



**HAL**  
open science

# Systèmes de spins quantiques unidimensionnels. Désordre et impuretés

Vivien Brunel

► **To cite this version:**

Vivien Brunel. Systèmes de spins quantiques unidimensionnels. Désordre et impuretés. Physique mathématique [math-ph]. Université Paris Sud - Paris XI, 1999. Français. NNT : . tel-00000893

**HAL Id: tel-00000893**

**<https://theses.hal.science/tel-00000893>**

Submitted on 28 Nov 2001

**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.

Vivien BRUNEL

Systemes de spins quantiques unidimensionnels

Désordre et impuretés

ORSAY  
N°D'ORDRE : 5792

UNIVERSITE DE PARIS-SUD  
U.F.R. SCIENTIFIQUE D'ORSAY

THESE

présentée  
pour obtenir le grade de

**Docteur en Sciences de l'Université Paris XI ORSAY**

par

VIVIEN BRUNEL

Sujet :

**Systèmes de spins quantiques unidimensionnels  
Désordre et impuretés**

Soutenue le 29 juin 1999 devant la Commission d'examen :

MM	Antoine GEORGES,	Rapporteur
	Duncan HALDANE,	Président
	Malte HENKEL,	Rapporteur
	Thierry JOLICŒUR,	Directeur de thèse
	Olivier MARTIN,	
	Jean-Pierre RENARD.	

# Remerciements

Thierry Jolicœur a encadré cette thèse avec dévouement et pédagogie. Il m'est impossible de formuler les remerciements qu'il mérite en quelques lignes. Je dirai simplement que pendant trois ans, cela a été, à chaque fois, un vrai bonheur (du moins pour moi) de venir frapper à sa porte.

Marc Bocquet et Frédéric Van Wijland ont été des interlocuteurs privilégiés et des collaborateurs performants.

Je tire mon chapeau à Michel Bergère et Christophe Grojean pour avoir supporté mes bavardages incessants dans le bureau.

Les coincheurs fous : Christophe, Jean-Yves et Riccardo.

Je remercie Jean Zinn-Justin puis Jean-Paul Blaizot de m'avoir accueilli au SPhT.

Enfin, je suis reconnaissant envers Antoine Georges et Malte Henkel d'avoir accepté la responsabilité de rapporteur ; Duncan Haldane, Olivier Martin et Jean-Pierre Renard me font l'honneur de participer à mon jury.

Mes parents, qui ont tout rendu possible.

Nathalie, avec qui tout est possible.

# Table des matières

<b>Préambule</b>	<b>3</b>
<b>1 Mise en bouche sur les chaînes de spins : aspects expérimentaux</b>	<b>9</b>
1.1 La chaîne de spins $1/2$ . . . . .	9
1.2 La chaîne de spins 1 . . . . .	14
<b>2 Aspects théoriques sur les chaînes de spins</b>	<b>21</b>
2.1 Les ondes de spin . . . . .	21
2.2 Le Modèle Sigma Non Linéaire . . . . .	24
2.3 Le modèle AKLT . . . . .	27
2.4 L'ordre caché . . . . .	33
<b>3 La bosonisation par l'exemple</b>	<b>37</b>
3.1 Fermions libres et en interaction . . . . .	37
3.2 La chaîne de spins $1/2$ . . . . .	41
3.3 la chaîne $S=1/2$ en champ magnétique aléatoire . . . . .	45
3.4 Le fort désordre . . . . .	51
<b>4 La chaîne de spins 1 désordonnée</b>	<b>53</b>

4.1	La chaîne S=1 pure . . . . .	53
4.2	Le faible désordre . . . . .	57
4.3	Equations du groupe de renormalisation . . . . .	61
4.4	Un exemple simple . . . . .	62
4.5	Diagramme de phase à faible désordre . . . . .	64
4.5.1	Phase AF . . . . .	64
4.5.2	Phases de Haldane et à grand D . . . . .	64
4.5.3	Phase XY1 . . . . .	65
4.5.4	Ligne frontière entre H et D . . . . .	66
4.5.5	Phase XY2 . . . . .	66
4.6	Résultats numériques et expérimentaux . . . . .	68
4.7	Vers un diagramme de phase complet . . . . .	70
<b>5</b>	<b>Des expériences de RMN pour les théories conformes</b>	<b>75</b>
5.1	Systèmes dopés et expériences de RMN . . . . .	75
5.2	Théorie en volume . . . . .	79
5.3	Chaîne de spins 1/2 et théorie avec bord . . . . .	84
5.4	Le liquide de Luttinger . . . . .	90
<b>6</b>	<b>Des fermions pour la chimie à une dimension</b>	<b>95</b>
6.1	Préambule . . . . .	95
6.2	Le modèle microscopique . . . . .	97
6.3	L'équation maîtresse et la chaîne de spins . . . . .	99
6.4	Les champs de fermions . . . . .	101

---

6.4.1	Fermions et états cohérents . . . . .	101
6.4.2	La théorie des champs continue . . . . .	104
6.4.3	Comparaison avec les méthodes bosoniques . . . . .	105
6.4.4	Valeur moyenne de quelques observables . . . . .	106
6.5	La réaction d'annihilation . . . . .	106
6.6	La percolation dirigée . . . . .	108
6.6.1	L'action du problème . . . . .	108
6.6.2	Une hypothèse . . . . .	108
6.6.3	Les fonctions de vertex . . . . .	109
6.6.4	Renormalisation . . . . .	110
6.7	Conclusion . . . . .	111
<b>Conclusion</b>		<b>111</b>
<b>A Développement de produits d'opérateurs (OPE)</b>		<b>115</b>
A.1	Notation complexe . . . . .	115
A.2	OPE locaux . . . . .	116
A.3	OPE non locaux . . . . .	117
<b>B Corrélations de la chaîne S=1/2</b>		<b>119</b>
<b>Bibliographie</b>		<b>120</b>





# Préambule

Dans les années 70, la théorie des champs a réussi le tour de force de l'exogamie de la physique des interactions élémentaires (à haute énergie) et de la physique de la matière condensée (à basse énergie). Les découvertes expérimentales majeures des années 80 et l'application de ces méthodes théoriques puissantes aux composés de laboratoire ont donné un essor phénoménal à l'étude de la matière condensée.

1983: Haldane, dans un élan iconoclaste quasi insatiable, brandit une conjecture éponyme dont on était loin d'imaginer la portée. "Argument fallacieux!" répliquèrent de nombreux exégètes des revues spécialisées... Cet anacolithe illustre bien la passion qui entoure le domaine des unidimensionnels depuis les années 80. Les conclusions de Haldane ont vite été pressenties correctes, et une nuée de physiciens récipiscents, saisis d'une endémie incroyablement contagieuse, s'attelèrent à exploiter l'usufruit de ces travaux précurseurs.

La résurgence des systèmes quantiques unidimensionnels fait écho à l'idée proposée par Little dès les années 60 qui espérait que les corrélations entre électrons et phonons fussent suffisamment renforcées en basse dimension pour obtenir des températures critiques élevées pour la supraconductivité. Malheureusement, les températures critiques sont de l'ordre du Kelvin dans les composés 1D tels que les conducteurs organiques. Cependant, la découverte de la supraconductivité à haute température a relancé de façon définitive l'intérêt pour les systèmes de spins et d'électrons en basse dimension. Ces supraconducteurs sont composés de plans de cuivre et d'oxygène séparés par des couches isolantes d'yttrium et de baryum. Dans la phase normale, les spins des ions  $\text{Cu}^{2+}$  ont des interactions antiferromagnétiques qui jouent un rôle crucial dans l'appariement des électrons. Le mécanisme d'appariement est un des grands mystères théoriques de cette fin de siècle.

Tout aussi mystérieuse est la transition de délocalisation de l'effet Hall entier qui se produit lorsque l'énergie de Fermi est égale à l'énergie du seul état étendu au centre d'un niveau de Landau. Il s'avère que ce problème se transforme en une chaîne de spins  $SU(N=0)$ . Plus intéressant, certaines excitations de l'effet Hall fractionnaire sont décrites par une théorie unidimensionnelle de bosons chiraux, analogue à la version bosonisée des modèles de spins quantiques à une dimension. Plus troublant encore est le parallélisme entre les chaînes de spins et l'effet Hall quantique fractionnaire. Par exemple, la chaîne de spins 1 de Heisenberg a un paramètre d'ordre non local, cousin germain de celui de Mac Donald... Autre exemple enfin, la courbe d'aimantation des chaînes de spins en champ magnétique présente des plateaux analogues à ceux de la conductivité dans l'effet Hall.

Ainsi les systèmes de spins sont-ils au cœur des grands problèmes de la matière condensée et de la physique du solide. Enjeux théoriques... Enjeux technologiques, aussi.

Le dénominateur commun de tous ces systèmes est résumé dans la locution "*fermions fortement corrélés*". En basse dimension, les fluctuations quantiques ont plus d'impact sur les états classiques du système et le conduisent souvent vers des états fondamentaux plus exotiques, peu enclins à une appréhension intuitive. Il en résulte une grande richesse d'états physiques et de propriétés toujours plus surprenantes.

En basse dimension, le désordre est lui aussi particulièrement virulent et les transitions de phase qu'il induit sont parfois spectaculaires. Désordre et impuretés sont à tort connotés négativement : pour l'expérimentateur, ils sont généralement synonymes de perte de propriétés intéressantes des matériaux (conductivité,...); pour le théoriciens, ils conduisent à des problèmes incroyablement plus complexes sur le plan mathématique. Mais ce serait oublier les formidables qualités des impuretés dans certains cas. Par exemples, ce sont les impuretés qui conduisent les composés YBaCuO vers une phase supraconductrice à haute température. Les impuretés fournissent aussi au théoricien un degré de liberté supplémentaire pour soumettre ses modèles à l'épreuve de l'expérience. Dès lors, les systèmes désordonnés et dopés apparaissent particulièrement intéressants sous plusieurs points de vue, et une compréhension complète de nombreux phénomènes physiques passe naturellement par ce genre de problème.

Les deux premiers chapitres de cette thèse présentent les aspects expérimentaux et

théoriques respectivement des chaînes de spins pures, et introduisent les concepts et les problématiques qui ont motivé ce travail. Le troisième chapitre présente la technique de bosonisation abélienne, et l'applique à l'étude de la chaîne de spins  $1/2$  pure. Nous proposons ensuite une étude détaillée de cette chaîne de spins sous faible désordre par des techniques de groupe de renormalisation. Cette technique est étendue dans le quatrième chapitre, où nous étudions de façon systématique le devenir des différentes phases de la chaîne de spins 1 anisotrope sous faible désordre. Le chapitre 5 est consacré à l'influence des impuretés non magnétiques sur la chaîne de spins  $1/2$ .

Enfin, le dernier chapitre traite un problème indépendant. Nous proposons une nouvelle méthode analytique pour étudier les processus de réaction-diffusion (qui se ramènent à des chaînes de spins ferromagnétiques), et nous l'appliquons à un certain processus qui appartient à la classe d'universalité de la percolation dirigée.



# Chapitre 1

## Mise en bouche sur les chaînes de spins : aspects expérimentaux

### 1.1 La chaîne de spins 1/2

Il existe un grand nombre de composés magnétiques fortement anisotropes qui présentent une structure en chaînes. Les interactions le long des chaînes sont beaucoup plus fortes que les échanges entre les chaînes. A très basse température (en dessous de la température  $T_N$  dite température de Néel), on s'attend à un ordre antiferromagnétique tridimensionnel à cause des divergences des fonctions de réponse antiferromagnétiques de la chaîne de spins 1/2 à  $T = 0$ . Pour  $T > T_N$ , il existe toute une plage de températures où le système est considéré comme expérimentalement unidimensionnel.

Certains matériaux anisotropes contiennent des ions  $\text{Cu}^{2+}$  qui portent un spin atomique 1/2 et sont des candidats pour un comportement de type liquide de Luttinger. Parmi ces composés, citons les plus fameux tels que  $\text{KCuF}_3$ , le benzoate de cuivre  $\text{Cu}(\text{C}_6\text{H}_5\text{COO})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  et  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$ , qui est sans doute la meilleure chaîne de spins 1/2. Dans le cristal de  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$ , qui est la famille des cuivre-oxygène à haute  $T_c$ , il existe des liaisons Cu-O-Cu à  $180^\circ$  dans la direction  $\mathbf{b}$ , propices à un très fort super-échange dans cette direction. Par ailleurs, des couches CuO s'empilent le long de l'axe  $\mathbf{a}$  (voir Fig. 1.1). Un ion  $\text{Cu}^{2+}$  d'une de ces couches est équidistant de 4 ions  $\text{Cu}^{2+}$  de la couche du dessous. Les couplages mis en jeu étant antiferromagnétiques, il y a une frustration qui tend à découpler les couches. L'absence d'ion oxygène dans la direction  $\mathbf{c}$  amoindrit considérablement le super-échange dans cette

direction. Il résulte de ces arguments une structure magnétique unidimensionnelle de spins  $1/2$ . La température de Néel de ce composé est très faible ( $T_N = 5$  K) et le très fort superéchange entre les spins  $1/2$  ( $J=2200$  K) le long de la chaîne confère à ce système un comportement unidimensionnel sur une grande région de température ([54]) :

$$T_N = 5 \text{ K} \leq T \ll J = 2200 \text{ K}. \quad (1.1)$$

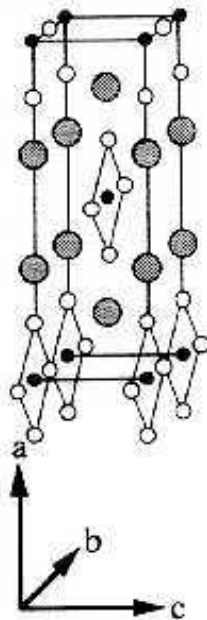


FIG. 1.1 - Schéma de l'ordre cristallin dans le composé  $Sr_2CuO_3$ . En noir  $Cu^{2+}$ , en gris  $Sr^{2+}$ , en blanc  $O^{2-}$

Le spectre de ce système est sans gap entre le fondamental et le premier état excité, et, au point fixe, le système est invariant d'échelle ; une conséquence de ce spectre sans gap est que les fonctions de corrélation sont des lois de puissance.

Le calcul de la courbe de susceptibilité  $\chi(T)$  est important car il permet de confronter simplement les résultats théoriques et expérimentaux, et ils permettent de plus, lorsqu'un matériau est identifié comme étant une chaîne de spins  $1/2$ , de calculer la constante d'échange entre les spins plus proches voisins. Griffiths ([3]), par des méthodes d'ansatz de Bethe, a calculé la susceptibilité de la chaîne XXX (modélisée par le hamiltonien  $\mathcal{H} = \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$ ) à  $T = 0$ . Il a établi des solutions numériques pour les équations intégrales de Bethe (à la limite continue), et a aussi obtenu la courbe d'aimantation de la chaîne de spins  $1/2$  à  $T = 0$  (voir fig 1.2).

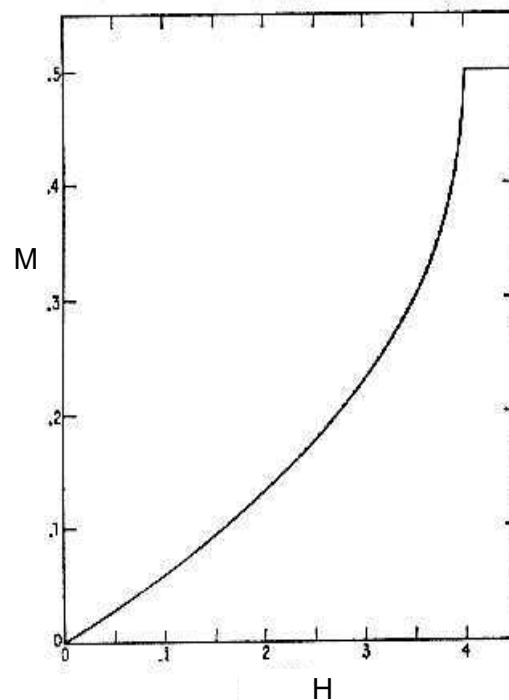


FIG. 1.2 - Courbe d'aimantation de la chaîne XXX de spin 1/2 en fonction du champ magnétique appliqué. Cette courbe a été obtenue par Griffiths par l'ansatz de Bethe dans [3].

La pente à l'origine de cette courbe donne  $J\chi(T = 0) \sim 0,050661$ . Bonner et Fisher ([2]), par des études numériques de chaînes finies (périodiques) ont obtenu la courbe de susceptibilité entière.

La figure (1.3) regroupe les courbes de susceptibilité de la chaîne isotrope pour différentes longueurs de chaînes. La courbe de susceptibilité pour un chaîne infinie est la courbe limite séparant les courbes pour  $N$  pair (en dessous) et  $N$  impair (au dessus). La convergence lorsque  $N \rightarrow \infty$  est assez rapide à haute température, mais la situation est plus complexe à basse température. Pour  $N$  pair, il y a un gap fini entre le fondamental et le premier état excité. Ainsi, la susceptibilité s'annule comme  $\chi(T) \sim e^{-\Delta/T}$  à basse température, où  $\Delta$  est le gap pour une chaîne de  $N$  sites. Dans la limite  $N \rightarrow \infty$ , le gap entre le fondamental et le premier état excité d'aimantation non nulle s'annule en  $1/N$ . Pour  $N$  impair en revanche, le fondamental est doublement dégénéré, les états d'aimantation  $\pm 1/2$  ayant la même énergie. Dans ce cas, la susceptibilité diverge en  $1/T$  à basse température, suivant un loi de Curie. A la limite thermodynamique, une valeur finie de  $\chi(T = 0)$  est donc

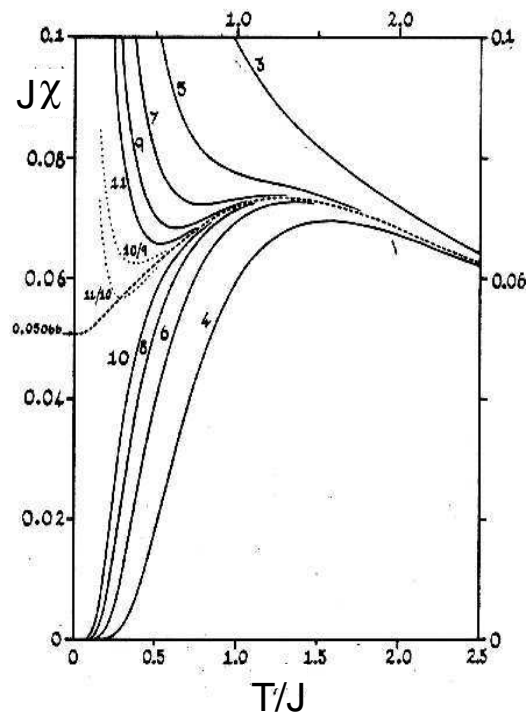


FIG. 1.3 - Courbe de susceptibilité de la chaîne isotrope de spin 1/2, obtenue numériquement par Bonner et Fisher dans [2].

possible. On peut estimer graphiquement cette valeur de la susceptibilité à  $T = 0$  en considérant la moyenne des courbes de susceptibilité pour  $N=9$  et  $10$ , puis pour  $N=10$  et  $11$ . Ces courbes, en pointillés sur la figure (1.3), suggèrent que  $\chi(T = 0)$  est compris entre  $0.045$  et  $0.06$ , ce qui est conforme à la prédiction de Griffiths.

Bonner et Fisher ([2]) ont aussi calculé numériquement la courbe d'aimantation pour des chaînes finies (figure (1.4)). Pour  $N$  fini, cette courbe est une fonction en escalier qui entoure correctement la solution exacte de Griffiths. La moyenne des courbes d'aimantation pour  $N=10$  et  $N=11$  reproduit déjà assez fidèlement les résultats exacts.

La très belle courbe de Bonner-Fisher ([2]) a été utilisée pendant longtemps, jusqu'au jour où on s'est aperçu qu'elle prédisait un comportement à haute température incorrect. En effet, pour une chaîne longue, les fonctions de corrélation ont une dépendance logarithmique multiplicative qui corrige le comportement d'échelle en loi de puissance :

$$\langle \mathbf{S}_x \cdot \mathbf{S}_0 \rangle \sim \frac{(\ln x)^{1/2}}{x}. \quad (1.2)$$



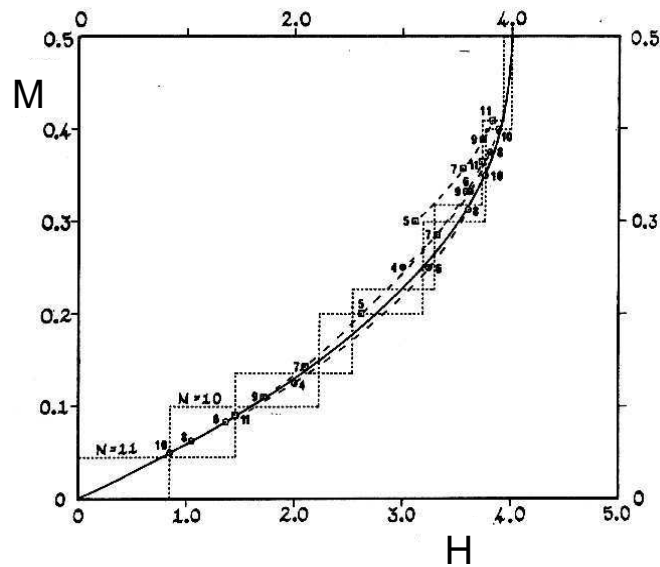


FIG. 1.4 - Courbe d'aimantation de la chaîne de spins 1/2 de taille finie obtenue par Bonner et Fisher ([2]). Cette courbe est en escalier et elle est représentée en pointillés pour  $N=10$  et  $N=11$ . Ces deux courbes encadrent la "vraie" courbe de Griffiths

Ce terme ne se voit pas numériquement dans les chaînes courtes comme celles de Bonner et Fisher, mais pour les chaînes longues, elles entraînent une chute de la susceptibilité à basse température. Numériquement, une méthode de diagonalisation exacte, limitée à des petits systèmes, ne peut capter cet effet, mais une étude numérique de l'ansatz de Bethe, menée par Takahashi ([4]), a permis de visualiser cette chute de la susceptibilité. Le groupe de renormalisation permet aussi de rendre compte de cet effet des termes logarithmiques ; Eggert et al. ([60]) ont obtenu la dépendance suivante :

$$\chi(T) \propto 1 + \frac{1}{2 \ln(T/T_0)} \cdot \quad (1.3)$$

Les mesures expérimentales dans ce système sont en remarquable accord avec les prédictions théoriques. Motoyama et al. ([61]) ont mesuré la susceptibilité magnétique dans la chaîne  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$  en fonction de la température et l'on comparée avec les prédictions théoriques. La brusque remontée vers 10 K témoigne d'un autre phénomène, tridimensionnel, car on atteint alors la température de Néel.

Il existe aussi des chaînes critiques de spins plus élevé. Un des meilleurs matériaux antiferromagnétiques de spin élevé est  $(\text{CH}_3)_4\text{NMnCl}_3$ . Ce matériau contient des métaux

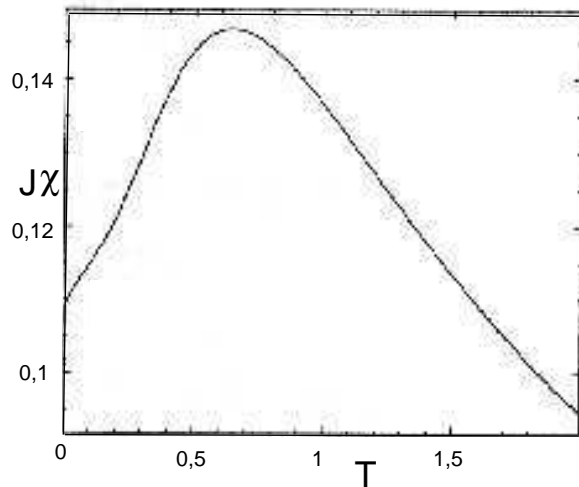


FIG. 1.5 - *Vraie courbe de susceptibilité magnétique dans la chaîne de spins  $1/2$  en fonction de la température. Cette courbe a été obtenue par Takahashi et al.*

de transition sous forme d'ions magnétiques avec une couche demi-remplie (ici c'est  $\text{Mn}^{2+}$ ). La règle de Hund entre ces 5 électrons de la couche d aligne les spins dans la même direction, formant un spin effectif  $5/2$ . Les interactions entre électrons d'ions voisins produisent un couplage antiferromagnétique entre les spins effectifs. Nous verrons plus loin dans la bosonisation de la chaîne de spins 1 (resp. de spin  $s$ ) que l'on doit considérer un spin 1 (resp. un spin  $s$ ) comme la somme de deux (resp.  $2s$ ) spins  $1/2$ . Cette approximation se justifie expérimentalement car c'est effectivement ce qui se passe dans les vrais matériaux de laboratoire.

## 1.2 La chaîne de spins 1

En 1983, appuyant son raisonnement sur des arguments de théorie des champs, Haldane a prédit que le spectre des chaînes isotropes de spin entier, et en particulier celui de la chaîne de spins 1, devait être radicalement différent de celui des chaînes de spins demi-entier. Haldane a affirmé qu'il devait y avoir un gap entre le fondamental et le premier état excité pour le spin entier, et que les corrélations de spin devaient décroître exponentiellement.

En 1986, une expérience ([1]) sur le composé  $\text{Ni}(\text{C}_2\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{NO}_2\text{ClO}_4$ , NENP pour les

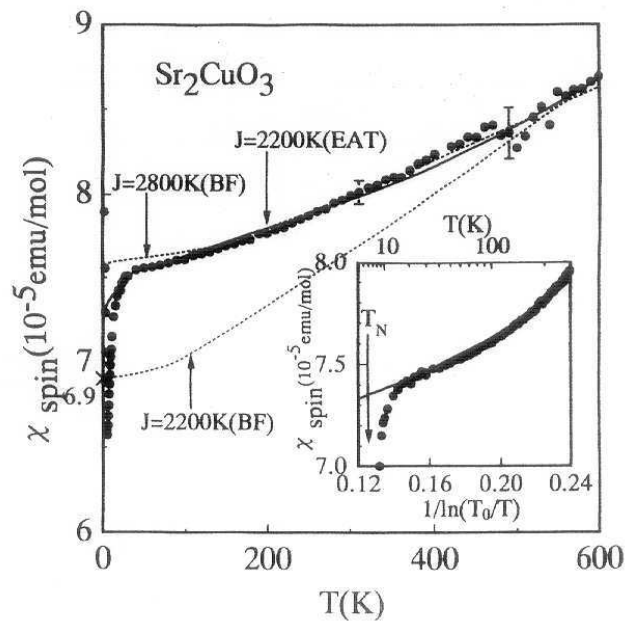


FIG. 1.6 - Courbe de susceptibilité magnétique dans la chaîne de spins  $1/2$  trouvée dans l'article [60]. La petite figure représente un grossissement à basse température de la courbe. Les gros points noirs sont les résultats expérimentaux qui se superposent parfaitement à la prédiction théorique d'Affleck et al. pour un échange  $J=2200$  K. Les deux autres courbes en pointillés sont les courbes de Bonner-Fisher pour  $J=2200$  K et pour  $J=2800$  K; cette dernière est le meilleur ajustement par rapport aux courbes numériques, mais cet ajustement devient très mauvais à basse température.

intimes, a confirmé la physique de Haldane. Ce composé est une très bonne chaîne de spins, les spins 1 étant portés par les ions nickel. Il a été prouvé par ce biais que cette physique était préservée sur une région finie de l'espace des paramètres d'anisotropie de la chaîne puisque le terme d'anisotropie  $\sum_i (S_i^z)^2$  est présent dans le hamiltonien microscopique avec un couplage  $D/J = 0,18$ . Une autre chaîne très prisée car elle est facile à doper est  $Y_2BaNiO_5$  pour laquelle le super-échange entre spins est  $J \simeq 300$  K alors que le couplage interchaîne  $J'$  vérifie  $J'/J \ll 10^{-2}$ , ce qui confère à ce système d'excellentes propriétés unidimensionnelles. Cette chaîne est elle aussi légèrement anisotrope, avec  $D/J \simeq 0,16$ .

Une technique de sondage du spectre d'excitation de la chaîne de spins 1 est la diffusion inélastique de neutrons. Les neutrons ont des interactions magnétiques avec les spins de la chaîne de spins 1. De même que la diffraction de rayon X dans un cristal donne un signal qui est la transformée de Fourier du réseau cristallin, de même le signal observé ici

sera la transformée de Fourier du magnétisme. Le signal expérimental est le facteur de structure  $S(q, \omega)$ , qui est la transformée de Fourier des corrélations de spin ;  $q$  est ici le moment transféré du neutron, et  $\omega$  est le transfert d'énergie. Ma et al. ([5]) ont effectué cette expérience sur notre ami NENP.

