité dans la construction de la base de fonctions de Wannier apparaît quand le spectre de l'hamiltonien est composé de plusieurs bandes d'énergie proches les unes des autres, ces bandes étant bien séparées du reste du spectre. On a alors intérêt à mélanger les fonctions de Wannier issues de ces bandes pour construire les fonctions les mieux adaptées au problème considéré.



**FIGURE 3.8.** Gauche : fonctions de Wannier  $w_0(x)$  (trait continu rouge) et  $w_1(x)$  (trait pointillé bleu) associées aux deux bandes les plus basses du super-réseau de la figure 3.7. Droite : fonctions de Wannier localisées  $w_A$  et  $w_B$ , obtenues par somme et différence de  $w_0$  et  $w_1$ .

Illustrons ce point sur le cas d'un super-réseau, obtenu en superposant le potentiel sinusoïdal  $V_0 \sin^2(kx)$  avec un potentiel de périodicité moitié  $V_1 \cos^2(2kx)$ . Ce potentiel, tracé sur la figure 3.7 dans le cas  $V_1 = 2V_0$  présente deux minima locaux dans la période  $a = \pi/k$ . Le spectre de bande associé à ce potentiel est tracé sur la figure 3.7 pour  $V_0 = 15 E_r$ . On voit clairement que les deux bandes les plus basses  $n = 0$  et  $n = 1$  forment un doublet resserré, séparé des bandes supérieures par un gap important. L'origine de ce doublet est claire : il provient de l'effet tunnel à travers la barrière de faible hauteur localisée (pour la cellule unité centrale) en  $x = 0$  et séparant les deux minima locaux de cette cellule unité.

Si on applique à la lettre la procédure décrite plus haut dans ce chapitre, en particulier l'équation (3.64), on va construire une fonction de Wannier pour chaque bande, en particulier une fonction de Wannier  $w_0(x)$  pour la bande  $n = 0$  et une fonction de Wannier  $w_1(x)$  pour la bande  $n = 1$ . Ces fonctions de Wannier  $w_0$  et  $w_1$  sont tracées en figure 3.8 ; elles sont respectivement symétriques et antisymétriques, tout comme les états propres bien connus pour un double puits unique.

Dans de nombreux cas, ces fonctions de Wannier symétriques et antisym-

métriques ne sont pas les fonctions les mieux adaptées à la modélisation du problème. Si on souhaite faire un traitement de type Hubbard par exemple, on préfère disposer de vecteurs de base correspondant à un atome localisé dans le puits de gauche ( $A$ ) ou de droite ( $B$ ) de la cellule unité. Pour notre exemple, le remède est simple : il suffit de définir les fonctions de Wannier correspondantes à partir du mélange des bandes  $n = 0$  et  $n = 1$  :

$$w_A(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (w_0(x) - w_1(x)), \quad \text{localisée à gauche,} \quad (3.65)$$

$$w_B(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (w_0(x) + w_1(x)), \quad \text{localisée à droite.} \quad (3.66)$$

Ces deux fonctions sont tracées sur la partie droite de la figure 3.8.

Dans ce cas particulier, le mélange des bandes se fait donc de manière naturelle. Dans des cas plus compliqués, il faut identifier le bon minimiseur qui permet d'obtenir l'hybridation optimale en terme de localisation de ces fonctions de Wannier (Marzari et al. 2012).

### 4-3 L'hamiltonien de Hubbard pour le super-réseau

Une fois identifiées les fonctions de Wannier  $w_A$  et  $w_B$ , on peut chercher les états propres de l'hamiltonien dans la limite de Hubbard, en se limitant cette fois-ci aux deux bandes les plus basses. Comme précédemment, on ne considèrera dans ce qui suit que les sauts entre proches voisins.