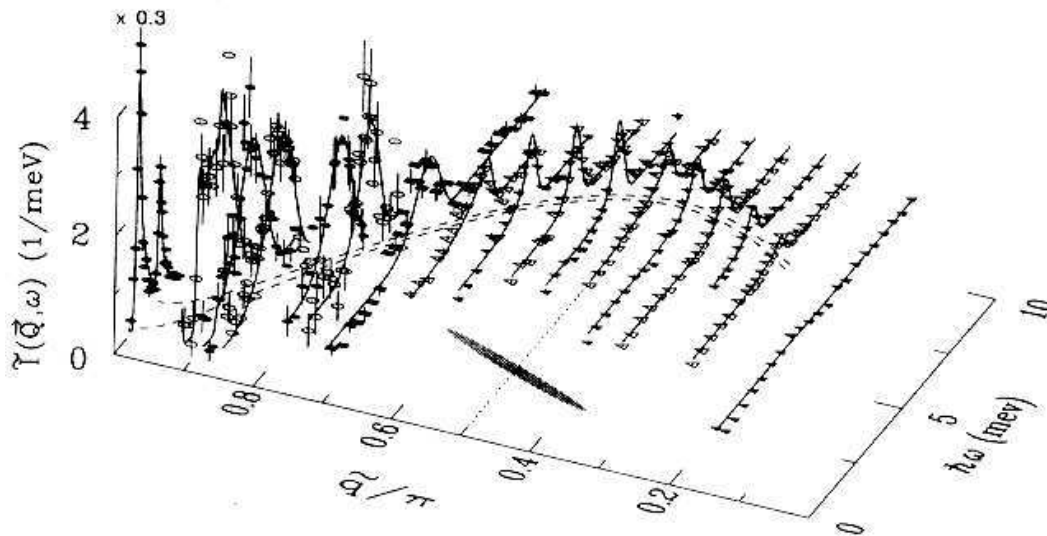


FIG. 1.7 - *Mesure expérimentale du facteur de structure dans le plan  $(q, \omega)$  (source : [5]).*

L'essentiel du signal se trouve près de  $q = \pi$  car le facteur de structure s'annule comme  $q^2$  pour  $q \rightarrow 0$ , et on voit bien sur les résultats expérimentaux que le gap de Haldane se situe près de  $q = \pi$ . Le spectre  $\omega(q)$  est donné par l'emplacement des pics dans le plan  $(q, \omega)$ , pics dont la largeur est ajustée à la température  $T$  du système ; le spectre est en double pointillés sur la figure (1.7). Le composé NENP est légèrement anisotrope ( $D \neq 0$ ), ce qui a pour influence de lever la dégénérescence du premier état excité à  $q = \pi$ . Cette levée est bien présente dans les résultats expérimentaux, où le premier pic correspond aux deux états aimantés du triplet et le deuxième correspond l'état non aimanté. Le premier pic est effectivement deux fois plus grand que le second. Le travail numérique de Golinelli et al. ([6]) a confirmé la forme du spectre pour NENP.

Une autre manière de voir l'état triplet à  $q = \pi$  est de placer le système en champ magnétique, ce qui a pour effet de mettre en évidence l'éclatement Zeeman de ce triplet (Zeeman splitting).

On s'attend à une diminution linéaire de la valeur du gap, et à ce que, pour une valeur

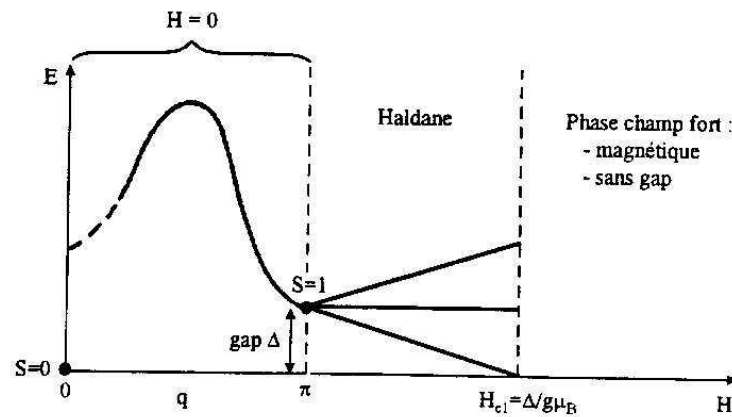


FIG. 1.8 - Courbe de dispersion de la chaîne de spins 1 ; éclatement Zeeman du triplet.

critique du champ  $Hc_1$  un des trois états vient fermer le gap. Cette valeur critique est de l'ordre du gap. Le système subit alors une transition de phase du second ordre et le fondamental est polarisé. Ensuite, l'aimantation du fondamental croît avec le champ magnétique pour se saturer au delà d'un deuxième champ critique  $Hc_2$ . Nous présentons ci-dessous les résultats expérimentaux ([8]) obtenus sur le composé  $(\text{CH}_3)_4\text{NNi}(\text{NO}_2)_3$  (TMNIN) qui sont en très bon accord avec les prédictions théoriques (en trait plein) de Sakai et Takahashi ([7]).

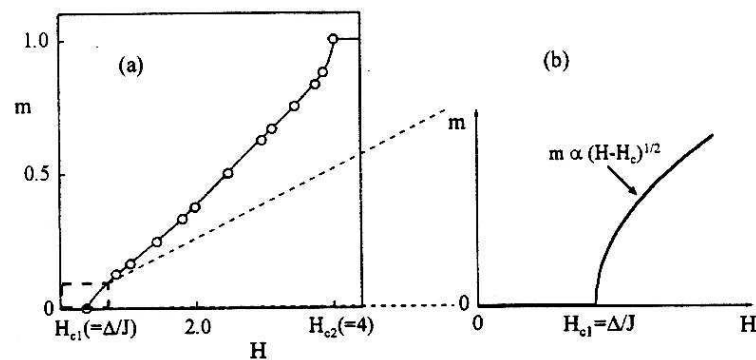


FIG. 1.9 - Courbe d'aimantation de la chaîne de spins 1. La courbe de droite est un agrandissement de la courbe d'aimantation à faible champ qui fait apparaître une annulation de l'aimantation en racine carrée de l'écart au champ critique.

En particulier, la théorie ([9]) comprend bien l'exposant  $1/2$  de l'annulation de l'aimantation avec le champ magnétique. On peut prouver que cette transition est du type commensurable-incommensurable, appartenant à la classe d'universalité de Pokrovsky-Talapov ([10]).

On peut écrire un modèle de Ginzburg-Landau pour la chaîne de spins 1 en champ magnétique, où, près du champ  $H_{c1}$ , la relation de dispersion est quadratique dans l'impulsion  $E(k) = \Delta + v^2 k^2 / 2\Delta$ . Au champ critique, les états d'aimantation 0 et +1 sont massifs et n'interviennent pas dans l'analyse de basse énergie ; on montre alors que ce modèle est équivalent à un fluide de bosons avec répulsion de cœur dur, lui-même équivalent à un gaz de fermions libres. Le champ magnétique joue alors le rôle de potentiel chimique et le champ critique joue celui du niveau de Fermi. Dans ce cas, la densité d'états est l'analogie de l'aimantation, et l'écart au champ critique est l'analogie de l'écart par rapport au niveau de Fermi. Comme  $\rho(\epsilon) \sim \sqrt{\epsilon}$ , on en déduit l'exposant 1/2.

Le théorème fluctuations-dissipation relie les corrélations de spin à la susceptibilité de spin. On peut donc montrer que la dépendance de  $\chi$  en température dépend du gap  $\Delta$  et suit la loi :

$$\chi(T) \stackrel{T \rightarrow 0}{\sim} \frac{A}{\sqrt{T}} e^{-\Delta/T}, \quad (1.4)$$

où  $A$  est une constante. Il est donc aisé de voir expérimentalement l'ouverture d'un gap qui tue le magnétisme à basse température. C'est l'expérience que Renard et al. ([1]) ont menée à bien sur le composé NENP, prouvant expérimentalement l'existence du gap de Haldane pour la première fois (en 1987).

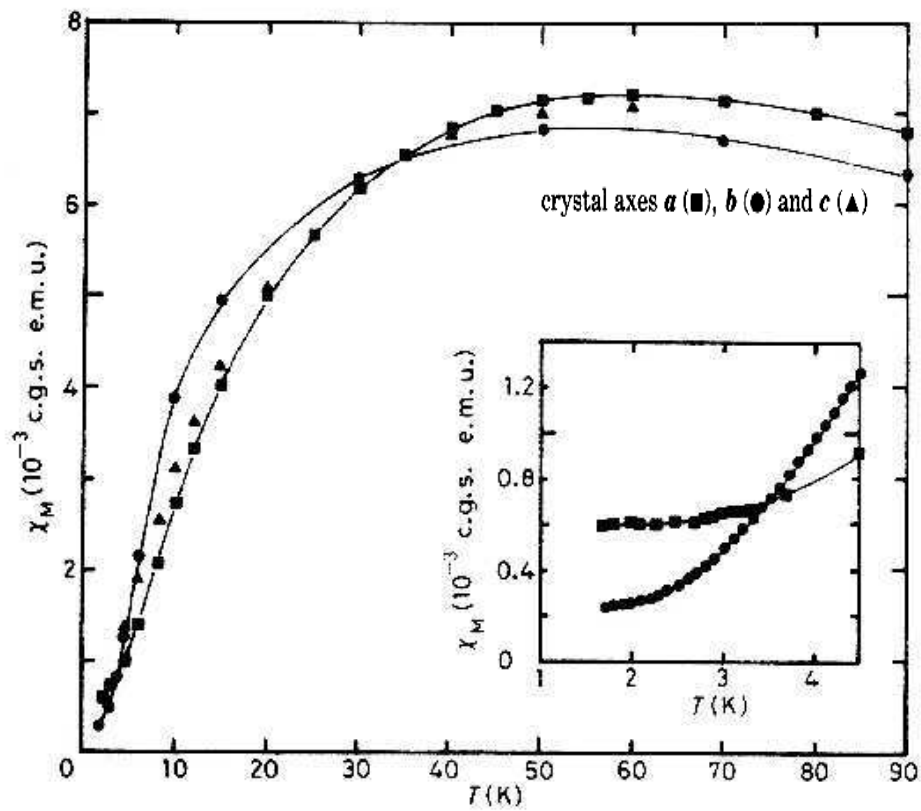


FIG. 1.10 - Courbe de susceptibilité magnétique dans les trois direction du champ possibles dans la chaîne de spins 1, démontrant l'ouverture du gap de Haldane grâce à la disparition du magnétisme à température nulle. Le petit encadré est un agrandissement des courbes à  $T=0$ .





# Chapitre 2

## Aspects théoriques sur les chaînes de spins

### 2.1 Les ondes de spin

Le hamiltonien de Heisenberg décrit les interactions plus proches voisins de spins quantiques localisés; il est donné, dans le cas unidimensionnel par :

$$\mathcal{H} = J \sum_{i \in \mathbb{N}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (2.1)$$

L'antiferromagnétisme ( $J > 0$ ) apparaît entre les spins électroniques d'ions sur un réseau lorsque les électrons sont localisés sur des orbites énergétiquement proches, que ces orbites ne sont pas orthogonales mais sont séparées spatialement : dans ce cas, l'anti alignement diminue l'énergie du système. Si on avait affaire à des spins classiques, l'état fondamental serait obtenu en minimisant l'énergie, et serait :



FIG. 2.1 - *L'état classique antiferromagnétique.*

Cet état classique antiferromagnétique (AF) est appelé état de Néel. Dans le cas quantique, la nouveauté vient de la non commutativité des opérateurs de spin au même site :

$$[S^a, S^b] = i\epsilon^{abc} S^c, \quad (2.2)$$

avec la propriété  $\mathbf{S}^2 = s(s+1)$ . On peut réécrire le hamiltonien de Heisenberg en terme des opérateurs  $S^\pm = S^x \pm iS^y$  :

$$\mathcal{H} = J \sum_i \left[ \frac{1}{2}(S_i^+ S_{i+1}^- + \text{h.c.}) + S_i^z S_{i+1}^z \right]. \quad (2.3)$$

L'état de Néel n'est par conséquent pas un état propre de  $\mathcal{H}$  puisque l'opérateur  $(S_i^+ S_{i+1}^- + \text{h.c.})$  monte et abaisse deux spins voisins<sup>1</sup>. Il est donc important de savoir si l'état de Néel est une bonne approximation du vrai fondamental et si l'ordre AF existe dans ce système, ce qui est visible dans les corrélations de spin si tel est le cas :

$$\langle S^z(x) S^z(0) \rangle \propto (-)^x. \quad (2.4)$$

L'état de Néel est une bonne approximation de l'état fondamental de  $\mathcal{H}$  dans la limite classique, c'est à dire dans la limite de grand spin  $s \rightarrow \infty$  car alors le commutateur quantique devient négligeable devant le carré des variables de spin :

$$[S^a, S^b] = i\epsilon^{abc} S^c = O(s) \ll O(s^2). \quad (2.5)$$

Ceci est le point de départ de la transformation d'Holstein-Primakov qui représente les opérateurs de spin en fonction d'opérateurs de bosons :

$$\begin{aligned} S^z &= s - a^\dagger a, \\ S^- &= \sqrt{2s} a^\dagger \left( 1 - \frac{a^\dagger a}{2s} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Cette représentation reproduit correctement les relations de commutation des opérateurs de spin, ainsi que la contrainte  $\mathbf{S}^2 = s(s+1)$ . L'état d'aimantation maximale  $S^z = s$  correspond à un état ne contenant aucun boson ; l'opérateur  $S^-$  crée un boson et diminue donc l'aimantation d'une unité. L'état d'aimantation  $-s$  est un état à  $2s$  bosons, et la racine carrée dans l'expression des opérateurs de spin interdit une aimantation encore plus négative.

---

1. En revanche l'état ferromagnétique  $|\uparrow \cdots \uparrow\rangle$  est un état propre de  $\mathcal{H}$  car

$$(S_i^+ S_{i+1}^- + \text{h.c.}) |\uparrow \cdots \uparrow\rangle = 0.$$

Cette transformation présente l'avantage que  $s$  est un paramètre libre du modèle, et en particulier, on va pouvoir interpoler entre les limites classique et quantique en effectuant un développement systématique en  $1/s$  (limite semi-classique). Dans la limite de  $s$  grand, on a :

$$S^- = \sqrt{2s} a^\dagger. \quad (2.7)$$

Dans le cas ferromagnétique, le hamiltonien s'écrit dans la limite  $s \rightarrow \infty$  :

$$\mathcal{H} = Js \sum_{\langle ij \rangle} \left[ -a_i^\dagger a_i - a_j^\dagger a_j + a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i \right], \quad (2.8)$$

et dans l'espace des moments :

$$\mathcal{H} = 2|J|s \sum_k (1 - \cos ka) a_k^\dagger a_k. \quad (2.9)$$

A petit  $k$  la relation de dispersion  $E(k) \sim Jsk^2$  est non relativiste.

Le cas antiferromagnétique nécessite l'introduction d'un deuxième type d'opérateurs de bosons (notés  $b$  et  $b^\dagger$ ) puisque le réseau est bipartite. Le sous-réseau A (sites pairs) sera occupé par les bosons  $a$  et on aura à la limite  $s \rightarrow \infty$  :

$$S_{2i}^- = \sqrt{2s} a_{2i}^\dagger \quad \text{et} \quad S_{2i}^z = s - a_{2i}^\dagger a_{2i}. \quad (2.10)$$

Le sous-réseau B (sites impairs) sera visité par les bosons  $b$  :

$$S_{2i+1}^- = \sqrt{2s} b_{2i+1} \quad \text{et} \quad S_{2i+1}^z = -s + b_{2i+1}^\dagger b_{2i+1}. \quad (2.11)$$

En insérant ces relations dans le hamiltonien et en effectuant une transformation de Bogoliubov dans l'espace de Fourier pour diagonaliser le hamiltonien (de façon extrêmement similaire à la théorie BCS), on peut écrire le hamiltonien sous une forme diagonale en terme de nouveaux bosons  $c$  et  $d$  :

$$\mathcal{H} = 2Js \sum_k (1 - \cos^2 ka)^{1/2} \left( c_k^\dagger c_k + d_k^\dagger d_k \right). \quad (2.12)$$

Les excitations créées par les opérateurs  $c$  et  $d$  sont appelées *ondes de spin*. Elle correspondent à des faibles déviations des spins par rapport à la configuration classique de Néel. La relation de dispersion est :

$$E(k) = 2Js(1 - \cos^2 ka)^{1/2} \stackrel{k \rightarrow 0}{\sim} Jsk/2. \quad (2.13)$$

A faible impulsion ceci est une relation de dispersion de particules relativistes décrivant des excitations de masse nulle résultant du théorème de Goldstone : la symétrie de spin globale  $SO(3)$  est brisée, dans l'état de Néel, en  $SO(2)$ . Dans cette approximation, on peut calculer le paramètre d'ordre :

$$\langle S^z \rangle = s - \langle a^\dagger a \rangle = s + \int \frac{dk}{4\pi} [1 - (1 - \cos^2 ka)^{-1/2}]. \quad (2.14)$$

Cette intégrale diverge logarithmiquement à une dimension, ce qui signifie que l'état de Néel est déstabilisé par les fluctuations quantiques, et que l'approximation des ondes de spin ne fonctionne pas à une dimension. On peut fournir un argument donnant la longueur de corrélation du système : si on suppose que l'invariance par rotation des spins est préservée à  $T = 0$ , on doit avoir  $\langle S^z \rangle = 0$ , et en introduisant une coupure  $k_0 = \xi^{-1}$  dans l'intégrale divergente, on obtient la relation asymptotique suivante :

$$0 = s + \int_{\xi^{-1}} \frac{dk}{2\pi k}. \quad (2.15)$$

Ceci conduit à une longueur de corrélation  $\xi \sim e^{\pi s}$ .

## 2.2 Le Modèle Sigma Non Linéaire

La méthode des ondes de spin suppose que l'invariance par rotation des spins de Heisenberg est spontanément brisée. Mais le théorème de Mermin-Wagner interdit toute brisure spontanée de symétrie à température  $T > 0$  en dimensions 1 et 2. Le modèle de Heisenberg classique à deux dimensions sur réseau carré est un exemple de système ordonné à température nulle et désordonné pour toute température non nulle. En effet, ce système est correctement décrit par un modèle sigma non linéaire ([11]) où la température est une variable marginale. Le groupe de renormalisation indique donc que la dépendance

en température de la fonction de corrélation est en  $e^{1/T}$ . Pour tout  $T > 0$  elle est non nulle, signe que le fondamental est désordonné, et elle diverge à  $T = 0$ , où le système se trouve dans son état fondamental classique qui est ordonné antiferromagnétiquement.

Pour un système classique, les interactions à courte portée sont sensibles aux corrélations à courte portée. Pour la chaîne AF de Heisenberg, les configurations semi-classiques importantes sont antiferromagnétiques à courte distance. Sur des échelles plus grandes, on peut s'éloigner beaucoup plus de l'ordre de Néel, à cause des fluctuations de grande longueur d'onde. Nous allons préserver l'invariance par rotation des spins et séparer les fluctuations à courte distance (antiferromagnétiques) des fluctuations à grande distance. A cet effet, nous introduisons donc deux champs vectoriels continus ([12]), et en posant :

$$\frac{\mathbf{S}(x)}{s} = (-)^x \mathbf{n}(x) \sqrt{1 - \left| \frac{\mathbf{L}(x)}{s} \right|^2} + \frac{\mathbf{L}(x)}{s}, \quad (2.16)$$

où le champ transverse  $\mathbf{L}$  décrivant les fluctuations ferromagnétiques est orthogonal au champ  $\mathbf{n}$  des fluctuations antiferromagnétiques de grande longueur d'onde :  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{n} = 0$ . En substituant l'expression ci-dessus dans le hamiltonien, on obtient à la limite continue :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= E_0^{cl} + \frac{1}{2} \int dx \rho_s |\nabla \mathbf{n}|^2 + \int dy \mathbf{L}_x \chi_{xy}^{-1} \mathbf{L}_y, \\ \chi_{xy}^{-1} &= \frac{J}{L} (\delta(x-y) + \delta(x-y+a)). \end{aligned} \quad (2.17)$$

La formulation lagrangienne de ce modèle fait appel aux états cohérents de spin, et on trouve finalement la fonction de partition, après intégration sur le champ  $\mathbf{L}$  :

$$Z = \int D\mathbf{n} \delta(\mathbf{n}^2 - 1) \exp \left[ -i \int dx dt \frac{1}{2g} (\partial_\mu \mathbf{n})^2 \right] e^{-i\Gamma[\mathbf{n}]}, \quad (2.18)$$

avec  $g = 2/s$  et  $\Gamma[\mathbf{n}] = 2\pi s \frac{1}{4\pi} \int dx dt (\mathbf{n} \times \partial_t \mathbf{n}) \cdot \partial_x \mathbf{n}$ . L'ensemble des configurations régulières du champ  $\mathbf{n}$  conduisant à une action finie est divisé en classes d'homotopie : chacune de ces classes regroupe les configurations que l'on peut relier continûment entre elles sans passer par des configurations singulières. On peut montrer que ces classes sont indexées par un entier relatif  $Q$  qui n'est rien d'autre que :

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int dx dt (\mathbf{n} \times \partial_t \mathbf{n}) \cdot \partial_x \mathbf{n}. \quad (2.19)$$

Ainsi,  $\Gamma[\mathbf{n}]$  est une dérivée totale. Si on compactifie l'espace euclidien ( $\mathbf{n}(\mathbf{x}) \rightarrow C^{te}$  lorsque  $|\mathbf{x}| \rightarrow \infty$ ), on peut alors voir  $\mathbf{n}$  et  $\mathbf{x}$  comme des points de la sphère  $S^2$ , et  $\mathbf{n}(\mathbf{x})$  comme un mapping de  $S^2$  sur  $S^2$ .  $\Gamma[\mathbf{n}]$  est le nombre d'enroulements de la sphère sur la sphère et appartient au groupe d'homotopie  $\pi_2(S^2) = \mathbb{Z}$ . Ce terme étant une dérivée totale, il n'a aucun effet sur les équations classiques du mouvement, ni sur la théorie de perturbations ; il s'agit d'un terme topologique, non perturbatif.

On peut donc réécrire la fonction de partition :

$$Z = \sum_{Q \in \mathbb{Z}} e^{2i\pi s Q} \int D\mathbf{n} \delta(\mathbf{n}^2 - 1) e^{-i \int \frac{1}{2g} (\partial_\mu \mathbf{n})^2}. \quad (2.20)$$

Pour une chaîne de spins entier, on a  $e^{2i\pi s Q} = 1, \quad \forall Q \in \mathbb{Z}$ . On obtient donc le modèle sigma non linéaire habituel, dont on connaît le flot de la constante de couplage  $g$  :

$$\frac{dg}{dl} = \frac{g^2}{2\pi}. \quad (2.21)$$

Ce flot nous conduit vers le régime de couplage fort, où le modèle sigma est désordonné et ses corrélations décroissent exponentiellement : le fondamental préserve la symétrie de rotation, mais il y a maintenant ouverture d'un gap exponentiellement petit entre cet état (singulet) et le premier état excité (triplet) :

$$\Delta \sim e^{-1/g} \sim e^{-\pi s}. \quad (2.22)$$

Les corrélations de spin s'obtiennent en prenant la transformée de Fourier inverse du propagateur massif  $(k^2 + \xi^{-2})^{-1}$  du champ  $\mathbf{n}$  :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S}(x) \cdot \mathbf{S}(0) \rangle &\propto (-)^x \langle \mathbf{n}(x) \cdot \mathbf{n}(0) \rangle \\ &\propto (-)^x \frac{e^{-|x|/\xi}}{\sqrt{|x|}}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

On s'attend à ce que ce comportement reste qualitativement valable pour toutes les chaînes de Heisenberg de spin entier avec couplage premiers voisins ([13]).

La situation est plus obscure pour les chaînes de spins demi-entier. Dans ce cas,  $e^{2i\pi s Q} = (-)^Q$ . Guidés par les résultats connus sur la chaîne de spins 1/2, Affleck et Haldane ont conjecturé que, lors du calcul des intégrales de chemin, la sommation sur  $Q$

devait créer des interférences destructives ([14]) qui allaient altérer l'état fondamental et les corrélations par rapport au modèle sigma de la chaîne de spins entier. Leur conclusion est que les chaînes de spins entier et demi-entier possèdent une physique très différente et, en particulier, le spectre d'excitation a un gap dans les chaînes de spins entier contrairement au cas des chaînes de spins demi-entier. Pour ces dernières, les corrélations décroissent lentement de manière algébrique :  $\langle \mathbf{S}_x \cdot \mathbf{S}_0 \rangle \propto (-)^x 1/x^\eta$  ( $\eta = 1$  pour la chaîne de spins 1/2). Les excitations des chaînes de spins demi-entier sont de masse nulle (le spectre d'excitations est sans gap), mais ne sont pas les ondes de spin.

Les résultats de Haldane ont reçu des confirmations, aussi bien expérimentales que théoriques et numériques ; en particulier, les travaux de Golinelli et al. ([15]) ont conduit à une mesure très précise du gap et de la longueur de corrélation de la chaîne de spins 1 de Heisenberg. Ils ont utilisé une méthode de diagonalisation exacte sur un système de 22 sites. La valeur du gap qu'ils ont obtenue est  $\Delta = 0,41049(2)$ . Ils ont aussi calculé les corrélations de spin, et un fit par la formule (2.23) conduit à  $\xi = 6,2a$ , où  $a$  est la maille du réseau.

## 2.3 Le modèle AKLT

Une autre méthode d'approche ([34]) pour les chaînes de spins entier est de trouver un hamiltonien voisin de celui de Heisenberg ayant un fondamental analogue à celui de Haldane. Fait remarquable, si on se donne un état suffisamment simple, il est possible de trouver le hamiltonien dont il est le fondamental.

Considérons  $S=1$  comme le symétrisé de deux objets de spin 1/2 :

$$|\alpha, \beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle + |\beta\rangle \otimes |\alpha\rangle). \quad (2.24)$$

On forme ensuite l'état VBS, totalement antisymétrique d'un site à l'autre.

$$|VBS\rangle = \cdots |\alpha, \beta\rangle_0 \epsilon_{\beta\gamma} |\gamma, \delta\rangle_1 \epsilon_{\delta\epsilon} |\epsilon, \rho\rangle_2 \cdots \quad (2.25)$$

Cela signifie par exemple que la configuration  $|\uparrow\uparrow\rangle_i \otimes |\uparrow\uparrow\rangle_{i+1}$  ( $J = J^z = 2$ ) n'apparaît jamais et, puisque l'état  $|VBS\rangle$  est invariant par rotation, il ne peut y avoir de lien de spin

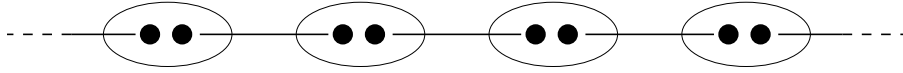


FIG. 2.2 - Vue d'artiste de l'état VBS.

2. Cet état décrit donc une chaîne de spins 1 dans un état singulet avec la particularité qu'un lien ne contient pas de composante  $J = 2$ . Donc, si on note  $P_2$  le projecteur sur l'état de spin 2, on a :

$$P_2(n, n+1)|VBS\rangle = 0. \quad (2.26)$$

Pour exprimer  $P_2(n, n+1)$ , on utilise la relation suivante qui vient de  $(\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j)^2 = 2s(s+1) + 2\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$  et  $1 = \sum_{J=0}^{2s} P_J(i, j)$  :

$$(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^m = \sum_{J=0}^{2s} \left[ \frac{1}{2} J(J+1) - s(s+1) \right]^m P_J(i, j) \quad (2.27)$$

On en déduit  $P_2(n, n+1)$ , et par suite :

$$\mathcal{H}_{AKLT} = \sum_n P_2(n, n+1) = \frac{1}{2} \sum_n \left[ \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \frac{1}{3} (\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1})^2 \right] + \frac{1}{3} N. \quad (2.28)$$

Ce hamiltonien, découvert par Affleck, Kennedy, Lieb et Tasaki ([34]), est défini positif et à courte portée, mais il nécessite un terme biquadratique pour faire de l'état VBS un fondamental exact. Le terme biquadratique additionnel est une perturbation du hamiltonien de Heisenberg et on s'attend à ce que la physique de Haldane soit préservée. De nombreuses études numériques ont montré que c'était effectivement le cas. On peut par exemple étudier le hamiltonien suivant qui interpole continument entre le hamiltonien de Heisenberg et le hamiltonien AKLT :

$$\mathcal{H}_\gamma = \sum_n \left[ \cos \gamma \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} + \sin \gamma (\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1})^2 \right]. \quad (2.29)$$

Des études numériques ont débouché sur le diagramme de phase de la figure (2.3), dépendant de  $\gamma$

Dans sa thèse, Schollwöck ([16]) a calculé par des méthodes de DMRG (Density Matrix Renormalisation Group) la valeur du paramètre d'ordre *string* en fonction de  $\gamma$ , ainsi que la valeur du gap de Haldane en fonction de  $\gamma$ .



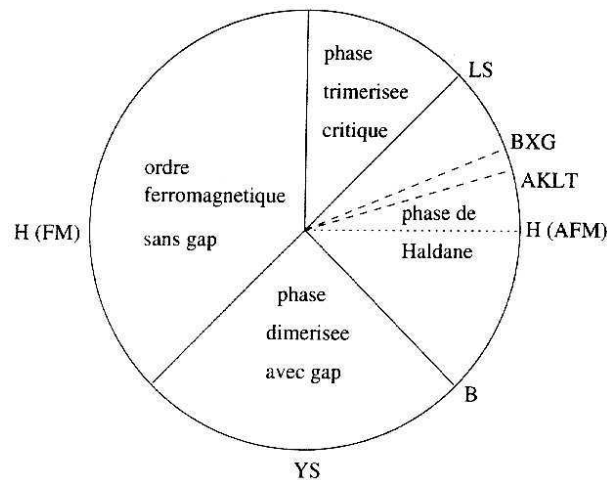


FIG. 2.3 - Diagramme de phase du hamiltonien biquadratique en fonction de  $\gamma$ , qui est l'angle par rapport à l'horizontale sur le camembert.

La courbe (2.4) prouve avec un grand degré de précision que le paramètre d'ordre string est non nul sur une grande région de l'espace des paramètres (pour  $\gamma \in [-\pi/4, \pi/4]$ ) incluant les hamiltoniens de Heisenberg et AKLT. La preuve est ainsi faite (numériquement) que la phase de Haldane survit à l'ajout d'un terme biquadratique, et en particulier que la chaîne AKLT est un système pertinent pour l'étude de la physique de la phase de Haldane.

Par ailleurs, Schollwöck a calculé la longueur de corrélation en fonction de  $\gamma$ . Par ce graphique (voir figure (2.5)), on voit que le point AKLT ( $\gamma = \arctan 1/3$ ) est un point de désordre de première espèce. Les travaux numériques ([17]) ont prouvé que ce point AKLT sépare deux régimes ; le premier, pour  $\gamma < \arctan 1/3$  où les corrélations de spin sont commensurables, c'est à dire proportionnelles à  $(-)^n$  ; le deuxième régime, pour  $\gamma > \arctan 1/3$ , a des corrélations de spin incommensurables, proportionnelles à  $\cos[(\pi - q(\gamma))n]$  avec  $q(\gamma) > 0$ .

Revenons à la chaîne AKLT. Il est plus simple de décrire l'état  $|VBS\rangle$  en terme de la représentation de  $SU(2)$  des bosons de Schwinger. Appelons  $|0\rangle$  le vide bosonique, et on introduit en chaque site deux opérateurs bosoniques vérifiant  $a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i = 2s$ . Les opérateurs de spin sont représentés par :

$$S_i^+ = a_i^\dagger b_i \quad S_i^- = b_i^\dagger a_i \quad S_i^z = \frac{1}{2}(a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i). \quad (2.30)$$

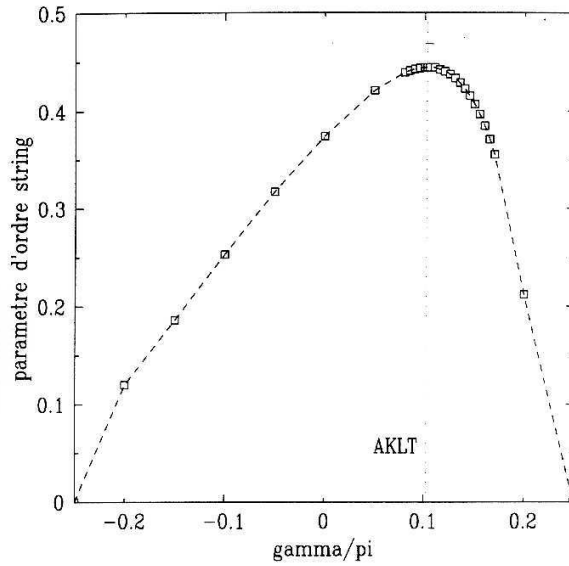


FIG. 2.4 - Paramètre d'ordre non local en fonction de  $\gamma$ .

L'état de spin  $s$  et d'aimantation  $m$  au site  $i$  est :

$$|s, m\rangle_i = \frac{(a_i^\dagger)^{s+m}}{\sqrt{(s+m)!}} \frac{(b_i^\dagger)^{s-m}}{\sqrt{(s-m)!}} |0\rangle. \quad (2.31)$$

Guidé par cette formule, on peut écrire l'état  $|VBS\rangle$  qui est obtenu en créant un lien antisymétrique d'aimantation nulle entre deux spins voisins :

$$|VBS\rangle = \prod_i (a_i^\dagger b_{i+1}^\dagger - a_{i+1}^\dagger b_i^\dagger) |0\rangle. \quad (2.32)$$

L'état  $|VBS\rangle$  est composé de dimères de liens singulets entre plus proches voisins.

Le formalisme des bosons de Schwinger permet de calculer la fonction de corrélation de spin :

$$\langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_n \rangle = \frac{4}{3} \left( -\frac{1}{3} \right)^n. \quad (2.33)$$

La longueur de corrélation s'écrit donc  $\xi = a/\ln 3 \sim 0.91 a$ , ce qui est de l'ordre de la maille du réseau  $a$ .

Pour la beauté du geste, je ne résiste pas au plaisir de signaler qu'Arovas a trouvé

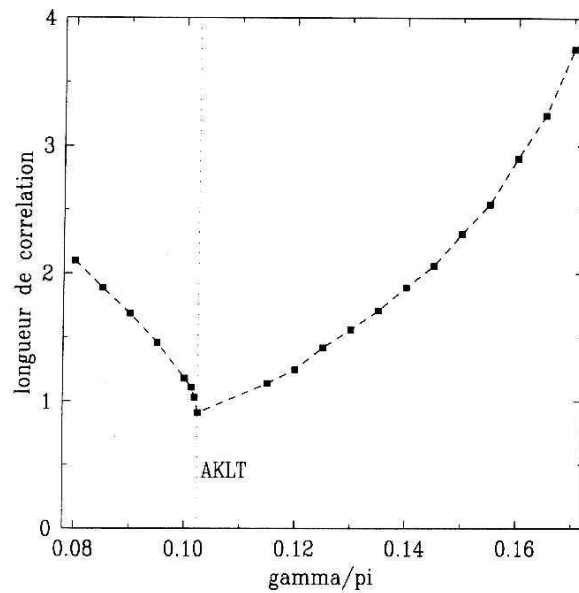


FIG. 2.5 - Longueur de corrélation de la chaîne biquadratique en fonction de  $\gamma$ .

deux états propres exacts du hamiltonien AKLT :

$$\begin{aligned}
 |A\rangle &\propto \sum_n (-)^n |\alpha_n\rangle & H|A\rangle &= \frac{5}{3}|A\rangle, \\
 |B\rangle &\propto \sum_n (-)^n |\beta_n\rangle & H|B\rangle &= 2|B\rangle.
 \end{aligned}
 \tag{2.34}$$

où les états  $|\alpha_n\rangle$  et  $|\beta_n\rangle$  peuvent être représentés graphiquement (chaque point représente un spin 1) :

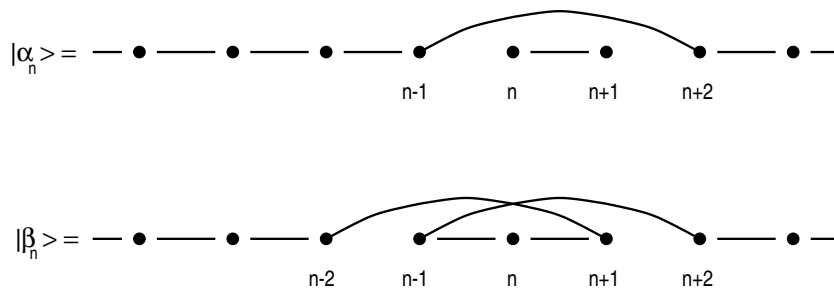


FIG. 2.6 - Etats propres exacts de la chaîne AKLT.

On peut généraliser le travail d'AKLT à des valeurs plus grandes du spin. Pour  $s$  plus grand, Oshikawa ([18]) a construit des états du type  $|VBS\rangle$ ; pour le spin 3 par exemple, on a :

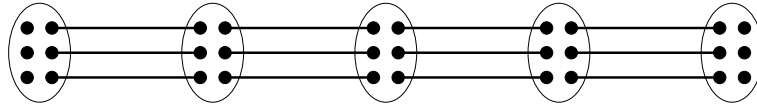


FIG. 2.7 - *Etat du type VBS pour la chaîne de spins 3.*

Pour la chaîne ouverte, on trouve des degrés de liberté de spin  $s/2$  résiduels en bouts de chaîne, dont on verra dans la suite l'importance au niveau des propriétés de symétrie du système (symétrie  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$  pour  $s = 1$ ). Suivant que  $s$  est pair ou impair, on peut donc subodorer (et c'est ce qu'a fait Oshikawa) des propriétés de symétrie différentes.

La représentation en terme des bosons de Schwinger est ici encore très utile et permet de calculer la longueur de corrélation en fonction du spin  $s$  ([19]):

$$\xi = \left[ \ln \left( 1 + \frac{2}{s} \right) \right]^{-1}. \quad (2.35)$$

Pour  $s = 2$ , on trouve  $\xi \sim 1.43$  et on peut prouver que pour tout  $s$  entier le fondamental de l'état  $|VBS\rangle$  est séparé du premier état excité par un gap fini proportionnel à  $\xi^{-1}$ .

La chaîne de spins AKLT présente une remarquable analogie avec l'effet Hall quantique fractionnaire. Il s'agit d'un phénomène observé dans les systèmes bidimensionnels d'électrons en fort champ magnétique. On observe une quantification de la conductivité de Hall  $\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h}$  pour certaines valeurs fractionnaires de  $\nu$  lorsque le champ magnétique est augmenté. Dans ces expériences, l'énergie cyclotron  $\hbar\omega_c$  est grande devant les interactions typiques entre électrons, si bien qu'on peut négliger les excitations d'un niveau de Landau à l'autre. Laughlin ([20]) a proposé une fonction d'onde pour décrire la nature des états au remplissage  $\nu = 1/q$  où  $q$  est un entier impair:

$$\psi(z_1, \dots, z_N) \propto \prod_{i < j} (z_i - z_j)^q e^{-\frac{1}{4} \sum_k |z_k|^2}. \quad (2.36)$$

Cette fonction d'onde respecte la statistique de Fermi. Haldane ([21]) a remarqué que cette fonction s'annulait comme  $(z_i - z_j)^q$ , ce qui signifie qu'aucune paire de particules n'a de projection sur des états de moment angulaire  $l < q$ . Dans le niveau de Landau le plus bas, toute interaction  $v(z_i - z_j)$  entre particules peut se développer en terme des opérateurs de projection sur les états de moment angulaire relatif  $l$ . Si  $\Pi_0$  désigne le projecteur sur

le niveau de Landau le plus bas, et  $P_l(ij)$  est le projecteur sur l'état de moment angulaire  $l$  de la paire  $(ij)$ , on obtient :

$$\Pi_0 v(z_i - z_j) \Pi_0 = \sum_{l=0}^{\infty} V_l P_l(ij). \quad (2.37)$$

Les  $V_l$  peuvent alors être choisis de sorte que la fonction d'onde de Laughlin soit le fondamental exact du hamiltonien  $H = \Pi_0 \sum_{i < j} v(z_i - z_j) \Pi_0$ . Pour cela, on prend  $V_l = 0$  pour tout  $l \geq q$ ; la procédure pour trouver le hamiltonien est donc très semblable à celle suivie par AKLT.

## 2.4 L'ordre caché

On obtient une image intuitive et visuelle de l'état  $|VBS\rangle$  lorsqu'on l'écrit sous forme d'une superposition d'états diagonaux dans la base des opérateurs  $S_i^z$ . Donnons un exemple de contribution : chaque spin 1 est le symétrisé de deux spin 1/2 et la valeur propre de  $S_i^z$  est -1, 0 ou 1. Mais l'ordre de ces valeurs propres le long de la chaîne est contraint par le fait que les liens VBS doivent être des singulets de spin. Une configuration possible :

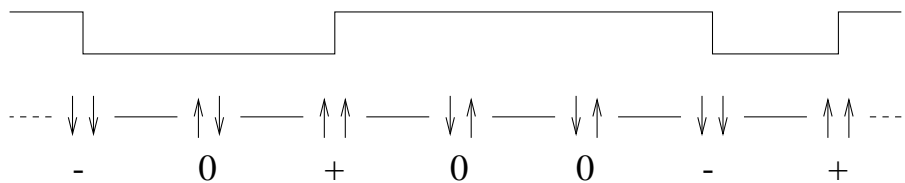


FIG. 2.8 - Représentation de l'ordre caché de la phase de Haldane.

Dans cette construction, on voit que si on élimine les 0, on obtient un ordre antiferromagnétique strict. On parle d'ordre AF dilué, ou encore d'ordre caché.

On doit donc trouver un paramètre d'ordre qui mesure les corrélations antiferromagnétiques en ignorant les 0. Den Nijs et Rommelse ([33]) ont proposé le paramètre d'ordre *string* ; il ne s'agit pas d'un sous-vêtement mais réellement d'une fonction de corrélation non locale :

$$\mathcal{O}_{ij}^z = \langle S_i^z e^{i\pi \sum_{k=i+1}^{j-1} S_k^z} S_j^z \rangle, \quad (2.38)$$

Le rôle de l'exponentielle est de contribuer d'un facteur 1 lorsque  $S_k^z = 0$ , et de changer le signe sinon. Pour le hamiltonien AKLT, on peut calculer la valeur numérique du paramètre d'ordre :  $\lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \mathcal{O}_{ij}^z = 4/9$ . Pour la chaîne de Heisenberg, on trouve environ 0,37.

Kennedy et Tasaki ([22]) ont montré que pour la chaîne de spins 1, ce paramètre d'ordre est associé à la brisure d'une symétrie discrète, la brisure engendrant alors le gap. Pour cela, ils ont introduit une transformation unitaire  $U$  sous laquelle le paramètre d'ordre string est transformé en un paramètre d'ordre ferromagnétique plus conventionnel. Bien entendu, la transformation n'est pas locale, et le hamiltonien obtenu non plus. Plus précisément, si on appelle  $\tilde{H} = UHU^{-1}$  le hamiltonien transformé, on a :

$$\mathcal{O}^z(i, j)[H] = \mathcal{O}_{ferro}^z(i, j)[\tilde{H}], \quad (2.39)$$

où  $\mathcal{O}_{ferro}^z(i, j) = \langle S_i^z S_j^z \rangle$ . Le hamiltonien transformé ne possède alors que deux symétries discrètes, qui sont les rotations d'angle  $\pi$  autour des axes  $x$  et  $z$ , c'est à dire que la symétrie du système est  $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ . On peut démontrer que la brisure des deux symétries  $\mathbb{Z}_2$ , pour la chaîne de Heisenberg et pour la chaîne AKLT conduisent à la même phase. Pour des chaînes ouvertes, on trouve 4 états fondamentaux dégénérés, correspondant aux 4 combinaisons possibles de la polarisation des spins 1/2 résiduels en bouts de chaîne.

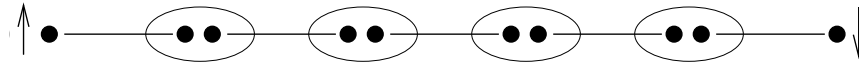


FIG. 2.9 - Spins 1/2 résiduels en bouts de chaîne de spins 1.

La présence de ces spins résiduels en bouts de chaîne a été prédite par Kennedy ([23]) pour la chaîne de Heisenberg. Miyashita et Yamamoto ([24]) ont établi la preuve numérique de ce phénomène par des simulations Monte-Carlo pour la chaîne isotrope. Ils ont calculé l'aimantation locale en chaque site pour l'état fondamental et pour des longueurs de chaîne différentes,  $L=13, 25, 33, 65$  et  $97$ . Dans tous ces cas, l'aimantation est alternée et décroît de la même façon.

Sur ces courbes, on voit clairement que la moitié de l'aimantation totale ( $M_z = 1$ ) est localisée sur les deux extrémités de la chaîne. Les données peuvent aussi être rapportées sur un diagramme semi-log pour mieux apprécier la décroissance de l'aimantation le long de la chaîne (voir fig (2.11)).

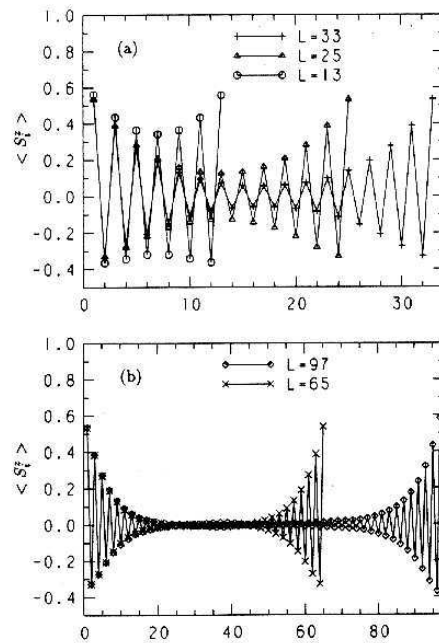


FIG. 2.10 - Aimantation locale pour une chaîne de taille finie ([24]) ; l'abscisse représente les sites le long de la chaîne.

Dans les chaînes longues, l'aimantation décroît exponentiellement comme  $\langle S_j^z \rangle \propto e^{-j/\xi}$  ; ici, on trouve  $\xi \sim 6$ . Si on tient compte des effets de taille finie, on choisira comme ansatz  $\langle S_j^z \rangle \propto e^{-(j-1)/\xi} + e^{-(L-j)/\xi}$ , et là encore,  $\xi \sim 6$  est une bonne approximation pour la longueur de corrélation. Ainsi, pour des chaînes de taille plus grande que 25 sites, les effets de taille finie ne jouent pas de rôle significatif, et la décroissance de l'aimantation est simplement exponentielle.

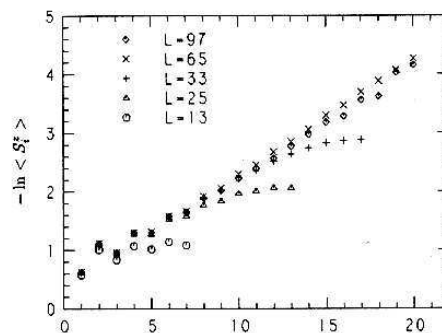


FIG. 2.11 - Aimantation locale pour une chaîne de taille finie ; diagramme en semi log (extrait de [24]).

Expérimentalement, les effets de taille finie sont observables dans les chaînes de spins 1, et en particulier en ce qui concerne les degrés de liberté de spin 1/2 aux bords. Hagiwara et al. ([25]) ont mené une expérience sur les chaînes de NENP dopées au cuivre (impuretés magnétiques de spin 1/2); dans cette expérience, les ions cuivre II se substituent au nickel et cassent la chaîne. Au voisinage de l'impureté on a la représentation diagrammatique suivante pour l'état VBS :

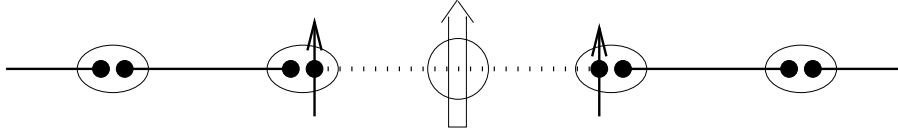


FIG. 2.12 - Impureté magnétique  $s = 1/2$  dans une chaîne de spins 1.

Les techniques de résonance de spin électronique (RSE) permettent une étude microscopique locale de ce système. Pour des impuretés suffisamment diluées (0.7% dans cette expérience), on peut considérer que les impuretés interagissent essentiellement avec leurs plus proches voisins et qu'elles n'interagissent pas entre elles. Le modèle de spin effectif qui va contribuer au signal de RSE est un modèle à 3 spins 1/2. Les prédictions théoriques pour ce modèle sont en très bon accord avec les signaux obtenus expérimentalement et si on modifie le modèle, les prédictions diffèrent qualitativement avec l'expérience. Tout ceci prouve que le scénario décrit ci-dessus pour le dopage de la chaîne est correct.



# Chapitre 3

## La bosonisation par l'exemple

### 3.1 Fermions libres et en interaction

La quintessence de la bosonisation réside dans les fermions libres à une dimension. Soit un modèle de fermions libres sans spin sur réseau, défini par le hamiltonien :

$$\mathcal{H} = -t \sum_n \left( c_{n+1}^\dagger c_n + \text{h.c.} \right), \quad (3.1)$$

où  $c_n^\dagger$  et  $c_n$  sont les opérateurs de création et d'annihilation au site  $n$ . Dans l'espace de Fourier, on a simplement :

$$\mathcal{H} = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad (3.2)$$

avec  $\epsilon_k = -2t \cos k$ . Cette relation décrit la bande d'électrons où tous les états en dessous de l'énergie de Fermi sont occupés à température nulle. Les excitations qui vont nous intéresser vont donc être les excitations de basse énergie (de grande longueur d'onde), autour du niveau de Fermi. Ces excitations sont de deux types : il y a les excitations particule-trou de moment nul ( $k = 0$ ) ainsi que les excitations particule-trou à grand moment transféré ( $k = 2k_F$ ). Ceci revient à linéariser la bande électronique au voisinage de la surface de Fermi et à ne considérer que les fermions R se déplaçant vers la droite (d'impulsion  $k$  telle que  $|k - k_F| \ll k_F$ ) et les fermions L se déplaçant vers la gauche (d'impulsion  $k$  telle que  $|k + k_F| \ll k_F$ ). Cette procédure nécessite d'introduire une coupure  $\Lambda \ll k_F$  afin d'éviter les doubles comptages de fermions. A la limite continue, les sommes discrètes sont remplacées par des intégrales, et la décomposition en modes de l'opérateur

fermionique s'écrit :

$$c_n = e^{-ik_F n} \int_{-k_F - \Lambda}^{-k_F + \Lambda} \frac{dk}{2\pi} c_k e^{i(k+k_F)n} + e^{ik_F n} \int_{k_F - \Lambda}^{k_F + \Lambda} \frac{dk}{2\pi} c_k e^{i(k-k_F)n}. \quad (3.3)$$

D'où, à la limite continue :

$$\psi(x) = e^{-ik_F x} \psi_R(x) + e^{ik_F x} \psi_L(x). \quad (3.4)$$

Le hamiltonien se réécrit lui aussi à la limite continue :

$$\mathcal{H} = iv_F \int dx \left( \psi_L^\dagger \nabla \psi_L - \psi_R^\dagger \nabla \psi_R \right). \quad (3.5)$$

avec  $v_F = 2t \sin k_F$ .

Nous avons donc obtenu une théorie continue de fermions relativistes de célérité  $c = v_F$ . Nous allons à présent montrer que cette théorie a les mêmes propriétés critiques qu'une théorie de bosons à une dimension ; nous allons "bosoniser" ([27, 58]) le modèle de fermions. Deux philosophies sont disponibles. La première constitue la version "physique du solide" ; il s'agit de remarquer que les opérateurs densité de fermions ( $\rho_{L,R} = c_{L,R}^\dagger c_{L,R}$ ) satisfont des relations de commutation identiques à celles d'opérateurs de création et d'annihilation de bosons.

Nous allons plutôt présenter une version "théorie des champs" de la bosonisation qui met davantage l'accent sur les dimensions des opérateurs, notion clef pour la suite. Il est très facile de décomposer les opérateurs de fermions en modes et de calculer ensuite des fonctions de corrélation. Il vient :

$$\langle \psi_L^\dagger(x, t) \psi_L(0, 0) \rangle = \frac{i}{4\pi(t - x + i\epsilon)}, \quad (3.6)$$

et une relation analogue s'obtient pour les corrélations de  $\psi_R$ .

Gardons ceci en mémoire, et considérons à présent le modèle de boson scalaire libre, décrit par le hamiltonien :

$$\mathcal{H} = \frac{v}{2} \int dx [\Pi^2 + (\nabla \phi)^2]. \quad (3.7)$$

La décomposition en modes du champ  $\phi$  fait aussi apparaître les champs chiraux  $\phi_L$  et  $\phi_R$  de bosons se déplaçant respectivement vers la gauche et vers la droite :

$$\partial^2 \phi = 0 \implies \phi(x, t) = \phi_L(x + t) + \phi_R(x - t) \quad (3.8)$$

Il est possible de calculer les fonctions de corrélation  $\langle e^{i\beta\phi_L(x,t)} e^{-i\beta\phi_L(0,0)} \rangle$  par une simple intégration gaussienne :

$$\langle e^{i\beta\phi_L(x,t)} e^{-i\beta\phi_L(0,0)} \rangle \sim \left( \frac{1}{x+t} \right)^{\beta^2/4\pi}. \quad (3.9)$$

Le lecteur attentif aura remarqué qu'en choisissant  $\beta = \sqrt{4\pi}$ , cette fonction de corrélation a le même comportement asymptotique que la corrélation de fermions  $\psi_L$ . On a donc envie d'identifier, au sens de l'insertion dans les fonctions de corrélation, les opérateurs  $\psi_L$  et  $e^{i\sqrt{4\pi}\phi_L}$ . Du point de vue dimensionnel,  $\psi_L$  est de dimension  $1/2$ ; il faut donc introduire une échelle de longueur  $\alpha$  de l'ordre de la maille du réseau et on pose l'identification suivante, valable au sens de l'insertion dans les fonctions de corrélation pour la théorie libre :

$$\begin{aligned} \psi_L &\equiv \frac{i}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{i\sqrt{4\pi}\phi_L}, \\ \psi_R &\equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i\sqrt{4\pi}\phi_R}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Les deux théories, fermions libres et bosons libres, sont identifiées par les recettes ci-dessus. Ces deux recettes ne sont toutefois pas exhaustives. Par exemple, les courants, qui sont des produits d'opérateurs fermioniques au même point, font intervenir l'ordre normal des opérateurs. La procédure de bosonisation ne se réduit pas à un acte naïf : les courants chiraux s'écrivent sous forme fermionique, puis bosonique :

$$\begin{aligned} J_L &=: \psi_L^\dagger \psi_L := -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_x \phi_L, \\ J_R &=: \psi_R^\dagger \psi_R := -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_x \phi_R. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Si on introduit le moment conjugué  $\Pi$  du champ  $\phi$ , les formules de Mandelstam expriment simplement les champs  $\phi_L$  et  $\phi_R$  en fonction de  $\phi$  et  $\Pi$  :

$$\begin{aligned} \phi_L &= \frac{1}{2} \left[ \phi + \int_{-\infty}^x dy \Pi(y) \right], \\ \phi_R &= \frac{1}{2} \left[ \phi - \int_{-\infty}^x dy \Pi(y) \right]. \end{aligned} \quad (3.12)$$

On introduit aussi le champ  $\tilde{\phi} = \phi_L - \phi_R$ , appelé champ dual de  $\phi$ .

A présent, considérons un modèle de fermions en interaction, dont l'exemple prototypique est le modèle  $t - V$  :

$$\mathcal{H} = -t \sum_n \left( c_{n+1}^\dagger c_n + \text{h.c.} \right) + V \sum_n c_n^\dagger c_n c_{n+1}^\dagger c_{n+1}. \quad (3.13)$$

A la limite continue, ce modèle s'appelle modèle de Tomonaga-Luttinger. Il est alors possible d'écrire une théorie bosonisée grâce aux recettes ci-dessus qui vont reproduire les corrélations de la théorie fermionique. La version bosonique du modèle  $t - V$  s'écrit :

$$\mathcal{H} = \int dx \frac{v}{2} \left[ K \Pi^2 + \frac{1}{K} (\nabla \phi)^2 \right]. \quad (3.14)$$

Dans la limite de faible interaction  $V/t \ll 1$ , on obtient :

$$\begin{aligned} vK &= v_F = 2t \sin k_F, \\ K &= 1 - \frac{V}{\pi t} \sin k_F. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Une transformation de Bogoliubov  $\Pi \rightarrow \Pi\sqrt{K}$ ,  $\phi \rightarrow \phi/\sqrt{K}$  permet d'obtenir un hamiltonien de bosons libres. En revanche, lorsqu'on calcule les corrélations de fermions par la méthode de bosonisation, la transformation ci-dessus a pour conséquence que les exposants de certaines fonctions de corrélation dépendent du paramètre  $K$ , et donc de la force des interactions. Les corrélations du modèle de Tomonaga-Luttinger ne sont pas toutes universelles.