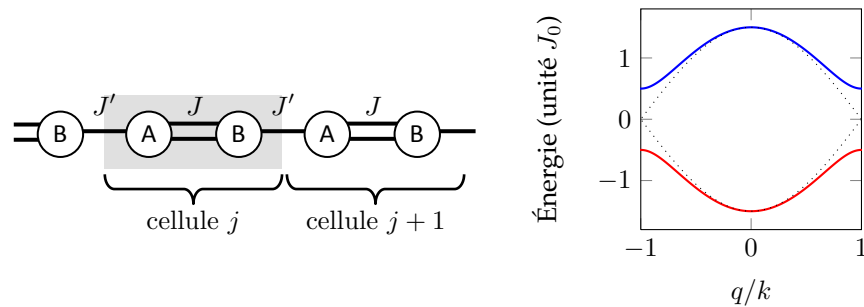
L'hamiltonien s'écrit donc

$$\hat{H} = -J \sum_j |w_{B,j}\rangle \langle w_{A,j}| - J' \sum_j |w_{A,j+1}\rangle \langle w_{B,j}| + \text{h.c.} \quad (3.67)$$

Le premier terme décrit le taux tunnel à travers la barrière de faible hauteur de la figure 3.7, et le second terme décrit le taux à travers la barrière la plus haute. Une représentation graphique de ce modèle de Hubbard est donnée en figure 3.9.

La cellule unité de ce problème comporte deux sites,  $A$  et  $B$ , et les fonctions périodiques pertinentes sont donc de la forme

$$|u_q\rangle = \alpha_q \left( \sum_j |w_{A,j}\rangle \right) + \beta_q \left( \sum_j |w_{B,j}\rangle \right), \quad (3.68)$$



**FIGURE 3.9.** Gauche : Version discrétisée du super-réseau de la figure 3.7. Droite : spectre de bande (3.71) obtenu pour  $J = J_0$ ,  $J' = J_0/2$ . Les pointillés représentent le résultat obtenu pour  $J = J' = 3/4 J_0$ .

où  $\alpha_q$  et  $\beta_q$  sont pour l'instant des coefficients arbitraires. Écrivons que la fonction de Bloch

$$|\psi_q\rangle = \sum_j e^{ijaq} (\alpha_q |w_{A,j}\rangle + \beta_q |w_{B,j}\rangle) \quad (3.69)$$

est état propre de l'hamiltonien (3.67). En projetant l'équation aux valeurs propres sur les deux fonctions  $|w_{A,j}\rangle$  et  $|w_{B,j}\rangle$  d'un site  $j$  quelconque, on obtient une équation aux valeurs propres pour une matrice  $2 \times 2$  hermitienne  $\hat{\mathcal{H}}(q)$  (hamiltonien dans l'espace réciproque)

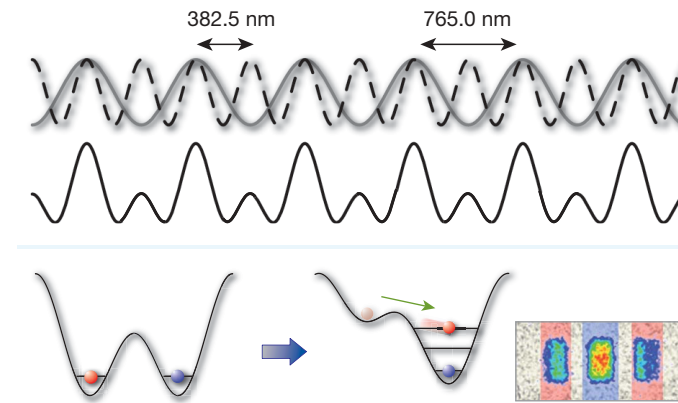
$$\hat{\mathcal{H}}(q) \begin{pmatrix} \alpha_q \\ \beta_q \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha_q \\ \beta_q \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathcal{H}}(q) = - \begin{pmatrix} 0 & J + J'e^{-iaq} \\ J + J'e^{iaq} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.70)$$

Les valeurs propres de  $\hat{\mathcal{H}}(q)$  sont

$$E(q) = \pm |J + J'e^{iaq}| = \pm (J^2 + J'^2 + 2JJ' \cos(aq))^{1/2}. \quad (3.71)$$

Hormis dans le cas  $J = J'$  où ce modèle correspond en fait au modèle de Hubbard à un site étudié en § 3, on trouve deux<sup>6</sup> sous-bandes séparées par un gap  $2|J - J'|$ , l'ouverture de ce gap étant appelée *instabilité de Peierls* : un cristal 1D avec un électron par ion est instable car on peut abaisser son

6. Le nombre de sous-bandes est égal à la dimension de la matrice  $\hat{\mathcal{H}}(q)$ , elle-même égale au nombre de sites dans la cellule élémentaire du réseau.