On peut généraliser la transformation de bosonisation au cas des fermions avec spin. Le modèle de Hubbard est un modèle de fermions avec spin en interaction, défini par le hamiltonien :

$$\mathcal{H} = -t \sum_{i,\sigma} \left( c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + \text{h.c.} \right) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (3.16)$$

où  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$ . Ce modèle se bosonise en introduisant deux champs bosoniques  $\phi_\uparrow$  et  $\phi_\downarrow$  pour les fermions de spin  $\uparrow$  et de spin  $\downarrow$  respectivement. Il se trouve qu'une rotation interne sur les champs  $\phi_\uparrow$  et  $\phi_\downarrow$  permet de découpler (en première approximation) les deux secteurs en deux nouveaux secteurs, l'un de charge et l'autre de spin, dont les excitations sont décrites par les champs  $\phi_c$  et  $\phi_s$  :

$$\phi_{c,s} = \frac{\phi_\uparrow \pm \phi_\downarrow}{\sqrt{2}}. \quad (3.17)$$

La version bosonisée de ce modèle est :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_s + \frac{2g_{1\perp}}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos(\sqrt{8\pi}\phi_s) + \frac{2g_{3\perp}}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos(\sqrt{8\pi}\phi_c + 2k_F x). \quad (3.18)$$

Le dernier terme provient des contributions umklapp à la diffusion et ne peut être pertinent qu'au demi-remplissage ( $k_F = \pi/2$ ).  $\mathcal{H}_c$  et  $\mathcal{H}_s$  sont les termes cinétiques pour les degrés de liberté de charge et de spin respectivement.

## 3.2 La chaîne de spins 1/2

Dans ce paragraphe nous montrons que la chaîne de Heisenberg de spins 1/2 antiferromagnétique n'est rien d'autre qu'un modèle de fermions sans spin en interaction à une dimension. Ce modèle peut donc se bosoniser sans le moindre souci. Les théoriciens considèrent souvent le modèle de la chaîne anisotrope XXZ, qui généralise le modèle de Heisenberg. Son hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H} = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_n (S_n^+ S_{n+1}^- + \text{h.c.})}_{\mathcal{H}_{XY}} + \Delta \underbrace{\sum_n S_n^z S_{n+1}^z}_{\text{Anisotropie}}. \quad (3.19)$$

Au site  $i$ , les valeurs propres de l'opérateur  $S_i^z$  sont  $\pm 1/2$ . Considérons une configuration donnée et définissons le modèle fermionique suivant : au site  $i$ , on dira qu'il y a un fermion si le spin est  $\uparrow$  et qu'il n'y a pas de fermion si le spin est  $\downarrow$ . Les opérateurs  $S_i^+$  et  $S_i^-$  font passer le spin du site  $i$  du spin  $\downarrow$  à  $\uparrow$  et inversement. En langage de fermions, ce sont des opérateurs de création et d'annihilation. Cette transformation d'un modèle de spins en un modèle de fermions est due à Jordan et Wigner. De manière formelle, les opérateurs de spin et de fermions sont reliés par les relations explicitement hermitiques ci-dessous :

$$\begin{aligned} S_n^+ &= (-)^n c_n^\dagger \cos\left(\pi \sum_{m < n} c_m^\dagger c_m\right), \\ S_n^- &= (-)^n c_n \cos\left(\pi \sum_{m < n} c_m^\dagger c_m\right), \\ S_n^z &= c_n^\dagger c_n - \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Le facteur non local (string)  $\cos(\pi \sum_{m < n} c_m^\dagger c_m)$  a pour rôle de forcer les opérateurs de spin à commuter de site à site alors que les opérateurs de fermions vérifient des relations d'anticommutation. L'état fondamental a une aimantation nulle (par invariance par rotation) et, par conséquent, les fermions se trouvent au demi-remplissage. L'application d'un champ magnétique dans la direction  $z$  vient briser cette invariance par rotation et joue le rôle de potentiel chimique pour les fermions. Nous avons vu que les excitations de basse énergie pour les fermions étaient les excitations particule-trou à  $k = 0$  et  $k = 2k_F$ ; elles correspondent, dans le modèle de spins aux excitations ferromagnétiques et antiferromagnétiques respectivement. Il est possible d'écrire les opérateurs de spin sous forme bosonisée, en utilisant les Eq. [3.10,3.11] :

$$\begin{aligned} S^+(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} e^{-i\sqrt{\pi}\tilde{\phi}} \left[ (-)^x + \sin(\sqrt{4\pi}\phi) \right] \\ S^z(x) &= -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \nabla\phi + \frac{(-)^x}{\pi\alpha} \cos\sqrt{4\pi}\phi \end{aligned} \quad (3.21)$$

Il est de même possible de bosoniser le hamiltonien (3.19) lui-même. Les termes XY de ce hamiltonien correspondent à l'abaissement du spin en  $i$  et à sa remontée au site  $i + 1$  (ou inversement); en termes de fermions, il s'agit d'une particule qui saute du site  $i$  au site  $i + 1$ . On subodore déjà, sans calcul, que le terme XY correspond à un modèle de fermions libres. C'est effectivement le cas; et si on exprime la partie XY du hamiltonien en terme de fermions ou de bosons, on obtient :

$$\mathcal{H}_{XY} = \pi \int dx (J_L^2 + J_R^2). \quad (3.22)$$

Le terme d'anisotropie Ising est plus délicat; exprimé en terme des fermions L et R, il fait apparaître des termes à deux fermions, dont les courants  $J_L$  et  $J_R$  qui vont modifier le terme cinétique. Des termes quadri-fermioniques vont aussi intervenir, chacun correspondant à un processus de diffusion à 2 fermions bien précis. Parmi tous ces termes, certains sont non oscillants et d'autres sont oscillants (proportionnels à  $(-)^x$ ); ces derniers disparaissent lors de l'intégration sur tout l'espace. L'ensemble de ces termes s'obtient en écrivant :

$$S_n^z S_{n+1}^z = \left( c_n^\dagger c_n - \frac{1}{2} \right) \left( c_{n+1}^\dagger c_{n+1} - \frac{1}{2} \right), \quad (3.23)$$

et en insérant l'Eq. (3.4). Deux termes à 4 fermions correspondent à des processus de diffusion à moment total nul :

$$\begin{aligned} & \psi_L^\dagger(n) \psi_R(n) \psi_R^\dagger(n+1) \psi_L(n+1), \\ & \psi_R^\dagger(n) \psi_L(n) \psi_L^\dagger(n+1) \psi_R(n+1). \end{aligned} \quad (3.24)$$

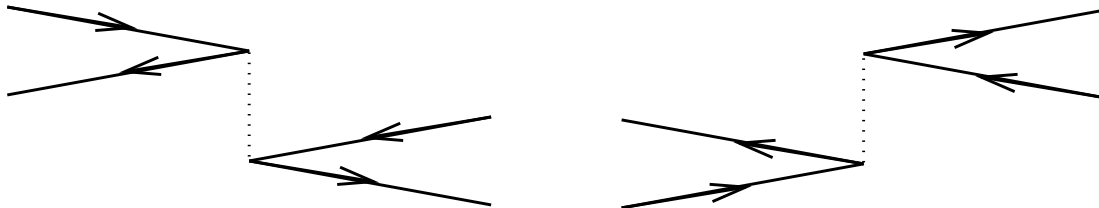


FIG. 3.1 - *Processus de diffusion vers l'avant et vers l'arrière*

Deux autres termes (termes Umklapp) correspondent à des processus de diffusion de moment total  $4k_F$  qui sont autorisés par la symétrie du réseau dans le cas du demi-remplissage ( $k_F = \pi/2$ ) puisqu'alors  $e^{i4k_F} = 1$  :

$$\begin{aligned} & \psi_L^\dagger(n) \psi_R(n) \psi_L^\dagger(n+1) \psi_R(n+1), \\ & \psi_R^\dagger(n) \psi_L(n) \psi_R^\dagger(n+1) \psi_L(n+1). \end{aligned} \quad (3.25)$$



FIG. 3.2 - *Processus de diffusion Umklapp*

Un calcul complet conduit au hamiltonien de sine-Gordon sous forme bosonisée :

$$\mathcal{H}_{XZZ} = \int dx \frac{c}{2} \left[ K \Pi^2 + \frac{1}{K} (\nabla \phi)^2 \right] - \underbrace{\frac{\Delta}{2(\pi\alpha)^2} \cos \sqrt{16\pi} \phi}_{\text{Termes Umklapp}}, \quad (3.26)$$

où  $c$  et  $K$  se calculent au premier ordre en  $\Delta$  :

$$c = 1 + \frac{2\Delta}{\pi} + O(\Delta^2) \quad \text{et} \quad K = 1 - \frac{2\Delta}{\pi} + O(\Delta^2). \quad (3.27)$$

Le groupe de renormalisation est le bon cadre conceptuel pour étudier les propriétés critiques de ce système. Les équations de flot peuvent s'obtenir par des méthodes de gaz de Coulomb ou des méthodes de théories conformes perturbées (voir Appendice A). En appelant  $g$  le coefficient devant le terme en cosinus, il vient :

$$\begin{aligned}\frac{dK}{dl} &= -\pi g^2 K^2, \\ \frac{dg}{dl} &= (2 - 4K)g.\end{aligned}\tag{3.28}$$

Ces équations sont celles du flot de Kosterlitz-Thouless, représenté dans la figure suivante :

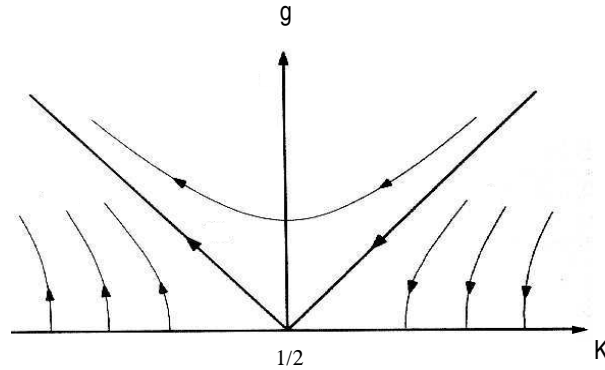


FIG. 3.3 - Flot de renormalisation du modèle de sine-Gordon.

Lorsque  $\Delta = 1$ , on est sur la séparatrice du flot. Le système a deux phases : la première correspond au régime où l'opérateur  $\cos \sqrt{16\pi}\phi$  est non pertinent ; il s'agit d'une phase sans gap où, au point fixe, le modèle est décrit par la même théorie que le modèle XY, les fonctions de corrélation étant algébriques, mais avec des exposants différents, dépendant de  $K^*$ , valeur de  $K$  au point fixe. L'autre phase correspond à une perturbation pertinente. On échappe au régime perturbatif et le système minimise son énergie en donnant une valeur moyenne dans le vide à l'opérateur pertinent  $\langle \cos \sqrt{16\pi}\phi \rangle = 1$ , et donc  $\langle \phi \rangle = 0$ . Mais alors  $\langle S^z \rangle \propto (-)^x$ , on est donc dans la phase de Néel et le système s'ordonne antiferromagnétiquement. L'échelle à laquelle  $\Delta$  devient d'ordre 1 est interprétée comme une longueur de corrélation  $\xi \sim \exp(-1/\sqrt{\Delta-1})$ , inversement proportionnelle au gap qui s'ouvre entre le fondamental et le premier état excité. Le diagramme de phase de la chaîne anisotrope de spins 1/2 est représenté dans la figure (3.4) :

On peut épiloguer longtemps sur ce diagramme de phase, mais nous allons nous limiter au strict minimum. Pour  $\Delta \in ]-1, 1[$ , l'opérateur  $\cos \sqrt{16\pi}\phi$  est non pertinent, la théorie



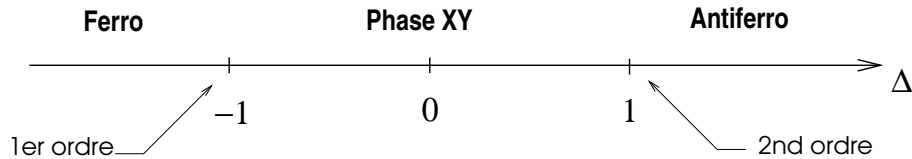


FIG. 3.4 - Diagramme de phase de la chaîne de spins 1/2 anisotrope.

est critique (invariante conforme). Au point isotrope de Heisenberg ( $\Delta = 1$ ), cet opérateur est marginalement non pertinent. Là encore les corrélations de spin décroissent en loi de puissance (la longueur de corrélation est infinie), mais loin du point fixe, l'opérateur marginal introduit une correction logarithmique au comportement d'échelle. Dans toute cette gamme du paramètre  $\Delta$ , les corrélations décroissent beaucoup plus lentement que des exponentielles, il y a une sorte de persistance spatiale dans le système. On parle de quasi ordre à longue portée. Pour toute la phase XY, le système est intégrable par l'ansatz de Bethe qui fournit la valeur exacte de  $K^*$  en fonction de l'anisotropie  $\Delta$  :

$$\frac{1}{2K^*} = 1 - \frac{\arccos \Delta}{\pi}. \quad (3.29)$$

Pour  $\Delta > 1$ , cet opérateur est pertinent ; on s'éloigne du point fixe critique pour aller vers une phase avec un gap  $\sim \Delta^{\frac{1}{2-4K}}$ . A la transition de phase, la longueur de corrélation diverge plus vite que n'importe quelle loi de puissance ( $\nu = \infty$ ) :

$$\xi \sim \exp(1/\sqrt{1/2 - K}). \quad (3.30)$$

Pour  $\Delta = -1$ , la vitesse  $c$  des fermions de Jordan-Wigner est nulle. On n'a plus d'écriture sous forme de théorie des champs pour le système. On peut prouver que l'état classique ferromagnétique est le fondamental exact du hamiltonien, pour tout  $\Delta \leq -1$ . L'échec d'une formulation de théorie des champs pour  $\Delta = -1$  est dû à une transition de phase du premier ordre dont le paramètre d'ordre est l'aimantation du système.

### 3.3 la chaîne S=1/2 en champ magnétique aléatoire

Le désordre introduit dans les systèmes magnétiques est généralement un désordre *gelé*, c'est à dire que les couplages additionnels sont des variables aléatoires dans l'espace

et constantes dans le temps. C'est en effet un tel type de désordre qui apparaît dans les vrais matériaux. Les temps de relaxation sont très grands devant les temps de relaxation magnétiques, si bien que l'on considère le désordre gelé.

Nous n'allons pas présenter ici une étude complète des chaînes de spins 1/2 désordonnées. Il s'agit plutôt d'un prétexte pour introduire, par un exemple, la méthode de développement de produits d'opérateurs (OPE, voir [30]) pour calculer les équations du groupe de renormalisation à une boucle. Cette méthode possède de nombreux avantages par rapport aux méthodes plus anciennes de gaz de Coulomb utilisées jusqu'alors. L'OPE, outre son élégance naturelle permet de faire un véritable inventaire des opérateurs engendrés par renormalisation à l'ordre d'une boucle, en regardant simplement les singularités produites en réalisant le produit de deux opérateurs évalués en deux points infiniment proches. Ces sont ces singularités qui vont contribuer au groupe de renormalisation. Nous renvoyons à l'appendice A pour le détail technique de la méthode.

Le cas désordonné nécessite une étape intermédiaire afin de moyennner correctement le désordre. Si l'on suppose que les interactions restent à courte portée, la moyenne sur le désordre  $\overline{\ln Z}$  du logarithme de la fonction de partition fournit un bon estimateur de l'énergie libre moyenne du système. Pour calculer cette grandeur, l'astuce consiste à prendre  $n \in \mathbb{N}$  répliques du système avec la même configuration du désordre ([31]). Un petit effort d'abstraction en admettant que le prolongement analytique  $n \rightarrow 0$  conserve la physique du problème, et on constate que :

$$\overline{\ln Z} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\overline{Z^n} - 1}{n}. \quad (3.31)$$

Pour un désordre gaussien, on a ainsi transformé le calcul d'une espérance compliquée en une simple intégrale gaussienne.

Dans l'exemple du champ magnétique aléatoire, le hamiltonien accueille un terme supplémentaire :

$$\mathcal{H}_{Dés} = \sum_i h_i S_i^z, \quad (3.32)$$

où  $h_i$  est le champ magnétique local (et aléatoire) au site  $i$  dirigé suivant la direction de l'axe  $z$ . Mathématiquement, les  $h_i$  sont des variables aléatoires gaussiennes centrées

décorrélées de site à site :

$$\overline{h_i h_j} = \mathcal{D} \delta_{ij}. \quad (3.33)$$

C'est la variance  $\mathcal{D}$  qui mesure la force du désordre. Il est alors facile de bosoniser ce terme de désordre puisqu'on dispose des écritures bosonisées des opérateurs de spin, chacun ayant une contribution uniforme à  $k = 0$  et une contribution alternée à  $k = \pi$ . On se doit d'introduire deux champs aléatoires gaussiens  $\eta(x)$  et  $\xi(x)$  pour ces deux contributions, de sorte que l'écriture bosonisée du terme de champ aléatoire<sup>1</sup> :

$$\mathcal{H}_{\mathcal{D}\varepsilon s} = \int dx \left( -\frac{\eta(x)}{\sqrt{\pi}} \nabla \phi + \xi(x) \cos \sqrt{4\pi} \phi \right), \quad (3.34)$$

où les champs  $\eta$  et  $\xi$  décrivent un désordre non corrélé à la limite continue :

$$\begin{aligned} \overline{\eta(x)\eta(y)} &= \mathcal{D}_\eta \delta(x-y), \\ \overline{\xi(x)\xi(y)} &= \mathcal{D}_\xi \delta(x-y). \end{aligned} \quad (3.35)$$

Lorsqu'on introduit les  $n$  répliques du champ  $\phi$ , notées  $(\phi^i)_{i=1..n}$ , et qu'on calcule  $(\overline{Z^n} - 1)/n$ , cela revient à intégrer les champs de désordre  $\eta$  et  $\xi$ . Il en découle une théorie effective qui ne fait plus intervenir que les variances du désordre, mais, en contre-partie, des couplages entre répliques apparaissent. Dans tout ce qui suit, nous passons en temps imaginaire, et nous obtenons alors dans le formalisme fonctionnel :

$$\begin{aligned} \overline{Z^n} &= \int D\eta D\xi \prod_{i=1}^n D\phi^i e^{\left[ -\mathcal{D}_\eta^{-1} \int |\eta|^2 - \mathcal{D}_\xi^{-1} \int |\xi|^2 - \sum_i S_{XXZ}^{(i)} - f \eta \sum_i \mathcal{O}_1^{(i)} - f \xi \sum_i \mathcal{O}_2^{(i)} \right]}, \\ &= \int \prod_{i=1}^n D\phi^i e^{-S_{eff}}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

où l'action effective du modèle s'écrit :

$$\begin{aligned} S_{eff} &= \sum_i S_{XXZ}^{(i)} - \mathcal{D}_\eta \int dx d\tau d\tau' \sum_{ij} \mathcal{O}_1^{(i)}(x, \tau) \mathcal{O}_1^{(j)}(x, \tau') \\ &\quad - \mathcal{D}_\xi \int dx d\tau d\tau' \sum_{ij} \mathcal{O}_2^{(i)}(x, \tau) \mathcal{O}_2^{(j)}(x, \tau'), \end{aligned} \quad (3.37)$$

---

1.  $\xi(x)$  et  $(-)^x \xi(x)$  sont deux champs aléatoires de mêmes caractéristiques.

avec :

$$\begin{aligned}
S_{XXZ}^{(i)} &= \int dx d\tau \left[ \frac{1}{2K} (\partial_\mu \phi^i)^2 - g \cos \sqrt{16\pi} \phi^i \right], \\
\mathcal{O}_1^{(i)}(x, \tau) &= -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_x \phi^i, \\
\mathcal{O}_2^{(i)}(x, \tau) &= \cos \sqrt{4\pi} \phi^i.
\end{aligned} \tag{3.38}$$

L'intégrale gaussienne sur les champs  $\eta$  et  $\xi$  conduit à des termes entre répliques qui sont non locaux dans le temps à cause du désordre corrélé dans le temps  $\tau$ . De tels opérateurs brisent l'invariance de Lorentz qui était présente dans le modèle de la chaîne pure. Cela implique que de nombreux opérateurs sont engendrés par le groupe de renormalisation. A l'ordre le plus bas de la théorie des perturbations (uniquement), on peut cependant montrer qu'il suffit de rajouter deux opérateurs à la théorie nue pour fermer la procédure de renormalisation et assurer sa cohérence. Ces deux termes venant s'ajouter à l'action sont :

$$\begin{aligned}
S_1 &= -\mathcal{D}_1 \int dx d\tau d\tau' \sum_{ij} \partial_\tau \phi^i(x, \tau) \partial_\tau \phi^j(x, \tau'), \\
S_2 &= -\mathcal{D}_2 \int dx d\tau d\tau' \sum_{ij} \partial_z \phi^i(x, \tau) \partial_{\bar{z}} \phi^j(x, \tau').
\end{aligned} \tag{3.39}$$

Nous avons introduit ici une notation complexe (voir appendice A).

Le gros avantage de la méthode d'OPE est que l'on peut garder le nombre de répliques  $n$  arbitraire, alors que le gaz de Coulomb oblige à prendre  $n = 1$  pour que les calculs soient réalisables. Ceci constitue d'autant plus un progrès, que l'on peut calculer les fonctions  $\beta$  à une boucle exactement, ce qui permet de mieux gérer la compétition entre désordre et interactions lorsqu'ils sont tous deux pertinents. Un problème technique à surmonter avant de réaliser ce programme est que l'OPE concerne généralement des opérateurs locaux, ce qui n'est pas le cas ici ! L'appendice A explique comment on garde des traces de la non localité pour le calcul des fonctions  $\beta$ . Dans la limite  $n \rightarrow 0$ , on obtient les équations de flot suivantes :

$$\begin{aligned}
\frac{dg}{dl} &= (2 - 4K)g - \frac{4\mathcal{D}_\eta K^2}{\pi^2}g, \\
\frac{dK}{dl} &= -\pi g^2 K^2 - \frac{1}{4}\mathcal{D}_\xi K^2, \\
\frac{d\mathcal{D}_\eta}{dl} &= \mathcal{D}_\eta + 4\pi^2 f(K)\mathcal{D}_\xi^2, \\
\frac{d\mathcal{D}_\xi}{dl} &= (3 - 2K)\mathcal{D}_\xi,
\end{aligned} \tag{3.40}$$

où  $f(K) = \left[ \frac{\Gamma(K-1/2)}{\Gamma(K)} \right]^2$ .

Si le désordre est nul, on réobtient bien les équations du cas pur. Considérons la phase antiferromagnétique où l'opérateur  $\cos \sqrt{16\pi}\phi$  est pertinent, c'est à dire  $K < 1/2$ . Dans ce cas, le développement perturbatif perd sa respectabilité, mais si l'on admet qu'il reste valable lorsqu'on se rapproche du point singulier  $K = 1/2$ , on peut en tirer des vérités qualitatives. Le désordre peut changer radicalement ce comportement. Si le désordre intervenant dans l'équation de  $g$  tend suffisamment vite vers l'infini, il peut conduire le couplage  $g$  vers de petites valeurs. Lorsque  $K$  s'approche de  $1/2$ ,  $\mathcal{D}_\eta$  devient grand car la fonction  $f(K)$  devient singulière. Par conséquent, la dimension anormale du couplage  $g$  devient négative, même pour un désordre initial infiniment faible. Un tel comportement a été mis en évidence pour le modèle de Hubbard par Fujimoto et Kawakami ([39]). Ainsi, dans la région antiferromagnétique, l'opérateur umklapp est non pertinent et le désordre est pertinent ; on interprète cela par la disparition du gap et de l'ordre AF, cette phase n'étant pas stable sous faible désordre.

Cette conclusion est la même que celle fournie par l'argument énergétique d'Imry-Ma ([40]), mais on l'a obtenue grâce à un argument "quantique" de groupe de renormalisation. L'argument d'Imry-Ma est le suivant. En dimension  $d$ , la scission d'un système magnétique en différents domaines de taille caractéristique  $L$  coute une énergie  $L^{d-2}$ . Dès lors, en dimension inférieure ou égale à 2, le système a intérêt à former des domaines aussi grands que possibles ; c'est le résultat de Mermin-Wagner qui interdit la présence d'un ordre à longue portée en basse dimension à  $T > 0$ . Pour un champ désordonné, les fluctuations sont telles que  $\langle (\Delta h)^2 \rangle \sim L^d$ , et donc en créant des domaines de taille  $L$  le système gagne une énergie de l'ordre de  $L^{d/2}$  et perd une énergie de surface en  $L^{d-2}$ . Ainsi, en dimension  $d \leq 4$  il est énergétiquement favorable de former des domaines : la phase est instable sous

faible désordre.

La phase XY a elle aussi un comportement spectaculaire. Puisque la fonction  $f(K)$  est régulière dans tout ce domaine (pour  $K \geq 1/2$ ), les équations de flot à l'ordre le plus bas vont reproduire le bon comportement du système. Elle s'écrivent :

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dl} &= (2 - 4K)g, \\ \frac{dK}{dl} &= -\pi g^2 K^2, \\ \frac{d\mathcal{D}_\xi}{dl} &= (3 - 2K)\mathcal{D}_\xi. \end{aligned} \tag{3.41}$$

Pour tout  $K > 1/2$ ,  $g \rightarrow 0$  et donc l'interaction est non pertinente, mais suivant la valeur de  $K$ , le désordre sera ou ne sera pas pertinent. Pour  $K > 3/2$ , le désordre sera pertinent et la phase XY désordonnée pour un désordre infiniment petit. Inversement, pour  $K < 3/2$ , la phase XY est stable sous faible désordre. En vertu de l'Eq. (3.29), la valeur critique de  $K = 3/2$  correspond à  $\Delta = -1/2$ ; ceci est l'argument du critère de Harris. Le diagramme de phase sous faible désordre de la chaîne de spins  $1/2$  est schématisé dans la figure ci-dessous :

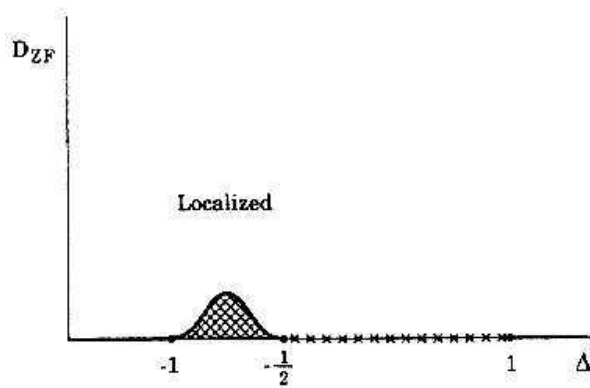


FIG. 3.5 - Diagramme de phase de la chaîne de spins  $1/2$  anisotrope en champ magnétique aléatoire.

Il est possible d'introduire toutes sortes de termes de désordre supplémentaires : champ magnétique aléatoire dans le plan XY, couplage aléatoire XY brisant et/ou ne brisant pas la symétrie XY, couplage aléatoire suivant l'axe z. Pour chacun de ces types de désordre,

une perturbation en terme de théorie des champs est introduite, comprenant un terme à  $k = 0$  et un terme à  $k = \pi$ . Ces opérateurs peuvent se bosoniser de la façon habituelle, mais nous ferons les calculs explicites directement dans le cas de la chaîne de spin 1 (le cas de la chaîne de spin 1/2 ayant été traité par Doty et Fisher dans [26]).

Pour clore cette discussion, je voudrais mettre en exergue la différence de comportement des systèmes désordonnés suivant que le désordre brise ou ne brise pas la symétrie XY. On peut montrer de façon générale que dans le cas d'un désordre brisant la symétrie XY, le groupe de renormalisation engendre des opérateurs (de désordre eux aussi) respectant la symétrie XY. Ceci est le cas pour la chaîne de spin 1/2, mais aussi pour les échelles de spin, la chaîne de spin 1 etc... Ainsi, de façon générique, les systèmes 1D seront moins stables si le désordre brise la symétrie XY ([41])

### 3.4 Le fort désordre

De nombreuses études numériques ont été menées sur la chaîne de spin 1/2 désordonnée. L'étude la plus marquante utilise le groupe de renormalisation dans l'espace réel et s'applique au désordre de liens, dans la limite de fort désordre. Cette méthode, initialement développée par Ma et Dasgupta ([29]), a été reprise en grand détail par Fisher ([28]), qui a réussi à décrire la phase désordonnée de la chaîne de spins 1/2.

Dans ce paragraphe, nous considérons un désordre de liens dans la chaîne antiferro avec le hamiltonien :

$$\mathcal{H} = \sum_i J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \quad (3.42)$$

où les  $J_i$  sont les couplages aléatoires plus proches voisins suivant la distribution  $P(J)$  supposée large. La méthode de Ma et Dasgupta consiste premièrement à trouver le lien le plus fort, qu'on appelle  $J_2$ . Si la distribution est large, les deux liens voisins sont typiquement beaucoup plus faibles que celui-ci. Le hamiltonien des 4 spins impliqués est :

$$\mathcal{H} = J_1 \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + J_2 \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + J_3 \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4. \quad (3.43)$$

Au deuxième ordre de la théorie des perturbations, il apparaît un couplage effectif entre

les spins  $\mathbf{S}_1$  et  $\mathbf{S}_4$  avec un couplage :

$$J'_1 = \frac{J_1 J_3}{2J_2}. \quad (3.44)$$

Si le couplage  $J_2$  est très grand,  $J'_1$  est très petit, et donc, la distribution des liens se rétrécit au fur et à mesure que l'échelle du système s'accroît. On itère cette procédure de décimation jusqu'à l'échelle d'énergie souhaitée. L'état fondamental, nommé singulet aléatoire, consiste à coupler les spins en singulets sur n'importe quelle échelle de longueur. La technique dans l'espace direct consiste à écrire une équation de flot pour la distribution du désordre  $P(J, \Omega)$  qui dépend de la force des liens  $J$  et de l'échelle d'énergie  $\Omega$ . Si on abaisse cette échelle d'énergie de  $\delta\Omega$  en maintenant  $\Omega > J$ , on trouve l'équation de flot à l'ordre le plus bas :

$$-\frac{dP(J, \Omega)}{d\Omega} = P(\Omega, \Omega) \int_0^\Omega dJ_1 P(J_1, \Omega) \int_0^\Omega dJ_2 P(J_2, \Omega) \delta(J - \frac{J_1 J_2}{2\Omega}). \quad (3.45)$$

Une des solutions de cette équation de flot est donnée par :

$$P(J, \Omega) = \frac{\alpha(\Omega)}{J} \left( \frac{J}{\Omega} \right)^{\alpha(\Omega)}, \quad (3.46)$$

avec  $\alpha(\Omega) \sim 1/\ln(\Omega_0/\Omega)$  et  $\Omega_0$  est l'échelle de départ. Ainsi,  $\alpha$  décroît lorsque l'échelle d'énergie décroît, et donc la distribution s'élargit à basse température. On peut alors calculer la densité de spins libres à température  $T$  :  $\rho(T) = \int_0^T dJ P(J)$ , et en déduire les propriétés thermodynamiques et magnétiques de la phase singulet aléatoire. En particulier on trouve une divergence de la susceptibilité magnétique par spin en  $\chi(T) \propto 1/(T \ln^2 T)$ .

Ce raisonnement est en accord avec les résultats de la bosonisation car, au point de Heisenberg, un faible couplage aléatoire conduit le système vers une phase désordonnée.



# Chapitre 4

## La chaîne de spins 1 désordonnée

### 4.1 La chaîne S=1 pure

Nous nous intéressons à la chaîne de Heisenberg de spins 1 anisotrope antiferromagnétique, dont le hamiltonien est donné par :

$$\mathcal{H} = \sum_i S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z + D(S_i^z)^2. \quad (4.1)$$

Les  $S_i^\alpha$  sont les opérateurs de spin quantiques,  $\Delta$  est l'échange anisotrope, et  $D$  est un couplage anisotrope favorisant les états de spin singulets. Le diagramme de phase dans l'espace des paramètres  $\Delta$  et  $D$  est bien connu ([32]). Il y a deux phases magnétiquement ordonnées : une phase ferromagnétique (F) pour  $\Delta$  grand et négatif et une phase antiferromagnétique (AF) pour  $\Delta$  grand et positif. Dans le régime intermédiaire, sur un voisinage fini du point isotrope, on trouve la phase de Haldane (H) qui présente un ordre caché non local à longue portée dont la particularité est de ne pas briser les invariances par translation et par rotation. Il y a aussi deux phases critiques de type XY (XY1 et XY2), qui diffèrent seulement par les exposants des fonctions de corrélation. Enfin, pour  $D$  grand, on obtient une phase non magnétique appelée phase à grand D (D).

Ce diagramme de phase peut être obtenu de façon qualitativement correcte par la méthode de bosonisation. Le point de départ pour bosoniser un modèle de spins 1 consiste à écrire chaque opérateur de spin 1 comme la somme de deux opérateurs de spin 1/2 :

$$S_i^\alpha = \sigma_i^\alpha + \tau_i^\alpha. \quad (4.2)$$

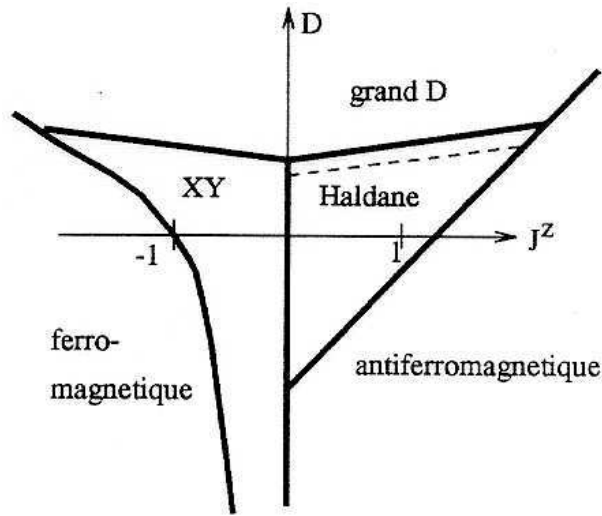


FIG. 4.1 - Diagramme de phase numérique de la chaîne de spins 1.

Cette approximation (proposée par Timonen et Luther [42]) contient au moins toute la physique de la chaîne de spins 1 car les états propres de la chaîne de spins 1 sont aussi états propres du hamiltonien où on a remplacé les opérateurs de spin 1 par la relation (4.2). Elle est aussi justifiée *a posteriori* par l'accord qualitatif avec les résultats numériques et expérimentaux. La transformation de Jordan-Wigner sur les deux variétés de spins introduit deux saveurs de fermions sans spin, notées  $c$  et  $d$ . Le hamiltonien se transforme donc en un hamiltonien de fermions  $c$  et  $d$  en interaction. A la limite continue, on bosonise chaque saveur de fermion par l'introduction de deux champs bosoniques  $\phi_c$  et  $\phi_d$  en interaction ([43]). Une rotation dans l'espace interne de ces deux champs permet d'obtenir une théorie bosonique comprenant deux secteurs découplés (un secteur "acoustique" et un secteur "optique") dont les excitations sont décrites par les champs :

$$\phi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_c + \phi_d) \quad \text{et} \quad \phi_o = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_c - \phi_d). \quad (4.3)$$

Le hamiltonien bosonisé s'écrit :  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_a + \mathcal{H}_o$ , où :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_a &= \frac{v_a}{2} \left[ K_a(\Pi_a^2) + \frac{1}{K_a}(\nabla\phi_a)^2 \right] + \frac{g_1}{(\pi\alpha)^2} \cos(\sqrt{8\pi}\phi_a), \\ \mathcal{H}_o &= \frac{v_o}{2} \left[ K_o(\Pi_o^2) + \frac{1}{K_o}(\nabla\phi_o)^2 \right] + \frac{g_2}{(\pi\alpha)^2} \cos(\sqrt{8\pi}\phi_o) + \frac{g_3}{(\pi\alpha)^2} \cos(\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_o). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Les couplages, les vitesses et les paramètres  $K_a$  et  $K_o$  sont tous calculables au premier ordre en  $\Delta$  et  $D$  mais il n'existe pas de formule exacte pour  $K_{a,o}(\Delta, D)$ . On a  $g_1 = g_2 =$

$D - \Delta$ ,  $g_3 = -1$  et :

$$v_a = 1 + \frac{3\Delta + D}{\pi}, \quad v_o = 1 + \frac{\Delta - D}{\pi}, \quad K_a = 1 - \frac{3\Delta + D}{\pi}, \quad K_o = 1 - \frac{\Delta - D}{\pi}. \quad (4.5)$$

Strictement parlant, les secteurs  $a$  et  $o$  sont couplés, mais les termes correspondants sont moins pertinents que ceux des équations (4.4) et ont été omis.

La physique du secteur  $a$  est bien connue, et elle est similaire à celle de la chaîne de spins  $1/2$ . La physique du secteur  $o$  est en revanche bien moins claire. La présence de l'opérateur  $\cos(\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_o)$  (qui est non local en terme du champ  $\phi_o$ ) a néanmoins une interprétation en terme de gaz de Coulomb : il s'agit d'une théorie avec charges électriques et magnétiques. Den Nijs ([44]) a montré qu'il existait une transition de phase de type Ising dans le modèle XY avec anisotropie Ising, dont la théorie effective en terme de gaz de Coulomb est la même que pour le secteur  $o$ . On suppose donc la présence d'une transition Ising pour le secteur  $o$ . Cette transition entre deux phases massives a lieu pour  $K_o^* = 1/2$ , valeur de  $K_o$  au point fixe pour laquelle les opérateurs  $\cos(\sqrt{8\pi}\phi_o)$  et  $\cos(\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_o)$  ont la même dimension d'échelle. Pour  $K_o^* < 1/2$ ,  $\cos(\sqrt{8\pi}\phi_o)$  est l'opérateur le plus pertinent et le champ  $\phi_o$  se condense ; pour  $K_o^* > 1/2$ , c'est  $\cos(\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_o)$  le plus pertinent et le champ  $\tilde{\phi}_o$  se condense.

C'est en regardant de près les opérateurs pertinents de la théorie effective et en donnant une interprétation physique qu'on identifie les différentes phases de la chaîne de spins  $1$ . Ainsi, dans la phase AF les champs  $\phi_a$  et  $\phi_o$  ont une valeur moyenne. L'opérateur de spin  $S^z(x) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\nabla\phi_a + \frac{(-)^x}{\pi\alpha}\cos\sqrt{2\pi}\phi_a\cos\sqrt{2\pi}\phi_o$  a pour valeur moyenne :

$$\langle S^z(x) \rangle \propto (-)^x, \quad (4.6)$$

ce qui correspond bien à l'ordre de Néel. Dans les phases H et D,  $\phi_a$  et  $\tilde{\phi}_o$  sont condensés. L'argument valable pour la phase AF plaide en faveur d'un fondamental non aimanté. La différence entre les phases H et D vient du seul signe du couplage devant l'opérateur  $\cos(\sqrt{8\pi}\phi_a)$  qui, par minimisation de l'énergie ne fait pas condenser le champ  $\phi_a$  aux mêmes valeurs moyennes. Quand ce couplage vaut exactement  $0$ , le secteur  $a$  est sans masse et on se trouve sur une ligne critique du diagramme de phase.

Pour des valeurs suffisamment grandes de  $K_a$ , le secteur  $a$  devient critique et la transition de phase Ising présente dans le secteur  $o$  sépare le diagramme de phase en

deux régions appelées respectivement XY1 lorsque  $\tilde{\phi}_o$  se condense et XY2 lorsque  $\phi_o$  se condense. La phase F, quant à elle, se trouve hors de portée de la théorie des champs, pour les mêmes raisons que pour la chaîne de spins 1/2. Tous ces résultats sont reportés dans le tableau ci-dessous.

	AF	Haldane	large-D	XY1	XY2
$\langle \phi_a \rangle$	0	0	$\pi/\sqrt{8}$	dis	dis
$\langle \phi_o \rangle$	0	dis	dis	dis	0
$\langle \tilde{\phi}_o \rangle$	dis	0	0	0	dis
$K_a^*$	0	0	0	$> 1$	$> 1$
$K_o^*$	0	$\infty$	$\infty$	$\infty$	0

TAB. 4.1 - Valeur des paramètres caractérisant les différentes phases de la chaîne anisotrope de spin 1.

Les valeurs de  $K_a$  et  $K_o$  ne sont connues qu'au premier ordre en  $\Delta$  et  $D$ , si bien que les frontières de phases qu'on obtient sont seulement des droites, modifiant ainsi la géométrie du diagramme de phase. Par exemple, il a été prouvé numériquement que des points tricritiques étaient présents dans le diagramme de phase, notamment à l'intersection des phases AF, H et D. Toutefois, pour de faibles valeurs des paramètres d'anisotropie, la bosonisation prédit correctement l'aspect qualitatif du diagramme de phase.

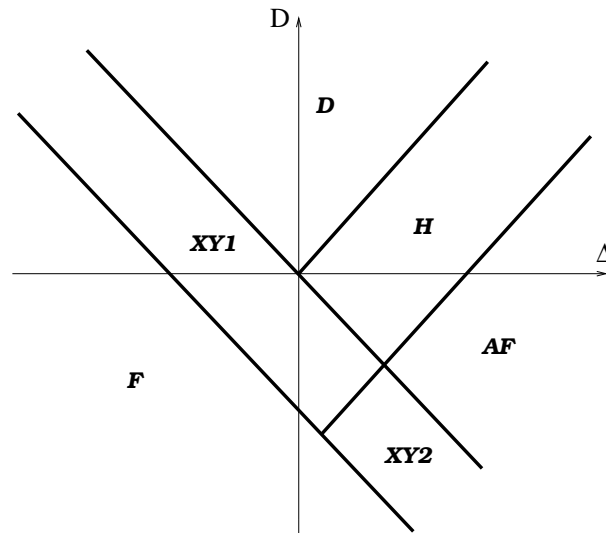


FIG. 4.2 - Diagramme de phase de la chaîne de spins 1 par la bosonisation.

## 4.2 Le faible désordre

Dans le cas du faible désordre, la méthode de bosonisation fournit une théorie effective du système. Nous donnons dans ce paragraphe les opérateurs qui doivent être ajoutés à la théorie bosonique pour décrire le désordre, et, comme dans le cas de la chaîne de spins 1/2, nous allons considérer plusieurs types de désordre.

Si on considère en premier lieu un champ magnétique aléatoire, on ajoute au hamiltonien un terme supplémentaire :

$$\mathcal{H}_{ZF} = \sum_i h_i S_i^z, \quad (4.7)$$

où le champ magnétique local est une variable aléatoire gaussienne centrée, non corrélée dans l'espace :

$$\overline{h_i h_j} = \mathcal{D}_{ZF} \delta_{ij}. \quad (4.8)$$

Les notations sont identiques à celles prises pour la chaîne de spin 1/2, et nous ferons de même pour tous les autres types de désordre, qui suivent tous les mêmes lois de probabilité, et, à chacun d'eux, est associée une variance.

Un deuxième type de désordre respectant la symétrie de rotation autour de l'axe z (appelée symétrie XY) est l'échange planaire aléatoire, qui ajoute le terme suivant au hamiltonien :

$$\mathcal{H}_{PE} = \sum_i J_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) \quad (4.9)$$

Les deux types de désordre suivants brisent la symétrie XY ; il s'agit premièrement du champ magnétique dans le plan XY :

$$\mathcal{H}_{PF} = \sum_i (h_i^x S_i^x + h_i^y S_i^y), \quad (4.10)$$

et du couplage aléatoire planaire anisotrope :

$$\mathcal{H}_{PA} = \sum_i \gamma_i (S_i^x S_{i+1}^x - S_i^y S_{i+1}^y) \quad (4.11)$$

Tout le problème consiste à présent à bosoniser ces opérateurs ([26]). A chaque opérateur de spin correspond deux opérateurs bosoniques, l'un à  $k = 0$ , l'autre à  $k = \pi$ . Pour chacune de ces deux composantes, il se peut que nous ayons plusieurs termes bosoniques : seul le plus pertinent sera conservé. A la limite continue, la forme bosonisée de l'opérateur  $S^z$  est donnée par :

$$S^z = -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\partial_x\phi_a + \frac{(-)^x}{\pi\alpha}\cos\sqrt{2\pi}\phi_a\cos\sqrt{2\pi}\phi_o. \quad (4.12)$$

Cette expression insérée dans celle de  $\mathcal{H}_{ZF}$ , on obtient les deux composantes à  $k = 0$  et à  $k = \pi$  :

$$\mathcal{H}_{ZF} = \int dx h^{q\approx 0}(x)\mathcal{O}_1(x,t) + h^{q\approx\pi}(x)\mathcal{O}_2(x,t), \quad (4.13)$$

avec :

$$\mathcal{O}_1 = -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\partial_x\phi_a(x,t) \quad \text{et} \quad \mathcal{O}_2 = \cos(\sqrt{2\pi}\phi_a)\cos(\sqrt{2\pi}\phi_o). \quad (4.14)$$

De même, en remplaçant sèchement la version bosonisée des opérateurs de spin  $S^+$  et  $S^-$  en fonction des champs  $\phi_a$  et  $\phi_o$ , on trouve les composantes à  $k = 0$  et  $k = \pi$  de l'opérateur de désordre de type PF. On obtient :

$$\mathcal{H}_{PF} = \int dx h^{q\approx 0}(x)\mathcal{O}_1(x,t) + h^{q\approx\pi}(x)\mathcal{O}_2(x,t), \quad (4.15)$$

avec :

$$\mathcal{O}_1 = \cos(\sqrt{\pi/2}\tilde{\phi}_a)\cos(\sqrt{\pi/2}\tilde{\phi}_o). \quad \text{et} \quad \mathcal{O}_2 = \cos(\sqrt{2\pi}\phi_a)\cos(\sqrt{2\pi}\phi_o). \quad (4.16)$$

Il est à noter que l'opérateur de désordre à  $k = \pi$  n'est pas l'opérateur nu, issu de la bosonisation simple du terme de désordre ; il se trouve qu'à l'ordre suivant en perturbation, le terme engendré par le couplage des terme à  $k = 0$  et  $k = \pi$  est plus pertinent que le terme à  $k = \pi$  nu. Ceci nous conduit à oublier le terme nu à  $k = \pi$  et à ne considérer que  $\cos(\sqrt{2\pi}\phi_a)\cos(\sqrt{2\pi}\phi_o)$ .

Pour le désordre PE, à  $k = \pi$ , on trouve le même terme que pour le désordre ZF, mais, à  $k = 0$ , le terme dominant provient des termes  $\sigma\tau$  lorsqu'on remplace les opérateurs de spin en terme des opérateurs de spin 1/2  $\sigma$  et  $\tau$ .

$$\mathcal{H}_{PE} = \int dx h^{q\approx 0}(x)\mathcal{O}_1(x,t) + h^{q\approx\pi}(x)\mathcal{O}_2(x,t), \quad (4.17)$$

avec :

$$\mathcal{O}_1 = \cos(\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_0) \quad \text{et} \quad \mathcal{O}_2 = \cos(\sqrt{2\pi}\phi_a) \cos(\sqrt{2\pi}\phi_o). \quad (4.18)$$

Enfin, pour le désordre PA, le terme à  $k = 0$  provient encore des termes de la forme  $\sigma\tau$ , et les termes à  $k = \pi$  ne sont, comme dans le cas PF, pas issu de la forme bosonisée nue, mais sont engendrés par renormalisation à partir des composantes nues à  $k = 0$  et à  $k = \pi$  du désordre. On trouve :

$$\mathcal{H}_{PA} = \int dx h^{q \approx 0}(x) \mathcal{O}_1(x, t) + h^{q \approx \pi}(x) \mathcal{O}_2(x, t), \quad (4.19)$$

avec :

$$\mathcal{O}_1 = \cos(\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_a) \quad \text{et} \quad \mathcal{O}_2 = \cos(\sqrt{2\pi}\phi_a) \cos(\sqrt{2\pi}\phi_o). \quad (4.20)$$

Nous récapitulons ces résultats dans le tableau (4.2) :

	$q = 0$	$q = \pi$
ZF	$\partial_x \phi_a$	$\cos(\sqrt{2\pi}\phi_a) \cos(\sqrt{2\pi}\phi_o)$
PF	$\cos(\sqrt{\pi/2}\tilde{\phi}_a) \cos(\sqrt{\pi/2}\tilde{\phi}_o)$	$\cos(\sqrt{2\pi}\phi_a) \cos(\sqrt{2\pi}\phi_o)$
PE	$\cos(\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_o)$	$\cos(\sqrt{2\pi}\phi_a) \cos(\sqrt{2\pi}\phi_o)$
PA	$\cos(\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_a)$	$\cos(\sqrt{2\pi}\phi_a) \cos(\sqrt{2\pi}\phi_o)$

TAB. 4.2 - *Formule bosonisée des opérateurs de désordre.*

Le désordre gelé se traite par la méthode des répliques : on introduit  $n$  répliques du système  $\phi_a^i$  et  $\phi_o^i$  (où  $i$  est l'indice de réplique) pour un configuration donnée du désordre. L'estimation de l'énergie libre s'effectue en intégrant les champs de désordre, ce qui conduit fatalement à une action effective couplant les différentes répliques entre elles. Les termes de désordre s'écrivent de façon générique :

$$S_{eff}^{Dés} = -\mathcal{D} \int dx d\tau d\tau' \sum_{ij} \mathcal{O}^i(x, \tau) \mathcal{O}^j(x, \tau'), \quad (4.21)$$

où  $\mathcal{D}$  est la variance du champ aléatoire qu'on a intégré,  $i$  et  $j$  sont les indices de répliques. On obtient des formes identiques pour tous les types de désordre, à  $k = 0$  et à  $k = \pi$ . Il est important de remarquer que l'action effective n'est plus locale comme dans le cas

de la chaîne de spins 1/2, à cause du désordre non corrélé sur lequel on a intégré. Dans ce qui suit, nous utiliserons les notations  $ZF^{(0)}$ ,  $ZF^{(\pi)}$  etc... pour désigner les différents termes de désordre, et les variances correspondantes seront notées  $\mathcal{D}_{ZF}^{(0)}$ ,  $\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)}$  etc...

L'opérateur  $ZF^{(0)}$  correspond à un processus de diffusion vers l'avant, et, écrit en langage bosonique peut être réabsorbé par un changement de variable dans l'intégrale fonctionnelle sur le champ  $\phi_a$ . Ceci conduit à des calculs simplifiés lorsque les interactions du secteur  $a$  ne sont plus pertinentes. Dans notre étude, nous conserverons cet opérateur tel quel, parce que lorsqu'il est pertinent, il permet d'argumenter l'annulation du désordre critique dans certaines phases massives.

Une autre remarque est que les opérateurs de désordre à  $k = \pi$  les plus pertinents sont, dans tous les cas, identiques à  $ZF^{(\pi)}$ . Même si cet opérateur n'apparaît pas dans la théorie nue, il est engendré par renormalisation, comme cela a été remarqué par Doty et Fisher. C'est ce qui se passe ici dans les cas PF et PA, alors que cet opérateur est déjà présent dans la théorie nue pour les cas ZF et PE.

Les opérateurs  $PA^{(0)}$  et  $PE^{(0)}$  sont spécifiques à la chaîne de spins 1 et n'apparaissent pas dans l'échelle de spin. Ils proviennent des couplages croisés  $\sigma_i \tau_{i+1}$  lorsqu'on exprime les opérateurs de spin 1 en terme de deux opérateurs de spin 1/2. Dans l'échelle de spin 1/2 l'opérateur analogue est légèrement différent :  $\sigma_i \tau_i$  qui traduit le couplage inter-chaîne.

Les opérateurs de type  $ZF^{(0)}$  brisent l'invariance relativiste de la théorie du système pur. Dès lors, de nombreux opérateurs vont être engendrés par renormalisation, mais on peut montrer que, dans notre cas, seuls trois termes viennent se rajouter à l'action de départ par corrections radiatives, à cet ordre de la théorie des perturbations :

$$\mathcal{S}_{a1} = -\mathcal{D}_{a1} \int dx d\tau d\tau' \sum_{i,j} \partial_\tau \phi_a^i(x, \tau) \partial_\tau \phi_a^j(x, \tau'), \quad (4.22)$$

$$\mathcal{S}_{a2} = -\mathcal{D}_{a2} \int dx d\tau d\tau' \sum_{i,j} \partial_w \phi_a^i(x, \tau) \partial_{\bar{w}} \phi_a^j(x, \tau'), \quad (4.23)$$

$$\mathcal{S}_o = -\mathcal{D}_o \int dx d\tau d\tau' \sum_{i,j} \partial_z \phi_o^i(x, \tau) \partial_{\bar{z}} \phi_o^j(x, \tau'), \quad (4.24)$$

où  $z = x + v_o \tau$ ,  $\bar{z} = x - v_o \tau$ ,  $w = x + v_a \tau$  et  $\bar{w} = x - v_a \tau$ . On appelle ces opérateurs  $a1$ ,  $a2$  et  $o$  dans la suite.



### 4.3 Equations du groupe de renormalisation

En utilisant les même techniques que pour la chaîne de spins 1/2, on calcule les fonctions beta à une boucle. Dans la limite  $n \rightarrow 0$ , on obtient les équations de flot suivantes pour les termes d'interaction en cosinus :

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dl} &= 2(1 - K_a)y_1 - \frac{1}{8\pi^2}K_a^2y_1(2\mathcal{D}_{ZF}^{(0)} + 2\mathcal{D}_{a1} + \mathcal{D}_{a2}), \\ \frac{dy_2}{dl} &= 2(1 - K_o)y_2 - \frac{1}{8\pi^2}K_o^2\mathcal{D}_oy_2, \\ \frac{dy_3}{dl} &= (2 - \frac{1}{2K_o})y_3 - \frac{1}{32\pi^2}\mathcal{D}_oy_3,\end{aligned}\tag{4.25}$$

avec  $y_1 = g_1/v_a$ ,  $y_{2,3} = g_{2,3}/v_o$ .

A désordre nul, on retrouve bien les équations du cas pur, et c'est heureux ! En l'absence de désordre, la première équation de (4.25) décrit la transition entre une phase massive (pour  $K_a < 1$ ) et une phase sans masse. Le désordre peut modifier ce schéma car il intervient dans cette équation par un terme du second ordre  $-y_1 \times \mathcal{D}_{ZF}^{(0)}$ , comme pour la chaîne de spins 1/2.

On a aussi les équations pour les paramètres  $K_a$  et  $K_o$  :

$$\begin{aligned}\frac{dK_a}{dl} &= -(\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)} + \frac{2}{\pi^2}y_1^2)K_a^2 + \frac{1}{4}\mathcal{D}_{PF}^{(0)} + \mathcal{D}_{PA}^{(0)}, \\ \frac{dK_o}{dl} &= -(\frac{\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)}}{u} + \frac{2}{\pi^2}y_2^2)K_o^2 + (\frac{\mathcal{D}_{PF}^{(0)}}{4u} + \frac{\mathcal{D}_{PE}^{(0)}}{u} + \frac{1}{\pi^2}y_3^2),\end{aligned}\tag{4.26}$$

où  $u = v_o/v_a$ . Pour les termes de désordre qui ne font pas intervenir de gradients, les équations de flot se limitent au terme de dimension d'échelle de l'opérateur considéré :

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)}}{dl} &= (3 - K_a - K_o)\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)}, \\ \frac{d\mathcal{D}_{PF}^{(0)}}{dl} &= (3 - \frac{1}{4K_a} - \frac{1}{4K_o})\mathcal{D}_{PF}^{(0)}, \\ \frac{d\mathcal{D}_{PE}^{(0)}}{dl} &= (3 - \frac{1}{K_o})\mathcal{D}_{PE}^{(0)}, \\ \frac{d\mathcal{D}_{PA}^{(0)}}{dl} &= (3 - \frac{1}{K_a})\mathcal{D}_{PA}^{(0)}.\end{aligned}\tag{4.27}$$

Ces équations permettent une discussion préliminaire immédiate de la stabilité des phases non massives en considérant seulement la pertinence ou la non pertinence des opérateurs

de désordre. Cette simplicité n'est en revanche pas de mise en ce qui concerne les opérateurs  $ZF^{(0)}$ ,  $a1$ ,  $a2$  et  $o$  car ils sont engendrés par de nombreux produits d'opérateurs et mettent bas des équations de flot plus complexes :

$$\begin{aligned}\frac{d\mathcal{D}_{ZF}^{(0)}}{dl} &= \mathcal{D}_{ZF}^{(0)} + \pi\left(\frac{1}{4}f(u)\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)^2} - \frac{1}{8}g(u)\mathcal{D}_{PF}^{(0)^2} - \frac{1}{2}h\mathcal{D}_{PA}^{(0)^2}\right), \\ \frac{d\mathcal{D}_o}{dl} &= \mathcal{D}_o + \pi\left(\frac{1}{4u}f(u)\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)^2} - \frac{1}{8u}g(u)\mathcal{D}_{PF}^{(0)^2} - \frac{1}{2u}k(u)\mathcal{D}_{PE}^{(0)^2}\right),\end{aligned}\quad (4.28)$$

Les équations de  $\mathcal{D}_{a1}$  et  $\mathcal{D}_{a2}$  sont identiques à celle de  $\mathcal{D}_{ZF}^{(0)}$ . Les équations ci-dessus font intervenir des fonctions elliptiques généralisées :

$$\begin{aligned}f(u) &= \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{(1+y^2)^{K_a/2}(1+u^2y^2)^{K_o/2}} \right]^2, & g(u) &= \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{(1+y^2)^{1/8K_a}(1+u^2y^2)^{1/8K_o}} \right]^2, \\ h &= \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{(1+y^2)^{1/2K_a}} \right]^2, & k(u) &= \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{(1+u^2y^2)^{1/2K_o}} \right]^2.\end{aligned}\quad (4.29)$$

Ces fonctions ne sont pas définies pour toutes les valeurs des paramètres  $K_a$  et  $K_o$ . Les intégrales impliquées peuvent être singulières dans certaines régions de l'espace des paramètres  $K_a$  et  $K_o$  (i.e. dans certaines régions du diagramme de phase) et conduisent ainsi à l'instabilité de certaines phases, même massives. Nous verrons plus loin que c'est ce qui se passe dans la phase AF en champ magnétique aléatoire.