**FIGURE 3.10.** Super-réseau réalisé dans le groupe d'Immanuel Bloch pour des atomes de rubidium. En contrôlant l'intensité et la phase spatiale relative des deux ondes lumineuses créant ce réseau, on peut déformer le super-réseau et se ramener à un réseau simple, les atomes des puits B finissant dans la bande fondamentale  $n = 0$  du réseau final, et les atomes des puits A se déversant dans la bande  $n = 2$ . La technique de dépliage de bandes (bandes mapping) vue au cours 2 permet ensuite de compter les populations respectives de ces deux types de puits [figure extraite de Folling et al. (2007)]. On pourra également consulter les articles de Sebby-Strabley et al. (2007) et Lee et al. (2007).

énergie en le distordant comme sur la figure 3.9, de manière à former des liaisons longues et des liaisons courtes. Ce type d'hamiltonien obtenu pour un super-réseau a été étudié expérimentalement par plusieurs groupes, en particulier le groupe de Bloch à Munich (Folling et al. 2007) [voir figure 3.10] et le groupe de Porto au NIST (Lee et al. 2007).

#### 4-4 Bandes plates

À titre d'illustration, nous décrivons ici un autre aspect remarquable de ce modèle de Hubbard à plusieurs sites, qui est la possible apparition de bandes d'énergie complètement plates. Nous restons à une dimension et considérons le réseau en dents de scie représenté sur la figure 3.11. Ce réseau est caractérisé par 3 coefficients tunnel *a priori* différents  $J, J', J''$ .

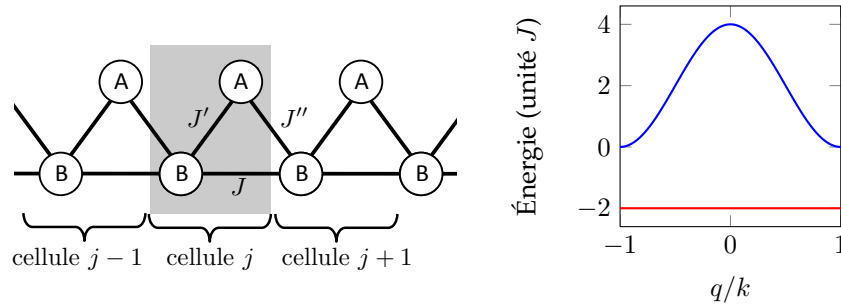


FIGURE 3.11. Réseau à deux sites donnant naissance à une bande fondamentale plate pour  $J' = J'' = \sqrt{2} J$ . Le tracé des bandes d'énergie a été fait pour  $J < 0$ .

La cellule unité contient toujours deux sites, et l'hamiltonien dans l'espace réciproque s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}}(q) = - \begin{pmatrix} 0 & J' + J''e^{-iaq} \\ J' + J''e^{iaq} & 2J \cos(aq) \end{pmatrix}. \quad (3.72)$$

La diagonalisation de cette matrice donne deux sous-bandes  $E_{\pm}(q)$  qui sont des racines de fonctions trigonométriques de  $qa$ . Leur expression se simplifie considérablement dans le cas

$$J' = J'' = \sqrt{2} J. \quad (3.73)$$

et on trouve

$$E_+(q) = 2J, \quad E_-(q) = -2J [1 + \cos(aq)]. \quad (3.74)$$

Une des bandes d'énergie est complètement plate ! La masse effective correspondante est donc infinie, ce qui signifie qu'un atome préparé dans cette bande restera sur place indéfiniment sans que son paquet d'ondes ne subisse le moindre étalement. Si on prend le signe habituel ( $J > 0$ ) pour le coefficient tunnel, la bande plate est la première bande excitée. Nous verrons plus tard qu'il est possible en modulant temporellement le réseau de changer le signe de  $J$ , ce qui permet alors d'avoir cette bande plate comme bande fondamentale.