## 4.4 Un exemple simple

Avant de nous lancer dans l'étude du diagramme de phase de la chaîne de spins 1, nous allons discuter un modèle simplifié afin d'illustrer la démarche. Considérons l'action effective :

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_{eff} &= \frac{1}{2K} \int dx d\tau (\partial_\mu \phi)^2 + \frac{g}{(\pi\alpha)^2} \int dx d\tau \cos(\sqrt{4\pi a^2} \phi(x, \tau)) - \\ &- \frac{d}{(\pi\alpha)^2} \int dx d\tau d\tau' \cos(\sqrt{4\pi b^2} \check{\phi}(x, \tau)) \cos(\sqrt{4\pi b^2} \check{\phi}(x, \tau')).\end{aligned}\quad (4.30)$$

En posant  $y = g/\pi u$ , et  $D = d\alpha/2\pi u^2$ , où  $u$  est la vitesse, on écrit les équations de flot

pour  $y$ ,  $D$  et  $K$  :

$$\frac{dy}{dl} = (2 - a^2 K)y, \quad (4.31)$$

$$\frac{dD}{dl} = (3 - b^2/K)D, \quad (4.32)$$

$$\frac{dK}{dl} = -y^2 K^2 + D. \quad (4.33)$$

Le flot est représenté sur la figure ci-dessous pour  $(ab)^2 < 6$ . Ici,  $K$  est le paramètre important du problème car il gouverne la pertinence relative de l'interaction et du désordre. Par exemple, si  $K \rightarrow 0$ , l'opérateur de désordre s'avère non pertinent alors que les interactions sont pertinentes. Si le cas pur correspond à un régime où les interactions sont pertinentes, la présence d'un désordre infiniment faible (mais fini) ne va pas modifier ce comportement. La valeur  $K^*$  de  $K$  au point fixe du système pur suffit pour prédire le comportement qualitatif du système sous faible désordre, à cet ordre de la théorie de perturbation. La phase massive va rester stable sous faible désordre. On peut trouver une preuve plus formelle de ce résultat dans l'article 1.

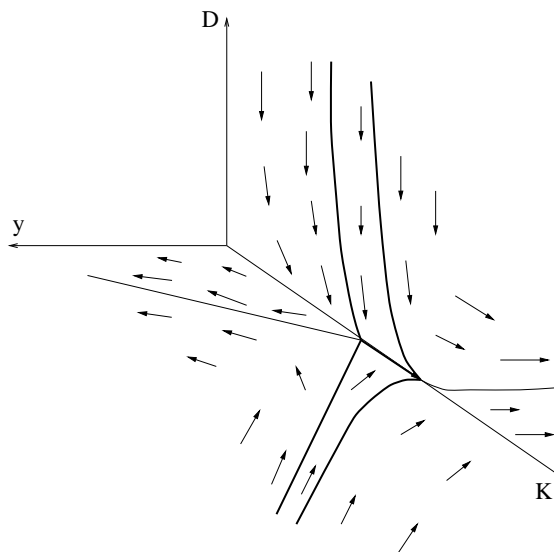


FIG. 4.3 - *Flot du groupe de renormalisation dans le cas  $(ab)^2 < 6$ .*

## 4.5 Diagramme de phase à faible désordre

Dans ce paragraphe, nous discutons l'influence du désordre à partir des équations de flot. Nous commençons par les phases massives avec, puis sans ordre à longue portée; enfin, nous traitons le cas des phases non massives. Tous les résultats sont résumés dans la table (4.5.5)

### 4.5.1 Phase AF

Cette phase est caractérisée par  $K_a^* = K_o^* = 0$ . Pour un tel point fixe, les fonctions apparaissant dans les équations (4.28) prennent les valeurs  $g(u) = h = k(u) = 0$ , alors que  $f(u)$  est singulière. L'opérateur  $ZF^{(\pi)}$  est pertinent dans cette phase, et puisque l'opérateur en cosinus du secteur  $a$  est aussi pertinent, on est dans la situation où interactions et désordre sont tous deux pertinents. Cependant, les termes du second ordre dans les fonctions  $\beta$  permettent une étude plus fine. Lorsque  $K_a(l)$  et  $K_o(l)$  tendent vers des valeurs suffisamment petites, alors  $f$  diverge. En approchant du point singulier,  $\mathcal{D}_{ZF}^{(0)}$  devient arbitrairement grand, même pour des valeurs infiniment petites de  $\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)}(l=0)$  et  $\mathcal{D}_{ZF}^{(0)}(l=0)$ . Dans l'équation de flot de  $y_1$ , le terme  $-y_1 \times \mathcal{D}_{ZF}^{(0)}$  devient si grand que l'interaction  $y_1$  tend vers 0. On en déduit que le gap de Mott de la phase Ising est détruit par un désordre infinitésimal.

Dans le cas du champ magnétique aléatoire, c'est exactement ce qu'on prédit à partir de l'argument d'Imry-Ma. Dans les cas PF et PA, un champ aléatoire dans la direction  $z$  est engendré par le processus de renormalisation, et c'est pourquoi, on prédit aussi la destruction de la phase AF. Le seul problème avec la bosonisation, est qu'on prédit aussi une instabilité de la phase AF sous le désordre PE, ce qui n'est pas prévu par l'argument d'Imry-Ma. Dans ce cas, on s'attend plutôt à la stabilité de la phase.

### 4.5.2 Phases de Haldane et à grand D

Rien ne distingue les phases de Haldane et à grand D dans les équations de flot; seule la valeur moyenne du champ  $\phi_a$  diffère. On s'attend donc à ce qu'elles se comportent de la même manière sous faible désordre. Le point fixe est caractérisé par  $K_a^* = 0$  et  $K_o^* = \infty$ ,

et le champ  $\phi_a$  a une valeur moyenne. La fonction  $f$  est à présent bien définie près du point fixe pur, et, au point fixe  $f(u) = 0$ . Les opérateurs  $ZF^{(\pi)}$ ,  $PF^{(0)}$  et  $PA^{(0)}$  sont non pertinents. Cela implique immédiatement la stabilité de la phase sous le désordre PA. En ce qui concerne les champs magnétiques aléatoires, on constate que  $\mathcal{D}_{ZF}^{(0)}$  se comporte comme  $e^l$ , alors que les termes d'interaction  $y_1$  et  $y_3$  croissent plus vite en  $e^{2l}$ . Il n'y a donc pas de possibilité de destruction de la phase, contrairement au cas de la phase AF ; on a donc stabilité sous ZF et PF.

Le seul cas problématique concerne le désordre PE. L'opérateur  $PE^{(0)}$  est pertinent et la fonction  $k(u)$  est singulière. Cela conduit le couplage  $\mathcal{D}_o$  vers les grandes valeurs négatives. On échappe à la validité de la théorie perturbative. Pour de telles valeurs négatives,  $y_3$  croît beaucoup plus vite que le désordre, comme  $e^{-\mathcal{D}_o l}$ . Ceci est compatible avec la robustesse du gap vis-à-vis le désordre. On s'attend donc à la stabilité sous faible désordre dans ce cas. Ainsi, les deux phases avec gap mais sans ordre à longue portée sont stables, jusqu'à une certaine valeur critique du désordre, qui n'est pas à portée de notre modèle de couplage faible.

### 4.5.3 Phase XY1

Dans cette phase, le secteur  $a$  est sans gap, et l'opérateur  $ZF^{(\pi)}$  est non pertinent près du point fixe pur, donc les instabilités ne peuvent survenir qu'à cause des autres opérateurs de désordre.

- Champ aléatoire suivant  $z$  : l'opérateur de diffusion vers l'avant  $ZF^{(0)}$  peut être réabsorbé par une redéfinition du champ. Le spectre d'excitation est inchangé, et les corrélations sont peu affectées (seuls les exposants changent).
- Champ aléatoire suivant XY : L'opérateur  $PF^{(0)}$  est pertinent. La phase est donc instable. On remarque aussi dans ce cas que la fonction  $g$  est singulière et donc que l'opérateur  $ZF^{(0)}$  est aussi singulier.
- Couplage aléatoire XY : L'opérateur  $PE^{(0)}$  est pertinent, tout comme dans les phases H et D. La même discussion reste valable : la stabilité du secteur  $o$  nous conduit à conclure que la phase XY1 est stable.

- Désordre PA : L'opérateur  $PA^{(0)}$  est pertinent et le secteur  $a$  est sans gap. La phase XY1 est donc instable. L'opérateur conduisant à l'instabilité est différent par rapport au cas de l'échelle de spin 1/2 car il implique les couplages  $\sigma\tau$ , qui n'existent que dans le cas de chaîne de spins 1.

#### 4.5.4 Ligne frontière entre H et D

Cette est caractérisée par  $y_1 = 0$ , donc le champ  $\phi_a$  reste de masse nulle. Il n'y a pas de gap le long de cette ligne dans le secteur  $a$  ; on peut la voir comme une extension de la phase XY1. Néanmoins,  $K_a$  est renormalisé par le désordre et  $K_o$  va à l'infini. Donc, la fonction  $g$  vaut 0 alors que  $h$  est soit fini, soit infini, selon la valeur de  $K_a$ . La discussion de la stabilité est exactement la même que celle de la phase XY1 sauf pour le cas PF. La nouveauté est que  $K_a$  peut être inférieur à 1, mais le secteur  $a$  reste sans masse, donc il y a une ligne de transition dans le plan  $\mathcal{D}_{PF}^{(0)} - K_a$  qui correspond à une valeur critique  $(K_a)_c=1/12$ . Pour  $K_a > (K_a)_c$ , la ligne est instable sous faible désordre PF. La ligne débute à la frontière de la phase XY1 où  $K_a = 1$  et traverse la ligne frontière entre AF et H. On ne sait pas si  $K_a$  atteint la valeur critique de 1/12 avant ou après le point tricritique. On conclut que la ligne est instable sous faible champ dans le plan XY, près de la phase XY1.

#### 4.5.5 Phase XY2

Cette phase est caractérisée par  $K_a^* > 1$  et  $K_o^* = 0$ . Nous sommes dans le cas remarquable où l'opérateur  $ZF^{(\pi)}$  est soit pertinent soit non pertinent suivant où l'on se trouve au sein de la phase, d'après son équation de flot. Considérons en premier lieu l'influence du désordre ZF. On n'a besoin de regarder que le secteur  $a$  et l'opérateur  $ZF^{(\pi)}$ , ce qui simplifie les calculs et ne modifie en rien le résultat (l'opérateur  $ZF^{(0)}$  ne change pas le comportement du système). Puisque la fonction  $g$  est régulière, on écrit les

équations de flot effectives, tronquées à l'ordre le plus bas :

$$\frac{dy_1}{dl} = 2(1 - K_a)y_1, \quad (4.34)$$

$$\frac{d\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)}}{dl} = (3 - K_a)\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)}, \quad (4.35)$$

$$\frac{dK_a}{dl} = -(\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)} + \frac{2}{\pi^2}y_1^2)K_a^2. \quad (4.36)$$

Dans les plans d'équation  $y_1 = 0$  et  $\mathcal{D}_{ZF}^{(\pi)} = 0$ , le flot a une forme simple. On peut dessiner le flot sur un graphique en trois dimensions.

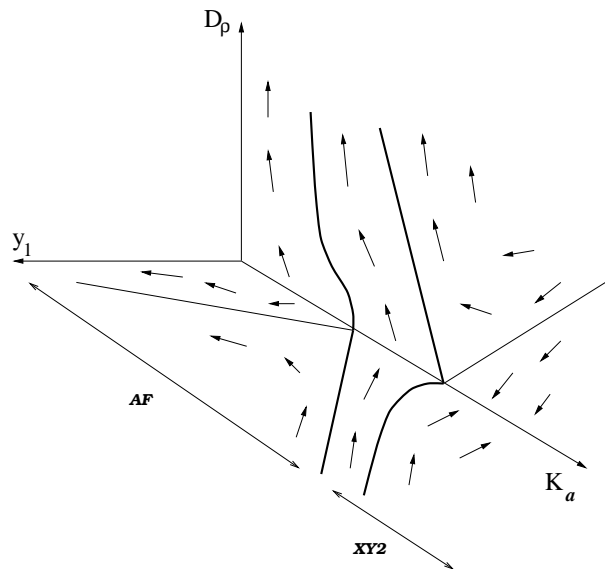


FIG. 4.4 - Flot du groupe de renormalisation dans le cas  $(ab)^2 < 6$ .

On voit que l'opérateur  $ZF^{(\pi)}$  sépare la phase XY2 en deux phases. La première, à grand  $K$ , est une phase non massive stable sous faible désordre. La seconde est instable sous faible désordre. La phase XY2 n'est que partiellement stable, et ceci est en accord avec notre intuition. En effet, quand le terme d'anisotropie  $D(S_i^z)^2$  devient grand et négatif, on s'attend à ce que la chaîne de spins 1 se comporte comme une chaîne de spins 1/2. Comme l'ont montré Doty et Fisher pour la chaîne de spins 1/2, il y a une région du diagramme de phase qui est stable sous faible désordre (c'est la phase superfluide du gaz de bosons, voir [37]). Pour la chaîne de spins 1/2, cette région de stabilité est située dans l'intervalle  $-1 < \Delta < -1/2$ . Pour la chaîne de spin 1, on trouve une phase stable analogue pour  $K$  suffisamment grand, ce qui est cohérent avec le fait que l'on doit retrouver le comportement de la chaîne de spins 1/2.

	AF	Haldane	large-D	XY1	XY2
ZF	Instable	Stable	Stable	Stable	Partiellement stable
PF	Instable	Stable	Stable	Instable	Partiellement stable
PE	Instable	Stable	Stable	Stable	Partiellement stable
PA	Instable	Stable	Stable	Instable	Instable

TAB. 4.3 - *Stabilité de la chaîne  $S=1$  sous faible désordre.*

Dans le cas du désordre PF, un champ magnétique aléatoire suivant l'axe  $z$  est engendré, et on est donc dans la situation précédente. Pour le désordre PE, l'opérateur  $PE^{(0)}$  est non pertinent, et la discussion ci-dessus reste valable. Pour le cas PA, l'opérateur  $PA^{(0)}$  est toujours pertinent alors que le secteur  $a$  est sans gap. La phase est donc instable, et cela est encore cohérent avec les résultats connus sur la chaîne de spins  $1/2$ .

Pour terminer, nous commentons brièvement le cas du couplage aléatoire des composantes  $z$  des opérateurs de spin qui est un cas non traité ici. En terme de spins  $S=1$ , il s'écrit  $\mathcal{H}_{ZE} = \sum_i J_i S_i^z S_{i+1}^z$ . Lorsqu'on insère les deux espèces de spins  $1/2$  dans cette expression, des couplages  $\sigma\tau$  apparaissent et conduisent, dans le langage bosonique à  $\cos(\sqrt{8\pi}\phi_a) + \cos(\sqrt{8\pi}\phi_o)$  l'opérateur  $\cos(\sqrt{8\pi}\phi_a)$  est pertinent dans la phase de Haldane et rend le couplage  $ZF^{(0)}$  singulier et infini, ce qui tue l'interaction dans le secteur  $a$ . La phase AF est elle aussi instable : l'opérateur  $ZF^{(\pi)}$  est présent dans l'expression bosonique de ce type de désordre, comme si un champ suivant l'axe  $z$  était engendré. Ces instabilités nécessitent assurément des études plus poussées. En ce qui concerne les autres phases, XY1 est stable et XY2 est instable.

## 4.6 Résultats numériques et expérimentaux

Nishiyama a effectué une étude numérique de la stabilité de la chaîne de spins 1 anisotrope sous champ magnétique aléatoire. Il a considéré le hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = \sum_i S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \lambda S_i^z S_{i+1}^z + h_i S_i^z. \quad (4.37)$$

où  $\lambda$  mesure l'anisotropie et on notera  $\Delta$  la variance du désordre. Les conclusions de ce travail sont en bon accord avec les prédictions théoriques de la bosonisation. Nishiyama



([38]) a démontré la stabilité de la phase de Haldane jusqu'à une certaine valeur du désordre, au delà de laquelle l'ordre string disparaît. La valeur critique du désordre est obtenue de la façon suivante : on représente sur un même graphique les valeurs numériques de l'ordre string en fonction du désordre, pour différentes longueurs  $L$  de la chaîne. A faible désordre, la valeur du paramètre d'ordre croît avec  $L$  : on en déduit que le paramètre d'ordre tend vers une valeur non nulle à la limite thermodynamique, et que la phase de Haldane résiste au faible désordre. A fort désordre, à l'inverse, la valeur du paramètre d'ordre string décroît avec  $L$  : la phase est détruite à la limite thermodynamique. Il existe une valeur intermédiaire du désordre pour laquelle le paramètre d'ordre est indépendant de la taille du système (invariant d'échelle), signe que l'on se trouve à un point critique, au point d'annulation du gap. Nishiyama a évalué cette valeur critique du désordre à  $\Delta_c/J = 0.49$  pour la chaîne isotrope, ce qui est même ordre de grandeur que le gap de Haldane. Le graphique ci-dessous représente le paramètre d'ordre en fonction d'une variable d'échelle faisant intervenir l'écart au point critique et l'exposant  $\nu$  de divergence de la longueur de corrélation près du point critique. Le fit de ces valeurs numériques permet de remonter à une estimation du point critique et de l'exposant  $\nu$ .

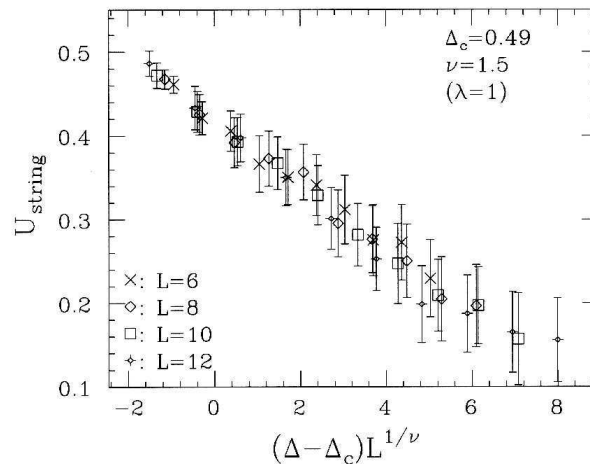


FIG. 4.5 - Fit des résultats numériques dans la chaîne isotrope par une loi d'échelle. Cela conduit à  $\Delta_c = 0.49 \pm 0.15$  et à  $\nu = 3.4 \pm 2.2$

Nishiyama montre aussi que la phase XY reste stable sous faible désordre. Il n'introduit dans son modèle qu'une anisotropie d'échange et pas de terme  $D$ . Ainsi, la phase XY qu'il explore est une partie de la ligne  $D = 0$  de notre diagramme de phase de la figure (4.2) qui ne coupe que la phase XY1 et pas XY2. Les résultats de Nishiyama sont donc en

accord avec ceux de la bosonisation.

Hida ([46]) a mené lui aussi une étude numérique sur le désordre de liens dans la chaîne de spins 1 isotrope par la méthode de DMRG. Le modèle de Hida considère des liens uniformément distribués sur un intervalle  $[1 - W/2, 1 + W/2]$ , où  $W$  mesure la force du désordre. Il conclut à la stabilité de la phase de Haldane pour toute valeur du désordre ( $W < 2$ ). Ce résultat contredit les études à fort désordre (voir plus loin), ainsi que les simulations Monte-Carlo ; on peut toutefois s'interroger sur la validité de cette étude d'un système désordonné par le DMRG, notamment lorsque le désordre devient grand.

Une autre étude numérique vise à comprendre l'influence d'impuretés sur le spectre de la chaîne de spins 1. La problématique est un peu différente, mais des expériences peuvent être menées, contrairement au cas du faible désordre. Wang et Mallwitz ([47]) ont modélisé l'effet d'une impureté par le hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = J \sum_1^{L-1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J' \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_L. \quad (4.38)$$

Les couplages  $J$  et  $J'$  sont tous deux positifs. En fonction du paramètre  $\gamma = J'/J$ , Wang et Mallwitz ont prouvé par des méthodes de DMRG qu'un état était créé dans le gap pour tout  $\gamma < 1$  et  $\gamma > \gamma_c \leq 1/0,708$ . Di Tusa et al. ([48]) ont réalisé des expériences de dopage de la chaîne de spins 1  $\text{Y}_2\text{BaNiO}_5$  par le calcium. Les ions  $\text{Ca}^{2+}$  se substituent aux ions  $\text{Y}^{3+}$ , et les porteurs de charge sont alors des trous. Ces trous sont localisés sur les atomes d'oxygène, entre les ions  $\text{Ni}^{2+}$ , transformant les oxygènes en spins 1/2 localisés, qui ont fatalement un effet sur le spectre. La diffusion inélastique de neutrons sur une poudre de  $\text{Y}_{2-x}\text{Ca}_x\text{BaNiO}_5$  a prouvé l'existence d'un état (triplet ou quartet) dans le gap.

## 4.7 Vers un diagramme de phase complet

Les techniques perturbatives de théorie des champs ne permettent bien sûr de traiter que le faible désordre, et en particulier ne donnent aucune indication sur la valeur critique du désordre, ni sur les phases désordonnées elles-même. Une méthode, développée par Ma et Dasgupta pour le spin 1/2 puis généralisée au spin 1, permet à l'inverse de traiter le fort désordre de liens pour la chaîne isotrope ([35, 36]). Ainsi, connaissant un peu mieux

les deux régimes extrêmes de faible et fort désordre, le théoricien s'octroie toute latitude pour spéculer sur les régimes intermédiaires. Le hamiltonien du modèle est le suivant :

$$\mathcal{H} = \sum_i J_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \quad (4.39)$$

Les  $J_i$  sont les couplages aléatoires plus proches voisins. Afin de capturer la physique de la phase de Haldane, il est nécessaire de considérer que  $\mathbf{S}_i$  est un opérateur de spin de taille  $s_i = 1/2$  ou  $s_i = 1$  et que les couplages sont ferromagnétiques ou antiferromagnétiques, mais qu'ils satisfont la contrainte: l'aimantation classique de chaque lien  $\{i, i+1\}$  doit satisfaire  $|m_{i,i+1}| \leq 1$ . La technique de renormalisation dans l'espace direct consiste à trouver une procédure fermée qui ne fait pas "mousser" la taille des spins.

Si on écrit un spin 1 comme l'état symétrisé de deux spins 1/2, les auteurs ont montré que les spins 1/2 se réarrangent en singulets. Pour la chaîne AKLT, on a une image de l'état de Haldane :

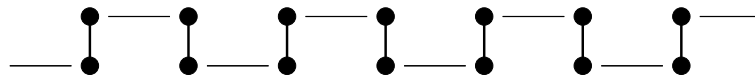


FIG. 4.6 - *Etat AKLT à désordre nul.*

A désordre infini, on montre numériquement que les spins 1 forment de singulets aléatoires deux à deux :

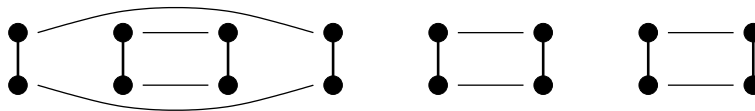
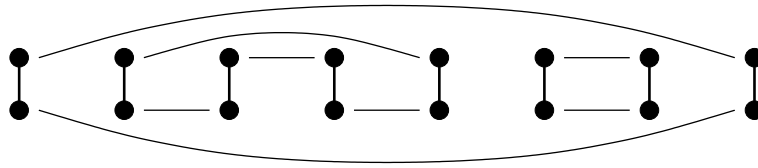
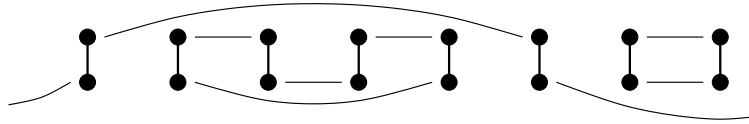


FIG. 4.7 - *Etat AKLT à désordre infini.*

A fort désordre, les spins 1/2 forment des singulets aléatoires, et sont regroupés au sein d'îlots de taille finie :

Lorsque le désordre baisse en dessous d'une valeur critique, il se produit une transition de percolation, c'est à dire que les spins 1/2 sont toujours regroupés en singulets, mais qu'il existe un îlot de taille infinie. On montre numériquement que la phase associée possède l'ordre caché de la phase de Haldane, mais qu'il n'y a pas de gap entre le fondamental et le premier état excité.

FIG. 4.8 - *Etat AKLT à désordre fort.*FIG. 4.9 - *Etat AKLT à désordre intermédiaire.*

La transition entre la phase de Haldane sans gap et la phase de singlets aléatoires, est caractérisée par l'annulation du paramètre d'ordre non local en fonction du désordre avec un exposant  $\beta = (3 - \sqrt{5})(1 + \sqrt{13})/6 \sim 1,17$  ([36]). Ce résultat exact est confirmé numériquement, en suivant le flot de renormalisation dans l'espace réel.

La robustesse de la phase de singlet aléatoire à l'introduction d'anisotropies est une question difficile et encore non résolue. On peut seulement, dans certains cas émettre un pronostic résultant d'un raisonnement qualitatif. Par exemple on peut répondre à la question de la pertinence de l'introduction d'une anisotropie ionique par un argument simple. Les phases de singlets aléatoires des chaînes de spins  $1/2$  et  $1$  sont très similaires. Puisque l'introduction d'une très forte anisotropie  $D < 0$  dans le hamiltonien de la chaîne de spins  $1$  se ramène à la physique de la chaîne de spins  $1/2$ , on peut s'attendre à ce que la phase de singlets aléatoires de la chaîne  $S=1$  reste insensible à l'introduction d'une très forte anisotropie ionique  $D < 0$ . Dès lors, on s'attend à la non pertinence de l'anisotropie ionique pour tout  $D < 0$  sur la phase de singlets aléatoires. En revanche, on ne sait rien dire pour le cas  $D > 0$ , ni sur l'impact de l'anisotropie d'échange  $\Delta$ . Les méthodes standard d'étude du fort désordre dans la chaîne de spins  $1$  ne fonctionnent pas en présence d'anisotropies : les méthodes d'études microscopiques ne conviennent pas aux systèmes désordonnés, et la méthode de renormalisation dans l'espace réel s'accommode mal des anisotropies qui rendent la procédure de décimation beaucoup plus complexe.

Fort des résultats de la bosonisation concernant la stabilité de la phase de Haldane sous faible désordre, on est en mesure de deviner le diagramme de phase de la chaîne de spins

1 en fonction de la force du désordre. Il existe une autre valeur critique du désordre (strictement positive) pour laquelle le système passe de la phase sans gap à la phase massive de Haldane. L'aspect de ce diagramme de phase est donné dans la figure ci-dessous :

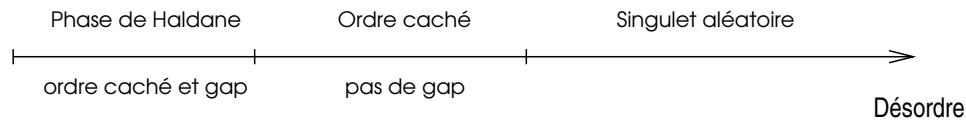


FIG. 4.10 - *Diagramme de phase schématique de la chaîne spin 1 désordonnée.*

Ce diagramme de phase est relativement analogue au diagramme de phase d'un supraconducteur. A faible désordre, on est dans la phase BCS avec un gap, et la température critique décroît avec la concentration en impuretés magnétiques. Pour une concentration critique, on passe à une phase intermédiaire sans gap mais avec des supercourants, et, à plus fort désordre, on se retrouve dans la phase métal normal.



# Chapitre 5

## Des expériences de RMN pour les théories conformes

### 5.1 Systèmes dopés et expériences de RMN

Le dopage des systèmes unidimensionnels est intéressant à plusieurs titres. D'un point de vue théorique, les travaux d'Anderson ont prouvé la virulence du désordre, même infinitésimalement faible, et le problème de la compétition entre désordre et interactions est toujours non résolu. D'un point de vue expérimental, les impuretés sont toujours présentes dans les matériaux de laboratoire, et leur influence doit être maîtrisée. Mais ce n'est pas l'unique raison qui pousse les physiciens à l'étude des systèmes dopés. Le dopage est un degré de liberté supplémentaire qui leur est offert pour sonder les corrélations dans les systèmes magnétiques et confronter les résultats aux prédictions théoriques.

De nombreux systèmes unidimensionnels sont critiques au point fixe et appartiennent à la classe d'universalité du liquide de Luttinger. Citons parmi eux la chaîne de spins  $1/2$  et le gaz d'électrons. Cela signifie que les fonctions de corrélation sont des fonctions autosimilaires (en loi de puissance) avec des exposants qui peuvent ne pas être universels. La physique du point fixe est alors décrite par une théorie effective invariante conforme. La présence d'impuretés dans de tels systèmes peut modifier cette théorie comme nous allons le voir, modifiant ainsi les exposants du modèle. Il se peut que la théorie nue ne soit pas elle-même invariante conforme, contrairement à celle du point fixe IR. La présence d'un opérateur non pertinent ne modifie pas le comportement critique du système, mais

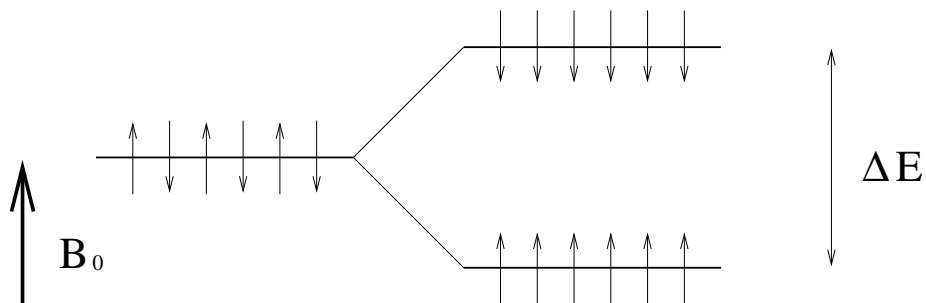


FIG. 5.1 - *Eclatement Zeeman des niveaux dans un champ magnétique.*

seulement les exposants si ceux-ci ne sont pas universels. Une perturbation pertinente conduit le flot de renormalisation vers un point fixe de couplage fort, échappant au régime perturbatif. Enfin, une perturbation marginalement non pertinente conduit au point fixe critique, mais loin du point critique les corrélations ont une correction logarithmique au comportement en loi de puissance. La puissance du logarithme intervenant dans les fonctions de corrélation se calcule par le groupe de renormalisation, et est affectée par la présence d'impuretés.

Il se trouve que ces exposants interviennent dans certaines grandeurs accessibles à l'expérience. La RMN est un outil agréable car elle permet de mesurer des propriétés locales dans un composé; en effet, si on dope un système avec une certaine quantité faible d'un composé, il est possible d'effectuer des expériences de RMN sur ce composé uniquement, de façon sélective, comme nous allons le voir.

La technique de RMN ([49]) repose sur les propriétés magnétiques des noyaux qui possèdent un spin non nul. Si on dispose de toute une assemblée de moments magnétiques dans un champ magnétique  $B_0$ , on a la création de deux niveaux d'énergie distincts d'écart  $\Delta E = \gamma \hbar B_0$ , où  $\gamma$  est le rapport gyromagnétique.

Comme pour toute spectroscopie, une transition peut avoir lieu entre ces deux niveaux si le système est soumis à une radiation électromagnétique de fréquence obéissant à la relation de Bohr  $\Delta E = h\nu$ . La fréquence  $\nu$  est une fréquence de résonance, et le spectre d'absorption est piqué autour de  $\nu$ . Le nuage électronique environnant peut apporter un effet perturbateur qui se traduit, au niveau du noyau, par une valeur du champ légèrement différente de  $B_0$  et l'on note  $B_0(1 - \sigma)$ . Le coefficient  $\sigma$  est appelé coefficient d'écran. La



fréquence de résonance est elle aussi modifiée et vaut  $\nu_0 = \gamma(1 - \sigma)B_0/2\pi$  et conduit à une différentiation de fréquence en fonction de la nature du groupement chimique auquel le moment magnétique appartient. Cet effet est connu sous le nom de déplacement chimique. En ajustant correctement la fréquence de la radiation, on peut faire entrer en résonance tel ou tel composé ou groupement de façon sélective.

Venons-en à présent aux aspects dynamiques de la RMN. La physique classique suffit pour acquérir une vision intuitive des choses. L'équation classique de l'interaction d'un moment magnétique avec un champ magnétique extérieur est :

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \gamma\mathbf{M} \wedge \mathbf{B}, \quad (5.1)$$

où  $\mathbf{B}$  est un champ magnétique pouvant dépendre du temps. Toutefois, dans les vrais matériaux, les spins nucléaires ont des interactions complexes avec tout leur environnement. Ces interactions peuvent être hyperfines dipolaires, quadrupolaires, ou encore hyperfines transférées. Dès lors, le mouvement perpétuel de l'aimantation nucléaire décrit par l'équation (5.2) est amorti et l'aimantation nucléaire, lorsqu'elle a été écartée de sa position d'équilibre retourne naturellement vers l'équilibre thermodynamique. Ce retour à l'équilibre est introduit de façon phénoménologique dans les équations grâce à l'introduction de deux temps de relaxation  $T_1$  et  $T_2$  pour les aimantations longitudinales et transverses respectivement. Ceci conduit aux fameuses équations de Bloch pour l'aimantation nucléaire, aussi bien dans le repère fixe que dans le repère tournant :

$$\begin{aligned} \frac{dM_{x,y}}{dt} &= \gamma(\mathbf{M} \wedge \mathbf{B})_{x,y} - \frac{M_{x,y}}{T_2}, \\ \frac{dM_z}{dt} &= \gamma(\mathbf{M} \wedge \mathbf{B})_z - \frac{M_0 - M_z}{T_1}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Les temps de relaxation sont de l'ordre de grandeur de la seconde ou de la dizaine de secondes pour la plupart des liquides et dans les cas d'une relaxation par des interactions dipolaires. Les  $T_1$  des solides peuvent être très longs.

Il est possible de mesurer expérimentalement ces paramètres de relaxation en appliquant une perturbation au système, le déplaçant hors de son état d'équilibre et en le laissant évoluer pendant une certaine durée  $\tau$  pendant laquelle se manifestent les paramètres dynamiques d'intérêt. Nous allons décrire brièvement comment se déroule la mesure du

$T_1$ , qui seule nous intéresse ici. On effectue des mesures pour différentes valeurs de  $\tau$ . Afin que l'aimantation reste longitudinale, on applique au système une impulsion de champ magnétique à  $180^\circ$  par rapport au champ magnétique "ambient". Au bout de la période  $\tau$ , l'aimantation longitudinale est lue au moyen d'une impulsion à  $90^\circ$  qui la convertit en aimantation transversale, propice à la détection. La valeur de l'aimantation en fonction de  $\tau$ , permet de remonter, grâce aux équations de Bloch, au temps de relaxation longitudinal.

Le temps de relaxation longitudinal dépend de l'autocorrélation de spin dans le temps  $\langle \mathbf{S}(0, t) \cdot \mathbf{S}(0, 0) \rangle_T$  par la formule ([51]) :

$$\frac{1}{T_1} = A^2 \lim_{\omega \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle \mathbf{S}(0, t) \cdot \mathbf{S}(0, 0) \rangle_T. \quad (5.3)$$

Dans cette relation,  $\mathbf{S}(x, t)$  est l'opérateur du spin au site  $x$  et à l'instant  $t$  via lequel le spin nucléaire de l'impureté relaxe,  $A$  est le couplage hyperfin (supposé constant en première approximation) de l'impureté et du spin de la chaîne le plus proche et  $\langle \dots \rangle_T$  est la valeur moyenne à température  $T$ .

Le dopage d'un système consiste en la substitution d'un type d'ions du cristal par un autre. Deux phénomènes peuvent survenir. Soit l'ion substitué est dans le cristal, mais en dehors de la chaîne. Alors, l'impureté porte un spin nucléaire en interaction dipolaire (ou hyperfine transférée) avec les spins de la chaîne la plus proche. L'excitation de ce spin nucléaire va conduire à une relaxation via le *volume* de la chaîne. Expérimentalement, ce qui joue le rôle des impuretés dans le volume est le spin nucléaire de l'isotope  $^{63}\text{Cu}$  du cuivre qui est présent dans toute chaîne contenant du cuivre, comme  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$ . Ce spin nucléaire relaxe via ses interactions avec les spin électronique du cuivre.

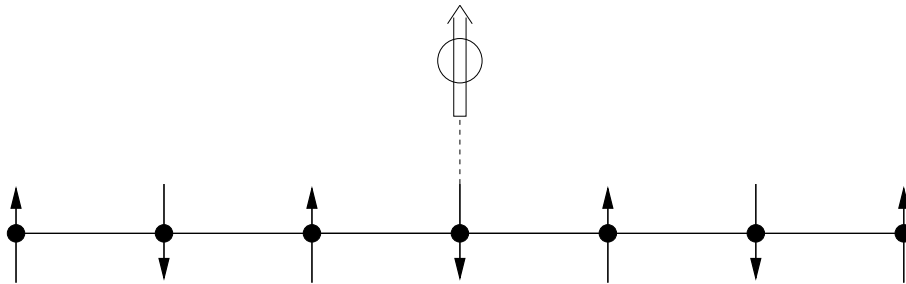


FIG. 5.2 - Impureté non magnétique couplée au volume de la chaîne.

Le taux de relaxation longitudinal dépendra donc des autocorrélations dans le temps du

spin de la chaîne le plus proche de l'impureté. Une autre situation intervient lorsque l'ion substitué est un ion de la chaîne elle-même. Car alors, la chaîne est coupée, et le spin nucléaire de l'impureté n'est couplé qu'au bord de la chaîne, et non au volume comme dans le cas précédent. C'est ce qui pourrait se passer en dopant le système avec du zinc, dont l'un des isotopes,  $^{67}\text{Zn}$  possède un spin nucléaire  $3/2$ .

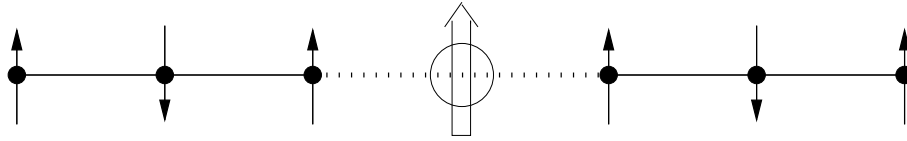


FIG. 5.3 - *Impureté non magnétique couplée au bord de la chaîne.*

Le couplage de l'impureté à la chaîne est supposé infiniment petit devant le couplage de Heisenberg le long de la chaîne. Dans ces conditions, les deux demi-chaînes sont considérées comme isolées l'une de l'autre, et l'impureté ne voit essentiellement que deux chaînes semi-infinies, dans la limite d'impuretés très diluées. C'est là que réside la différence entre impuretés magnétiques et non magnétiques : une impureté magnétique aurait conduit à une chaîne de spins où deux liens consécutifs seraient différents des autres liens le long de la chaîne.

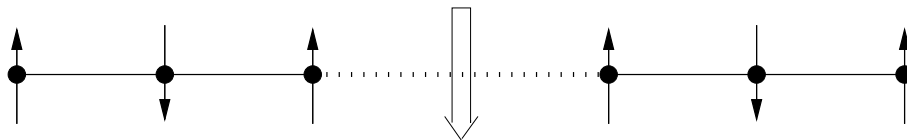


FIG. 5.4 - *Impureté magnétique couplée au volume de la chaîne.*

Ainsi, pour résumer, dans le cas d'une impureté couplée au volume, la mesure du  $T_1$  permet de remonter aux corrélations du volume et donc aux exposants de volume. Pour une impureté couplée au bord de la chaîne on a accès aux corrélations en présence d'un bord et donc aux exposants de bord du système.

## 5.2 Théorie en volume

Nous allons dans un premier temps nous intéresser à la chaîne de spins  $1/2$  anisotrope de Heisenberg, décrite par le hamiltonien XXZ donné dans le chapitre 2. Nous avons vu

que la version bosonisée de ce modèle était le modèle de Sine-Gordon, et qui donne au point fixe le hamiltonien :

$$\mathcal{H} = \frac{v}{2} \left[ K \Pi^2 + \frac{1}{K} (\nabla \phi)^2 \right]. \quad (5.4)$$

Le paramètre  $K$  est fonction de  $\Delta$ , connue exactement grâce à l'ansatz de Bethe ; au point isotrope de Heisenberg ( $\Delta = 1$ )  $K$  vaut  $1/2$  et l'opérateur en cosinus est marginalement non pertinent. Pour  $\Delta \in [0, 1[$ , on a  $K \in ]1/2, 1]$  et le cosinus est non pertinent. En terme du champ bosonique  $\phi$ , les opérateurs de spin s'écrivent :

$$\begin{aligned} S^+(x) &= \frac{e^{i\sqrt{\pi}\phi}}{\pi\alpha} \left[ (-)^x + \sin \sqrt{4\pi}\phi \right], \\ S^z(x) &= -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \nabla \phi + \frac{(-)^x}{\pi\alpha} \cos \sqrt{4\pi}\phi. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Au point fixe, les fonctions de corrélation sont toutes algébriques avec des exposants qui peuvent dépendre de  $K$ . Les corrélations de spin se déduisent immédiatement des dimensions d'échelle des opérateurs impliqués. Par exemple :

$$\langle e^{i\sqrt{4\pi}\phi(0,t)} e^{-i\sqrt{4\pi}\phi(0,0)} \rangle \sim \frac{1}{t^{2K}}. \quad (5.6)$$

Au point de Heisenberg, la partie alternée de  $\langle S^z S^z \rangle$  est donc :

$$\langle S^z(0,t) S^z(0,0) \rangle_a \sim \frac{1}{t}. \quad (5.7)$$

Le point fixe étant décrit par une théorie invariante conforme, il est extrêmement aisé d'obtenir cette fonction de corrélation à température finie, par le simple truchement d'une transformation conforme. Le mapping du plan infini (avec la coordonnée holomorphe  $z$ ) sur le cylindre de rayon  $1/2\pi T$  (de coordonnée  $w$ ) est :

$$w = \frac{1}{2\pi T} \ln z. \quad (5.8)$$

Considérons la fonction à deux point d'un champ primaire  $\phi$  de poids conformes  $h$  et  $\bar{h}$ . L'invariance conforme impose une relation entre les corrélations sur le cylindre et dans le plan (on appelle  $W_i$  le couple  $(w_i, \bar{w}_i)$ ):

$$\langle \phi(W_1) \phi(W_2) \rangle_{Cyl} = \langle \phi(Z_1) \phi(Z_2) \rangle_{Plan} \left( \frac{\partial w}{\partial z} \right)_{w_1}^{-h} \left( \frac{\partial \bar{w}}{\partial \bar{z}} \right)_{w_1}^{-\bar{h}} \left( \frac{\partial w}{\partial z} \right)_{w_2}^{-h} \left( \frac{\partial \bar{w}}{\partial \bar{z}} \right)_{w_2}^{-\bar{h}} \quad (5.9)$$

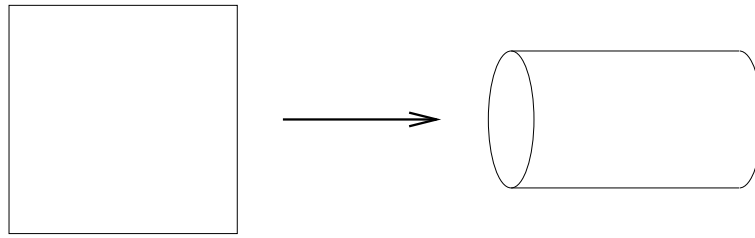


FIG. 5.5 - Transformation conforme du plan sur un cylindre de rayon  $1/2\pi T$

Pour les opérateurs qui nous intéressent on a  $h = \bar{h}$ , et leur dimension est  $h + \bar{h}$ . Puisque  $\langle \phi(z_1, \bar{z}_1) \phi(z_2, \bar{z}_2) \rangle_{Plan} = \frac{1}{(z_1 - z_2)^{2h} (\bar{z}_1 - \bar{z}_2)^{2h}}$ . Il vient :

$$\langle \phi(w_1, \bar{w}_1) \phi(w_2, \bar{w}_2) \rangle_{Cyl} \propto \left[ \frac{T}{\sinh \pi T (w_1 - w_2)} \frac{T}{\sinh \pi T (\bar{w}_1 - \bar{w}_2)} \right]^{2h}. \quad (5.10)$$

Pour la corrélation  $\langle S^z S^z \rangle_a \sim 1/t$ , il vient à température finie :

$$\langle S^z S^z \rangle_a \propto \frac{T}{\sinh \pi T t}. \quad (5.11)$$

Lorsque  $T \rightarrow 0$  on retrouve bien le comportement critique de la corrélation. On obtient ainsi toutes les corrélations de spin souhaitées, chacune contenant une partie uniforme et une partie alternée respectivement :

$$\begin{aligned} \langle S^z(t) S^z(0) \rangle &\propto \frac{T^2}{\sinh^2 \pi T t} + \left( \frac{T}{\sinh \pi T t} \right)^{2K}, \\ \langle S^+(t) S^-(0) \rangle &\propto \left( \frac{T}{\sinh \pi T t} \right)^{2K+1/2K} + \left( \frac{T}{\sinh \pi T t} \right)^{2K}. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Dans ces relations, nous avons omis les préfacteurs ; le premier terme est la partie uniforme de la corrélation alors que le second est sa partie alternée. Dans le cas d'une chaîne isotrope ( $K = 1/2$ ), les deux corrélations sont égales à  $T/\sinh \pi T t$ . En injectant cette expression dans dans la formule du  $T_1$ , on extrait sa dépendance en température:  $T_1^{-1} \propto T^0$ . Ce comportement est en bon accord avec les résultats expérimentaux de Takigawa et al. ([54]) Leurs mesures ont été effectuées sur le composé  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$ , qui est une chaîne de spins 1/2 pour toute température supérieure à 5 K. Dans ce composé, le taux de relaxation longitudinal ne dépend pas de la température au delà de 20 K. En revanche, ils ont enregistré une remontée à basse température (voir fig. (5.6)).

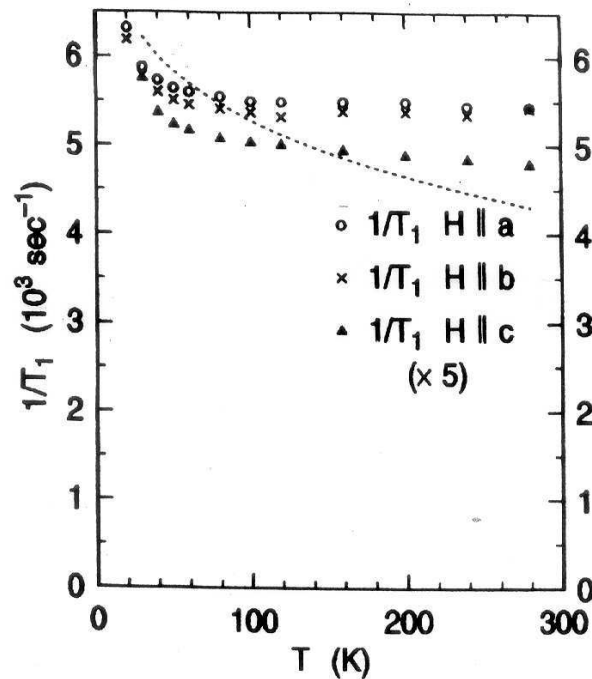


FIG. 5.6 - Taux de relaxation longitudinal en fonction de la température.

Une interprétation de cette remontée est la présence de l'opérateur marginal dans le modèle microscopique isotrope ([58, 59]). Loin du point critique, la densité de hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H} = \frac{v}{2} \left[ K \Pi^2 + \frac{1}{K} (\nabla \phi)^2 \right] + g \cos \sqrt{16\pi} \phi. \quad (5.13)$$

A température nulle, cet opérateur marginal donne une correction logarithmique ([60]) au comportement en loi de puissance des fonctions de corrélation et qui peut modifier la dépendance en température du  $T_1$ . Ces corrections ont été prouvée expérimentalement ([61]). Par exemple, si on appelle  $G(r)$  ( $r = \sqrt{x^2 - t^2}$ ) la partie alternée de  $\langle S^+(x, t) S^-(0, 0) \rangle$ ,  $G(r) = \langle S^+(x, t) S^-(0, 0) \rangle_a$ , alors,  $G$  est solution de l'équation de Callan-Symanzik :

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \ln r} + \beta(g) \frac{\partial}{\partial g} + 2\gamma(g) \right] G(r, g) = 0, \quad (5.14)$$

où  $\beta(g) = -2\pi g^2$  est la fonction beta de l'opérateur marginal, et  $\gamma(g) = (1 - \pi g)/2$  est la dimension anormale de la partie alternée de l'opérateur  $S^+$ . On calcule  $\gamma(g)$  en

perturbations au premier ordre en  $g$  et la forme de la fonction  $G$  s'obtient en résolvant l'équation (5.14) par la méthode des caractéristiques :

$$\langle S^+(t) S^-(0) \rangle_a \propto \frac{1}{t} (1 + g \ln t/a)^{1/2}. \quad (5.15)$$

A grand temps, cette corrélation se comporte comme  $\frac{\ln^{1/2} t}{t}$ . A température finie, on a :

$$\langle S^+(t) S^-(0) \rangle_a \propto \frac{T}{\sinh \pi T t} \ln^{1/2} t. \quad (5.16)$$

Cela conduit à la correction logarithmique ([52, 53]) pour le  $T_1$ , valable à basse température, lorsque les corrections logarithmiques ne sont plus négligeables :

$$T_1^{-1} \propto T^0 \ln^{1/2} T. \quad (5.17)$$

Ce comportement est reporté en pointillés sur la figure (5.6), et on constate un accord plus que partiel entre la théorie et l'expérience. Récemment, une amélioration notable de l'interpolation des données de Takigawa a été obtenue par Barzykin ([55]). Il a calculé les corrélations de spin dans la chaîne de spins 1/2 à l'ordre de deux boucles. A cet ordre, la fonction  $\beta$  de l'opérateur marginal est  $\beta(g) = -2\pi(g^2 + g^3/2)$ . On en déduit la forme de la partie alternée des autocorrélations de spin dans le temps à température finie :

$$\langle \mathbf{S}(t) \mathbf{S}(0) \rangle_T \sim \frac{T}{\sinh^{\eta(T)}(\pi T t)} \left[ \ln \frac{\Lambda}{T} + \frac{1}{2} \ln \ln \frac{\Lambda}{T} \right]^{1/2}, \quad (5.18)$$

avec :

$$\eta(T) = 1 - \frac{1}{2 \ln \frac{\Lambda}{T}}. \quad (5.19)$$

On en déduit le taux de relaxation longitudinal  $T_1^{-1}$  :

$$T_1^{-1} \propto \sqrt{\ln \frac{\Lambda}{T} + \frac{1}{2} \ln \ln \frac{\Lambda}{T}}. \quad (5.20)$$

La figure 5.7 reproduit la courbe de Barzykin ([55]) et les données expérimentales de Takigawa. On constate que l'interpolation est bien meilleure que par le  $\sqrt{\ln T}$  de Sachdev.

Une autre application des corrections logarithmiques qui a remporté un franc succès dans la communauté des chaînes de spins est le calcul des corrections logarithmiques

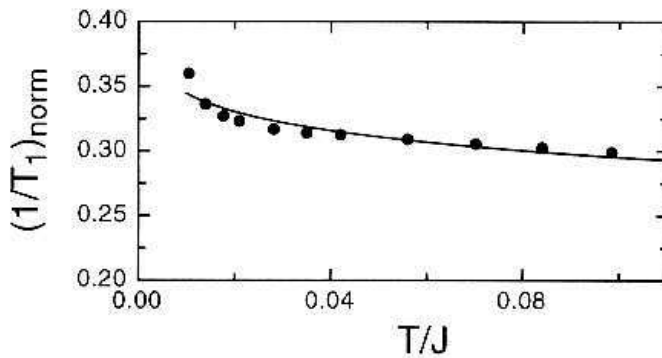


FIG. 5.7 - Taux de relaxation longitudinal en fonction de la température. Les points sont les données expérimentales de Takigawa, et la courbe en trait plein est le résultat du groupe de renormalisation à 2 boucles obtenu par Barzykin.

de la susceptibilité magnétique ([60]), corrections qui deviennent importantes à basse température comme nous l'avons évoqué au premier chapitre. Au point isotrope, la susceptibilité dépend du couplage marginal  $g$ , et au premier ordre en  $g$  :

$$\chi(T) \propto 1 + \lambda g(T), \quad (5.21)$$

où  $\lambda$  est une constante. On connaît la fonction  $g(T)$  qui est solution de l'équation de flot de l'opérateur marginal. On en conclut alors :

$$\pi^2 J \chi(T) \sim 1 + \frac{1}{2 \ln(T_0/T)}, \quad (5.22)$$

où  $T_0$  est une constante de l'ordre de  $7,7 J$ .

### 5.3 Chaîne de spins 1/2 et théorie avec bord

Ces dernières années ont vu l'éclosion de nouveaux modèles définis sur des espaces avec bords. Un nouveau concept est même apparu en physique des hautes énergies : il est parfois intéressant de voir une théorie comme théorie de bord d'un modèle plus général. Quoi qu'il en soit, les théories avec bord font des incursions de plus en plus fréquentes, notamment en théorie de la matière condensée. Si l'on considère un système critique avec bord, Cardy a démontré dans le cadre de l'invariance conforme que le comportement autosimilaire des corrélations d'opérateurs définis sur le bord persistait, mais avec des exposants différents, appelés exposants de bord ([50]).



Par voie de conséquence, la dépendance en température du  $T_1$  doit être modifiée par rapport au cas du volume, à condition que notre sonde locale que constitue la technique de RMN vienne effectivement sonder le bord de la chaîne. Il suffit pour cela de doper la chaîne en substituant des ions de celle-ci par des impuretés non magnétiques, ce qui a pour effet de la couper et de fournir un laboratoire pour des expériences de RMN, réalisées sur les impuretés sélectivement, comme par exemple sur les spins nucléaires du  $^{63}\text{Cu}$  ou du  $^{67}\text{Zn}$ . En termes mathématiques, la présence d'une impureté conduit à écrire une condition de Dirichlet ([57]) pour le champ bosonique  $\phi$  qui décrit les excitations de la chaîne de spins 1/2. La condition au bord a pour origine physique la nullité de l'aimantation moyenne au bord, en vertu de l'invariance par rotation.

$$\langle S^z(0, t) \rangle = 0 \implies \phi(0, t) = \pi/\sqrt{16\pi}. \quad (5.23)$$

Ceci introduit une relation entre les composantes chirales du champ  $\phi$  en  $x = 0$  et, par continuation analytique, cette relation s'étend à toutes les valeurs de  $x$  :  $\phi_R(x, t)$  peut être vu comme la continuation analytique de  $\phi_L$  sur le demi-axe des  $x$  négatifs :

$$\phi_R(x, t) = -\phi_L(-x, t) + \frac{\pi}{\sqrt{16\pi}}. \quad (5.24)$$

Visuellement, ceci consiste à déplier la demi-chaîne comme indiqué dans la figure (5.8).