L'interprétation physique de ces états non diffusifs est simple. On peut écrire explicitement des états localisés qui n'évoluent pas, du fait d'un phé-

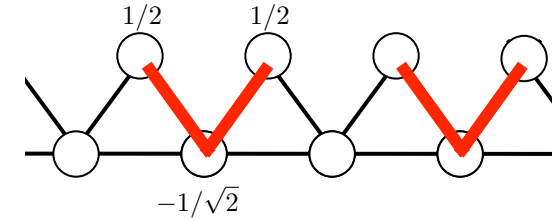


FIGURE 3.12. Représentation de l'état en V non diffusif donné en (3.75). Pour un réseau à  $N$  sites (i.e.  $N/2$  cellules élémentaires), on peut disposer  $N/4$  atomes dans ces états sans qu'ils se recouvrent. Pour un remplissage plus élevé et en présence d'interactions, l'état fondamental est un liquide de Luttinger (Huber & Altman 2010).

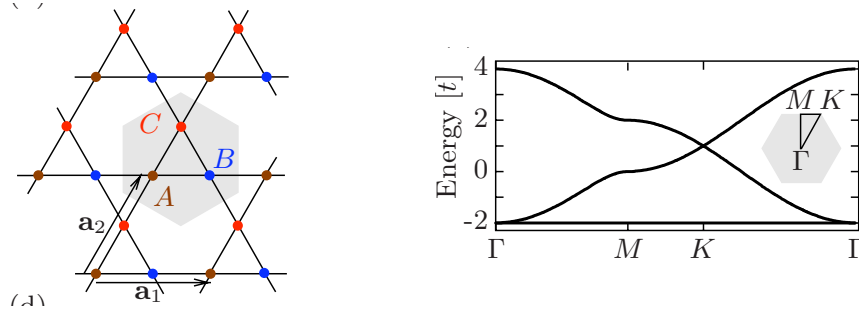
nomène d'interférence. Il existe un tel état<sup>7</sup> par cellule du réseau, l'un d'entre eux étant représenté sur la figure 3.12 :

$$|\psi_j^{(\text{loc})}\rangle = \frac{1}{2} (|w_{A,j-1}\rangle + |w_{A,j}\rangle - \sqrt{2} |w_{B,j}\rangle). \quad (3.75)$$

Pour s'étaler à partir d'un tel « état en V », la particule devrait passer sur un des deux sites  $|w_{B,j\pm 1}\rangle$ . Mais les signes présents dans l'expression du vecteur d'état (3.75) et le rapport  $\sqrt{2}$  choisi entre les coefficients  $J$  et  $J' = J''$  font que l'amplitude de transition de  $|\psi_j^{(\text{loc})}\rangle$  vers chacun de ces deux états s'annule.

Outre le caractère remarquablement élégant de cet effet d'interférence quantique, ces bandes plates sont très intéressantes pour la recherche d'états fortement corrélés. Nous avons indiqués plus haut que le régime intéressant du problème à  $N$  corps apparaissait quand l'énergie d'interaction entre particules devenait de l'ordre de l'énergie cinétique de ces particules. Dans le modèle de Hubbard utilisé ici, l'énergie cinétique est donnée par la largeur de bande et elle est donc nulle. L'état fondamental du système est alors régi uniquement par les interactions, du moins tant que l'énergie d'interaction reste plus petite que le gap entre la bande plate et la première bande excitée qui est dispersive.

7. Les états (3.75) ne sont pas orthogonaux entre eux, mais on peut construire une base orthogonale de fonctions de Wannier pour ce problème [voir Huber & Altman (2010)].



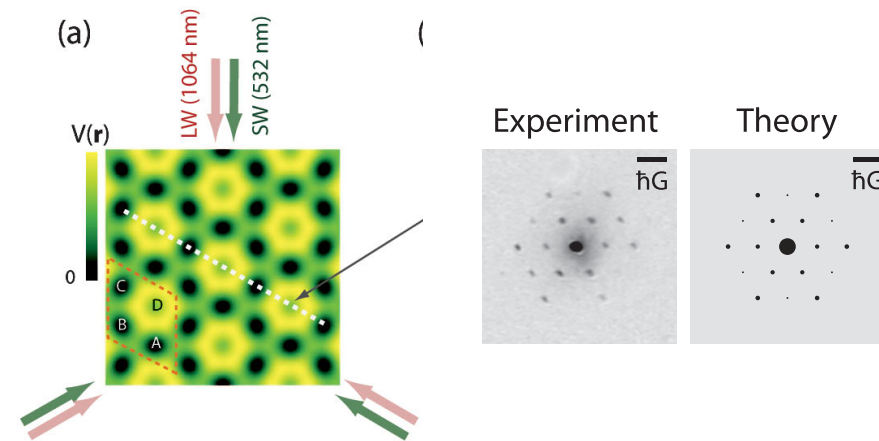
**FIGURE 3.13.** À gauche : réseau de Kagomé. La cellule élémentaire contient 3 sites  $A$ ,  $B$ ,  $C$ . Tous les éléments de matrice tunnels entre proches voisins sont égaux. La diagonalisation de l'hamiltonien dans l'espace réciproque (3.77) montre que la bande fondamentale (pour un coefficient tunnel positif) est plate. Le spectre correspondant est montré sur la figure de droite pour  $J < 0$ , ce choix plaçant la bande plate comme bande fondamentale (Figures extraites de Huber & Altman (2010)).

Une question naturelle est de déterminer l'état fondamental de  $N$  bosons préparés dans une telle bande. En l'absence d'interactions, il n'y a pas de condensation puisque tous les états à une particule ont la même énergie. En présence d'interactions répulsives, une transition se produit quand la densité devient supérieure à  $1/4$  atome par site, auquel cas on a forcément un recouvrement entre les états en  $V$  disposés sur le réseau. L'état à haute densité est une phase *liquide de Luttinger*, analysée analytiquement et numériquement dans Huber & Altman (2010).

À titre d'exercice, on pourra étudier un problème similaire (du point de vue de la physique à une particule) en dimension deux. Il s'agit de la structure appelée *réseau de Kagomé* et représentée sur la figure 3.13. Ce réseau est obtenu en pavant le plan par translation d'une cellule unité selon un réseau triangulaire généré par les vecteurs

$$\mathbf{a}_1 = a \mathbf{u}_x, \quad \mathbf{a}_2 = a \left( \frac{1}{2} \mathbf{u}_x + \frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{u}_y \right). \quad (3.76)$$

La cellule unité comporte trois sites notés  $A$ ,  $B$ ,  $C$  couplés deux à deux par effet tunnel. Tous les éléments de matrice entre proches voisins ont la



**FIGURE 3.14.** Figures extraites de Jo et al. (2012). Gauche : réalisation d'un réseau de Kagomé à partir de deux réseaux triangulaires. Droite : figure de temps de vol pour une superfluide initialement confiné dans le réseau de Kagomé.

même valeur. L'hamiltonien en réseau réciproque est

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{q}) = -J \begin{pmatrix} 0 & 1 + e^{-iQ_1} & 1 + e^{-iQ_2} \\ 1 + e^{iQ_1} & 0 & 1 + e^{-iQ_3} \\ 1 + e^{iQ_2} & 1 + e^{iQ_3} & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.77)$$

où on a posé  $Q_j = \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_j$ ,  $j = 1, 2$  et  $Q_3 = Q_1 - Q_2$ . La diagonalisation de cette matrice  $3 \times 3$  donne une bande plate d'énergie  $2J$  et deux bandes dispersives. L'analyse des états à  $N$  corps pouvant apparaître à haute densité, à savoir une phase de type super-solide, est faite dans Huber & Altman (2010).

Ce réseau a été réalisé expérimentalement dans le groupe de D. Stamper-Kurn à Berkeley (Jo et al. 2012), en superposant deux réseaux triangulaires commensurables générés par des faisceaux lumineux à 532 nm et 1064 nm (voir figure 3.14). La structure de Kagomé a été identifiée en plaçant un superfluide dans ce réseau et en observant les pics de Bragg lors d'un temps de vol après coupure soudaine du réseau. Notons que dans cette expérience, le signe du coefficient tunnel était le signe usuel ( $-J$ ), la bande plate étant alors la bande supérieure des trois sous-bandes les plus



basses. Outre l'apparition de bandes plates, ce réseau de Kagomé est particulièrement intéressant en magnétisme, avec un diagramme de phase très riche en présence d'interaction antiferromagnétismes.

Winkler, K., G. Thalhammer, F. Lang, R. Grimm, J. Hecker-Denschlag, A. J. Daley, A. Kantian, H. P. Büchler & P. Zoller (2006), « Repulsively bound atom pairs in an optical lattice », in *Nature* 441, p. 853.

## 5 Références

- Campbell, R. (1955), *Théorie générale de l'équation de Mathieu*, Masson et Cie.
- Fisher, Matthew P. A., Peter B. Weichman, G. Grinstein & Daniel S. Fisher (1989), « Boson localization and the superfluid-insulator transition », in *Phys. Rev. B* 40 (1), pp. 546–570.
- Folling, S., S. Trotzky, P. Cheinet, M. Feld, R. Saers, A. Widera, T. Müller & I. Bloch (2007), « Direct observation of second-order atom tunnelling », in *Nature* 448, p. 1029.
- Greiner, M., M. O. Mandel, T. Esslinger, T. Hänsch & I. Bloch (2002), « Quantum Phase Transition from a Superfluid to a Mott Insulator in a Gas of Ultracold Atoms », in *Nature* 415, p. 39.
- Huber, Sebastian D. & Ehud Altman (2010), « Bose condensation in flat bands », in *Phys. Rev. B* 82 (18), p. 184502.
- Jaksch, D., C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner & P. Zoller (1998), « Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices », in *Phys. Rev. Lett.* 81 (15), pp. 3108–3111.
- Jo, Gyu-Boong, Jennie Guzman, Claire K. Thomas, Pavan Hosur, Ashvin Vishwanath & Dan M. Stamper-Kurn (2012), « Ultracold Atoms in a Tunable Optical Kagome Lattice », in *Phys. Rev. Lett.* 108 (4), p. 045305.
- Kohn, W. (1959), « Analytic Properties of Bloch Waves and Wannier Functions », in *Phys. Rev.* 115 (4), pp. 809–821.
- Lee, P. J., M. Anderlini, B. L. Brown, J. Sebby-Strabley, W. D. Phillips & J. V. Porto (2007), « Sublattice Addressing and Spin-Dependent Motion of Atoms in a Double-Well Lattice », in *Phys. Rev. Lett.* 99 (2), p. 020402.
- Marzari, Nicola, Arash A. Mostofi, Jonathan R. Yates, Ivo Souza & David Vanderbilt (2012), « Maximally localized Wannier functions : Theory and applications », in *Rev. Mod. Phys.* 84 (4), pp. 1419–1475.
- Sebby-Strabley, J., B. L. Brown, M. Anderlini, P. J. Lee, W. D. Phillips, J. V. Porto & P. R. Johnson (2007), « Preparing and Probing Atomic Number States with an Atom Interferometer », in *Phys. Rev. Lett.* 98 (20), p. 200405.
- Wannier, Gregory H. (1937), « The Structure of Electronic Excitation Levels in Insulating Crystals », in *Phys. Rev.* 52 (3), pp. 191–197.