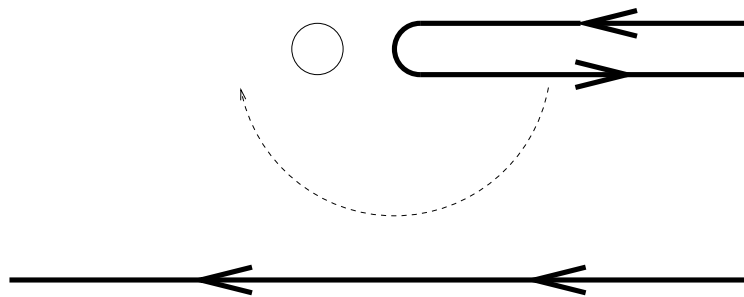


FIG. 5.8 - Une théorie avec bord se transforme en théorie de volume.

Le système final n'a plus de bord et ne contient qu'un boson chiral. Ainsi les champs  $\phi$  et  $\tilde{\phi}$  dans un système avec bord s'expriment-ils en fonction du seul champ  $\phi_L$  défini dans tout l'espace, et les fonctions de corrélation se ramènent-elles toutes à calculer des corrélations du champ  $\phi_L$ .

La procédure pour calculer une corrélation dans une théorie avec bord est simple dans son principe : primo, on remplace les champs  $\phi$  et  $\tilde{\phi}$  par les expressions suivantes :

$$\phi(x, t) = \phi_L(x, t) - \phi_L(-x, t) + \pi/\sqrt{16\pi}, \quad (5.25)$$

$$\tilde{\phi}(x, t) = \phi_L(x, t) + \phi_L(-x, t). \quad (5.26)$$

Secundo, on applique le théorème de Wick à tour de bras de façon à faire apparaître seulement la fonction de corrélation chirale :

$$\begin{aligned} G_L(x_2 - x_1, t_2 - t_1) &= \langle \phi_L(x_1, t_1) \cdot \phi_L(x_2, t_2) - \frac{1}{2}\phi_L^2(x_1, t_1) - \frac{1}{2}\phi_L^2(x_2, t_2) \rangle \\ &\sim \frac{1}{4\pi} \ln \left[ \frac{T}{\sinh[\pi T((x_2 - x_1) + (t_2 - t_1))]} \right]. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Une première conséquence de la présence d'un bord est la brisure de l'invariance par translation du système, et donc de l'invariance conforme si la théorie de volume l'était. L'invariance par translation n'est plus préservée que dans la direction temporelle. On peut donc se convaincre que l'invariance conforme ne subsiste que pour le champ  $\phi_L$ .

Certains opérateurs comme  $e^{i\phi}$  et  $e^{i\tilde{\phi}}$  s'écrivent  $e^{i(\phi_L - \phi_L)}$  et  $e^{i(\phi_L + \phi_L)}$  respectivement en présence du bord, si bien que la charge dans la théorie avec bord est doublée par rapport à la théorie de volume.

Enfin, la présence d'un bord affecte la règle de neutralité de charge qui constitue, dans le volume, une condition *sine qua non* de non nullité d'une corrélation d'opérateurs de vertex. Ainsi, la condition de neutralité doit à présent porter sur  $\phi_L$  et non sur  $\phi$  et  $\tilde{\phi}$ . Il en résulte que certaines corrélations qui étaient nulle dans le volume s'avèrent non nulles en présence d'un bord. Par exemple,  $\langle e^{i\alpha\phi(x,t)} e^{i\alpha\phi(y,s)} \rangle = 0$  dans le volume, mais cette corrélation vaut, en présence d'un bord :

$$e^{2i\alpha\sqrt{\pi/16}} \langle e^{i\alpha(\phi_L(x,t) - \phi_L(-x,t))} e^{i\alpha(\phi_L(y,s) - \phi_L(-y,s))} \rangle \neq 0. \quad (5.28)$$

Nous allons calculer les corrélations de spin à des positions et temps quelconques dans la théorie avec bord. Les fonctions de corrélation exactes sont données dans l'appendice B, et ici, nous ne donnons que la valeur des corrélations au bord, c'est à dire en  $x = a$ . Les résultats sont récapitulés dans le tableau suivant :

	$\langle S^+(0, t)S^-(0, 0) \rangle$	$\langle S^z(0, t)S^z(0, 0) \rangle$
Partie uniforme	$\left(\frac{T}{\sinh \pi T t}\right)^{1/K}$	$\left(\frac{T}{\sinh \pi T t}\right)^2$
Partie alternée	$\left(\frac{T}{\sinh \pi T t}\right)^{1/K}$	$\left(\frac{T}{\sinh \pi T t}\right)^2$

TAB. 5.1 - *Corrélations de spin au bord à température finie.*

Certaines fonctions de corrélation, celles qui sont quadratiques, sont facilement calculables dans la théorie de bord en fonction du résultat de la théorie de volume, grâce à la méthode des images :

$$G_{boundary}(x_1, x_2, t) = \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2 = \pm 1} G_{volume}(\epsilon_1 x_1, \epsilon_2 x_2, t). \quad (5.29)$$

Ceci fonctionne bien pour la partie uniforme de  $\langle S^z S^z \rangle$ .

Le calcul de la partie alternée de  $\langle S^z S^z \rangle$  est un peu astucieux, car la neutralité s'applique sur le champ  $\phi_L$  et le rôle de la valeur du champ  $\phi$  en  $x = 0$  est crucial pour ce calcul :

$$\langle S^z(x_1, 0)S^z(x_2, t) \rangle_s = \frac{1}{4} \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2 = \pm 1} \langle e^{i\epsilon_1 \sqrt{4\pi} \phi(x_1, 0)} e^{i\epsilon_2 \sqrt{4\pi} \phi(x_2, t)} \rangle. \quad (5.30)$$

De même, le calcul de la partie uniforme de  $\langle S^+ S^- \rangle$  est assez complexe :

$$\langle S^+(x_1, t_1)S^-(x_2, t_2) \rangle_u = \langle e^{i\sqrt{\pi} \tilde{\phi}(x_1, t_1)} \sin \sqrt{4\pi} \phi(x_1, t_1) e^{-i\sqrt{\pi} \tilde{\phi}(x_2, t_2)} \sin \sqrt{4\pi} \phi(x_2, t_2) \rangle \quad (5.31)$$

Finalement, le résultat final de la dépendance en température du taux de relaxation longitudinal est, dans le cas d'une chaîne anisotrope :

$$\frac{1}{T_1} \propto T + T^{1/K-1}. \quad (5.32)$$

Au point isotrope,  $1/T_1 \propto T$ , ce qui constitue un résultat très différent du cas d'une impureté couplée au volume de la chaîne. Les expérimentateurs savent parfaitement doper les chaînes et ce comportement ne devrait pas être difficile à observer expérimentalement.

Ici encore, la présence d'un opérateur marginalement non pertinent peut perturber le comportement critique des fonctions de corrélation par des opérateurs logarithmiques.

Ces corrections sont délicates à obtenir dans le cas de la théorie avec bord. Nous allons nous focaliser sur la partie alternée de la fonction de corrélation  $\langle S^+ S^- \rangle$  :

$$G(x_1, x_2, t_1 - t_2) = \langle e^{i\sqrt{\pi}\tilde{\phi}(x_1, t_1)} e^{-i\sqrt{\pi}\tilde{\phi}(x_2, t_2)} \rangle. \quad (5.33)$$

Nous allons calculer cette fonction de corrélation au bord, en présence d'une perturbation marginale dans le hamiltonien. Toute la difficulté pour extraire la correction logarithmique consiste à trouver la dimension anormale de l'opérateur de bord  $e^{i\sqrt{\pi}\tilde{\phi}(0, t)}$  induite par l'opérateur marginal. En fait, dans le volume, cette dimension anormale s'extrait aisément par des développements de produits d'opérateurs. En présence d'un bord, nous n'avons pas su maîtriser cette technique. Le mieux est donc d'effectuer un vrai calcul perturbatif de cette corrélation et d'en tirer la dimension anormale à l'ordre le plus bas de la théorie de perturbation. La densité lagrangienne du modèle microscopique s'écrit :

$$\mathcal{L} = (\partial_\mu \phi)^2 + x(\partial_\mu \phi)^2 + y \cos \sqrt{16\pi} \phi. \quad (5.34)$$

avec une condition au bord donnée par l'équation (5.25), et  $1 + x = 1/2K$ . Les équations de flot (Kosterlitz-Thouless) pour  $x$  et  $y$  se déduisent aisément par des techniques d'OPE :

$$\frac{dx}{dl} = 2\pi^2 y^2, \quad (5.35)$$

$$\frac{dy}{dl} = 2xy. \quad (5.36)$$

Les couplages  $x$  et  $y$  mesurent l'écart à la criticalité. La ligne marginale a pour équation :  $x = -\pi y$ , et, sur cette ligne  $\beta(y) = -2\pi y^2$ . Sur le bord, la fonction de corrélation est solution de l'équation de Callan-Symanzik suivante :

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \ln t} + \beta(y) \frac{\partial}{\partial y} + 2\gamma_B(y) \right] G(t, y) = 0, \quad (5.37)$$

où  $\gamma_B(y)$  est la dimension anormale de l'opérateur de bord  $e^{i\sqrt{\pi}\tilde{\phi}(0, t)}$ , dimension qui s'obtient en calculant la fonction de corrélation :

$$\langle e^{i\sqrt{\pi}\tilde{\phi}(0, t)} e^{-i\sqrt{\pi}\tilde{\phi}(0, 0)} \rangle \sim \frac{1}{t^{2\gamma_B}}. \quad (5.38)$$

Nous effectuons ce calcul en perturbation, comme indiqué ci-dessous, dans un exemple modèle de calcul de valeur moyenne d'un opérateur quelconque  $\mathcal{O}$  :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi \mathcal{O} e^{-S_0 - x \int (\partial_\mu \phi)^2 - y \int \cos \sqrt{16\pi} \phi}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-S_0 - x \int (\partial_\mu \phi)^2 - y \int \cos \sqrt{16\pi} \phi}}. \quad (5.39)$$

Au premier ordre en  $x$  et  $y$ , cela donne :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \langle \mathcal{O} \rangle_0 - x \langle \mathcal{O} \int (\partial_\mu \phi)^2 \rangle_0 - y \langle \mathcal{O} \int \cos \sqrt{16\pi} \phi \rangle_0 + y \langle \mathcal{O} \rangle_0 \langle \int \cos \sqrt{16\pi} \phi \rangle_0. \quad (5.40)$$

Pour  $\mathcal{O} = e^{i\sqrt{\pi}\tilde{\phi}(0,t)} e^{-i\sqrt{\pi}\tilde{\phi}(0,0)}$ , il vient :

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle &= \langle \mathcal{O} \rangle_0 (1 - 8\pi y \ln t/a) \\ &\propto \frac{1}{t^{2(1-4\pi y)}}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

D'où  $\gamma_B(y) = 1 - 4\pi y$ , et on obtient la solution de l'équation de Callan-Symanzik ([62]) :

$$G(t) \sim \frac{1}{t^2} (\ln t)^4 \xrightarrow{T>0} \frac{T^2}{\sinh^2 \pi T t} (\ln t)^4. \quad (5.42)$$

Cette correction logarithmique apporte donc une correction en  $\ln^4 T$  au  $1/T_1$  à basse température :

$$1/T_1 \propto T^1 (\ln T)^4. \quad (5.43)$$

Une vérification de ce résultat consiste à calculer la correction logarithmique pour  $\langle S^z S^z \rangle$  par la même technique et qui doit donner le même résultat à cause de l'invariance par rotation. C'est effectivement le cas !

On peut affiner la prédiction grâce aux travaux de Barzykin ([55]). La fonction  $\beta$  de l'opérateur marginal est  $\beta(y) = -2\pi(y^2 + y^3/2)$ , mais la dimension anormale des opérateurs de bord mis en jeu est  $\gamma_B(y) = 1 - 4\pi y$ . On en déduit le taux de relaxation longitudinal  $T_1^{-1}$  :

$$T_1^{-1} \propto T \left[ \ln \frac{\Lambda}{T} + \frac{1}{2} \ln \ln \frac{\Lambda}{T} \right]^4. \quad (5.44)$$

L'influence d'un champ magnétique supplémentaire ne devrait pas avoir de conséquence dramatique sur ces exposants, notamment en ce qui concerne les exposants de volume. En effet, dans le volume, le modèle de Heisenberg anisotrope en champ magnétique est intégrable, et on connaît, de façon implicite, la relation entre le paramètre  $K$ , l'anisotropie  $\Delta$  et le champ  $h$  : la fonction  $K(\Delta, h)$  est solution d'une équation intégrale de l'ansatz de Bethe. On s'attend donc à ce que l'exposant intervenant dans la dépendance en température du  $T_1$  varie continûment avec le champ magnétique.

La situation est plus complexe en présence d'un bord. En l'absence de champ magnétique, les exposants de bord dépendent eux aussi simplement du paramètre  $K(\Delta)$ , et on peut se demander si l'ajout d'un champ magnétique n'aurait pour seule influence que de modifier la valeur de  $K(\Delta)$  en  $K(\Delta, h)$ . Le seul petit problème est que le champ magnétique brise l'invariance par rotation, et donc de nouveaux opérateurs de bord marginalement non pertinents sont maintenant autorisés. Par exemple  $\nabla\phi_L(0, t)$  et  $\exp(i\sqrt{2\pi}\phi_L(0, t))$ . Ces opérateurs n'ont pas d'influence sur les valeurs des exposants au point fixe critique, mais, en revanche, ils modifient la façon dont on s'approche du point fixe, et, en particulier, les corrections logarithmiques au comportement en loi de puissance pour le cas isotrope.

## 5.4 Le liquide de Luttinger

Depuis peu, on est techniquement capable de réaliser des systèmes électroniques unidimensionnels, grâce à la technologie des nanotubes de carbone. Les nanotubes de carbone sont des molécules cylindriques d'un diamètre de l'ordre du nanomètre et d'une longueur de plusieurs micromètres. Ils sont composés d'atomes de carbone disposés sur un réseau hexagonal plan et enroulé comme du papier à cigarette. On montre que la large bande électronique est éclatée en deux sous-bandes d'électrons unidimensionnels à cause du confinement radial.

Le hamiltonien qui décrit les excitations du modèle est donné par l'équation (3.18) :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_s + \frac{2g_{1\perp}}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos(\sqrt{8\pi}\phi_s) + \frac{2g_{3\perp}}{(2\pi\alpha)^2} \int dx \cos(\sqrt{8\pi}\phi_c + 2k_F x). \quad (5.45)$$

Les secteurs de spin et de charge sont découplés, et donc les fonctions de corrélation qu'on va calculer vont se factoriser en une partie de spin et une partie de charge. Nous nous placerons à un remplissage arbitraire, mais en revanche, nous supposerons l'invariance par rotation du spin des électrons. Le paramètre  $K_c$  est un résidu des interactions effectives entre les électrons :  $K_c < 1$  signifie répulsion entre les électrons, alors que  $K_c > 1$  est le signe d'une attraction effective entre les électrons. Ainsi, les termes cinétiques du

hamiltonien ci-dessus s'écrivent :

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_c &= \frac{v_c}{2} \left[ K_c \Pi_c^2 + \frac{1}{K_c} (\nabla \phi_c)^2 \right], \\ \mathcal{H}_s &= \frac{v_s}{2} \left[ \Pi_s^2 + (\nabla \phi_s)^2 \right].\end{aligned}\tag{5.46}$$

Pour des spins isotropes, le terme en  $\cos \sqrt{8\pi\phi_s}$  est marginalement non pertinent, et va donc entrainer des corrections logarithmiques aux fonctions de corrélation. En ce qui concerne le secteur de charge, la pertinence de l'opérateur  $\cos \sqrt{8\pi\phi_c}$  va dépendre du remplissage de la bande électronique.

Dans le liquide de Luttinger, les opérateurs de spin sont remplacés par les opérateurs d'onde de densité de spin (SDW)  $c_{n\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^z c_{n\beta}$ , et le taux  $1/T_1$  est une sonde des fluctuations de spin du système. Dans sa version bosonisée, cet opérateur contient deux termes, l'un uniforme à  $k = 0$ , l'autre alterné à  $k = 2k_F$ . La partie alternée de cet opérateur s'écrit :

$$SDW_s^z = \sin \sqrt{2\pi}\phi_c \sin \sqrt{2\pi}\phi_s.\tag{5.47}$$

Puisque les secteurs de charge et de spin se factorisent dans le calcul des corrélations de cet opérateur, on est ramené à un problème qui, conceptuellement, n'est pas différent de celui de la chaîne de spins 1/2. Pour les corrélations de volume du système, on obtient donc :

$$\begin{aligned}\langle SDW_s^z(t) SDW_s^z(0) \rangle &\propto \langle e^{i\sqrt{2\pi}\phi_c(t)} e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_c(0)} \rangle \langle e^{i\sqrt{2\pi}\phi_s(t)} e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_s(0)} \rangle \\ &\sim \left[ \frac{T}{\sinh \pi T t} \right]^{1+K_c}\end{aligned}\tag{5.48}$$

Si on considère également la partie uniforme de cette corrélation, on obtient la forme suivante pour le  $1/T_1$  dans le volume:  $1/T_1 \propto T + T^{K_c}$ . Ce comportement est non universel ([56]), et si on confronte ce résultat aux résultats expérimentaux, on obtient une valeur numérique de  $K_c$  étonnamment grande, qui n'est pas compatible en particulier avec le modèle de Hubbard. Comme précisé plus haut, des corrections logarithmiques sont attendues, mais il est plus intéressant de les garder sous la main pour le cas avec bord qui nous préoccupe.

Dans le cas avec bord, la condition au bord est plus subtile à obtenir que dans le cas de la chaîne de spins 1/2. La présence d'une impureté conduit à des conditions au

bord de type Dirichlet sur les champs bosoniques. Pour cela, on requiert une aimantation moyenne nulle en  $x = 0$ :  $\langle S^z(x = 0) \rangle$ , ce qui conduit à  $\phi_s(0) = 0$  et  $\phi_c(0) = \sqrt{\pi/8}$ . La partie alternée de la corrélation SDW contribue au  $1/T_1$  via le produit :

$$\langle \sin \sqrt{2\pi} \phi_s(t) \sin \sqrt{2\pi} \phi_s(0) \rangle_{\phi_s(0)=0} \times \langle \sin \sqrt{2\pi} \phi_c(t) \sin \sqrt{2\pi} \phi_c(0) \rangle_{\phi_c(0)=\sqrt{\pi/8}} \quad (5.49)$$

La partie de spin dans l'équation (5.49) est strictement identique à celle de chaîne de spins 1/2. La partie de charge fait intervenir des fonctions sinus ; on ré-exprime le champ  $\phi_c$  en terme de sa composante chirale  $\phi_{cL}$  :

$$\phi_c(x, t) = \phi_{cL}(x, t) - \phi_{cL}(-x, t) + \sqrt{\pi/8}. \quad (5.50)$$

Il se trouve que les corrélations du champ  $\phi_c$  (dans le volume ou au bord) dépendent du remplissage. Le cas du volume, étudié ci-dessus, n'a été traité que dans l'hypothèse où on se trouve loin du demi-remplissage, et on peut corriger le tir au demi-remplissage en suivant la discussion présentée ci-dessous. Au demi-remplissage, le secteur de charge acquiert un gap dans le cas attractif, et le champ  $\phi_c$  prend une valeur moyenne qui minimise le cosinus ; cette valeur moyenne est  $\sqrt{\pi/8}$  et vérifie la contrainte de bord. Les corrélations de charge sont donc constantes, et seul le secteur de spin apporte une dépendance au  $1/T_1$ . Dans le cas répulsif, le cosinus est non pertinent, et on se retrouve dans la situation loin du demi-remplissage (voir ci-dessous).

Si on se trouve en revanche loin du demi remplissage, le cosinus est non pertinent, et la partie de charge de la corrélation s'écrit en deux points  $(x_1, t_1)$  et  $(x_2, t_2)$  arbitraires :

$$\langle \cos \sqrt{2\pi} [\phi_{cL}(x_1, t_1) - \phi_{cL}(-x_1, t_1)] \cos \sqrt{2\pi} [\phi_{cL}(x_2, t_2) - \phi_{cL}(-x_2, t_2)] \rangle \quad (5.51)$$

Cette fonction de corrélation se calcule :

$$C_\rho = \left( \frac{1}{x_1 x_2} \right)^{K\rho/2} \left( I + \frac{1}{I} \right), \quad (5.52)$$

où  $I$  est égal à :

$$\left[ \frac{(t_1 - t_2)^2 - (x_1 + x_2)^2}{(t_1 - t_2)^2 - (x_1 - x_2)^2} \right]^{K\rho/2}. \quad (5.53)$$



Lorsqu'on s'approche du bord, c'est à dire  $x_1$  et  $x_2$  de l'ordre de  $a$ , cette corrélation tend vers une constante, indépendante du temps. Ainsi, dans toute cette étude du liquide de Luttinger, le secteur de charge ne contribue pas au taux de relaxation  $1/T_1$ , et le secteur de spin contribue de la même façon que la chaîne de spins  $1/2$ . On en déduit, pour des spins isotropes :

$$1/T_1 \propto T^1 (\ln T)^4. \quad (5.54)$$

Ce comportement est universel car il ne dépend pas du paramètre d'interaction  $K_c$  qui caractérise les exposant anormaux dans les systèmes 1D. Il est à noter qu'il a été proposé récemment ([63, 64, 65]) d'utiliser la spectroscopie des photoémissions sur les liquides de Luttinger pour détecter les effets de bord. Dans ce cas, les mesures physiques sont sensibles aux propriétés spectrales du liquide de Luttinger, et font intervenir des exposants de bord, différents de ceux du volume.



# Chapitre 6

## Des fermions pour la chimie à une dimension

### 6.1 Préambule

Notre piètre compréhension des phénomènes hors d'équilibre par rapport aux phénomènes d'équilibre constitue un véritable obstacle à l'appréhension de nombreux systèmes naturels. Même les modèles les plus simples sont extrêmement complexes à aborder analytiquement. Dès les années 70, pourtant, des méthodes puissantes de groupe de renormalisation ont été étendues à l'étude de la dynamique des systèmes par Halperin, Hohenberg et Ma, puis par De Dominicis et Janssen. Les années 80 ont vu la naissance de nouvelles techniques permettant l'étude et la classification des propriétés des systèmes hors équilibre tels que les réactions limitées par diffusion.

L'étude en champ moyen des réactions limitées par diffusion conduit à des équations de cinétique chimique toute simples pour la densité spatiale moyenne, ce qui permet aisément de trouver les dépendances temporelles asymptotiques des différentes grandeurs physiques (chimiques) d'intérêt. A une dimension d'espace, ce traitement en champ moyen n'est plus valide, et on doit alors trouver un moyen pour tenir compte des fluctuations. Une tactique éprouvée depuis de nombreuses années, consiste à exprimer le modèle sous forme de chaîne de spins qui peut s'avérer intégrable.

Le modèle consiste en un grand nombre de marcheurs aléatoires, d'une ou plusieurs espèces, diffusant sur un réseau. Lorsqu'ils se rencontrent en un site (ou en des sites

voisins), ils peuvent réagir selon l'une des réactions suivantes, que l'on donne à titre d'exemple :

- Désexcitation :  $B \rightarrow A$  (ou  $\emptyset$ ) ;

Représente une décroissance radioactive ou une mort spontanée, un arbre qui brûle dans les modèles de déforestation.

- Annihilation :  $A + A \rightarrow \emptyset$ ,  $A + B \rightarrow \emptyset$  ;

Modélise l'annihilation des excitations énergétiques le long des chaînes de polyacétylène à une dimension.

- Coagulation :  $A + A \rightarrow A$  ;

Les excitations lumineuses dans le tétraméthylammonium trichlorure de manganèse (TMMC) peuvent coaguler. Il s'agit d'un exemple concret sur lequel on voit expérimentalement que les exposants de champ moyen ne sont pas en accord avec les résultats numériques ([68]).

- Piégeage :  $A + B \rightarrow B$  ;

L'hydrogène interstitiel est piégé dans un métal, tout comme les excitations lumineuses lors de la photosynthèse végétale.

- Contamination :  $A + B \rightarrow B + B$  ;

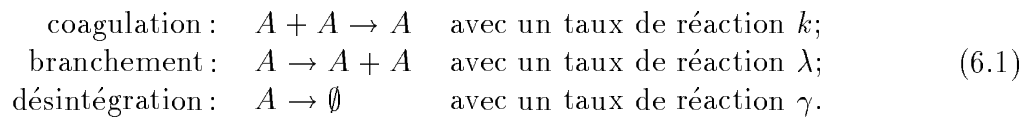
Cette étape autocatalytique intervient dans la réaction dite de Schlögl, qui décrit aussi le processus de percolation dirigée.

On peut gonfler cette liste au rythme de notre imagination, d'autant plus qu'elle ne contient que des réactions élémentaires impliquant au plus deux particules. Chaque espèce est caractérisée par une constante de diffusion ( $D_A, D_B, \dots$ ) et les distributions de particules à l'instant initial. Le problème de réaction diffusion est alors très simple à formuler : quelle est la densité d'une espèce donnée au temps  $t$ , quelle est sa répartition spatiale ? Les méthodes de cinétique chimique, qui négligent toute corrélation entre fluctuations, peuvent contenir des termes de diffusion si les conditions initiales ne sont pas spatialement homogènes. Cependant, en basse dimension, on s'attend à ce que les fluctuations locales

de densité persistent longtemps à cause de la lente diffusion et affecte la cinétique de champ moyen de manière importante.

## 6.2 Le modèle microscopique

Le réseau unidimensionnel est occupé à l'instant initial par une particule  $A$  avec probabilité  $\rho$  et inoccupé avec probabilité  $1 - \rho$ . Les particules  $A$  suivent une marche aléatoire sur ce réseau avec une constante de diffusion  $D$ . Nous imposons une contrainte d'exclusion, c'est à dire que chaque site est occupé par au plus une particule. De plus, les particules peuvent réagir entre elles, via les processus suivants :



A cause de la contrainte d'exclusion, les particules ne réagissent que si elles se trouvent sur des sites voisins; de même une particule ne pourra diffuser sur un site voisin que si celui-ci est inoccupé. Ces trois types de réactions, ainsi que le processus de diffusion pure définissent un processus de réaction-diffusion qui a été souvent étudié: il s'agit de la réaction de Schlögl qui appartient à la classe d'universalité de la percolation dirigée ([66]). La différence avec la percolation habituelle est que les liens qu'on dépose sur le réseau sont orientés dans une direction (qu'on appelle en général le temps, voir figure 6.1).

Il existe des extensions de ce modèle en dimension quelconque ([66, 67]), mais ce chapitre décrit une approche systématique à une dimension d'espace.

Si on considère la densité  $n(x, t)$  de particules en  $x$  à l'instant  $t$ , l'équation qui gouverne la cinétique de champ moyen est :

$$\partial_t n = D \partial_x^2 n + (\lambda - \gamma)n - (k + \lambda)n^2. \tag{6.2}$$

La contrainte d'exclusion empêche la réaction de branchement de créer plus de particules qu'il n'y a de sites sur le réseau. Cela se traduit par une contribution en  $\lambda n(n - 1)$  dans l'équation de champ moyen. Si on suppose l'uniformité spatiale, l'état stationnaire est

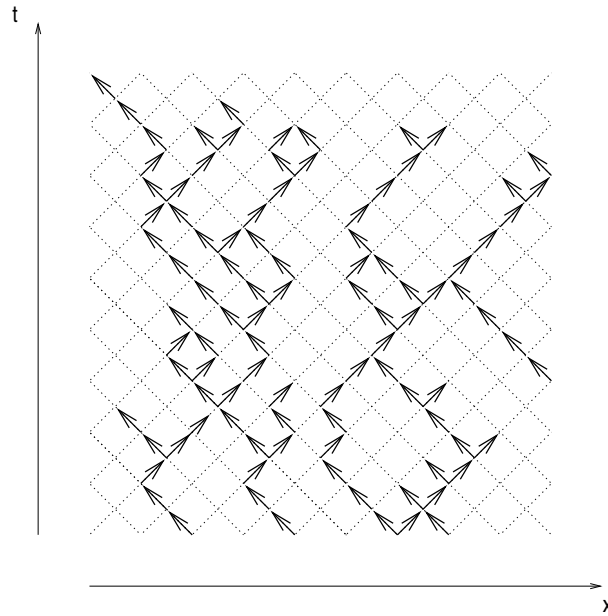


FIG. 6.1 - La percolation dirigée.

donné par :

$$n(t \rightarrow \infty) = \begin{cases} \frac{\lambda - \gamma}{k + \lambda} & \text{si } \lambda > \gamma \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (6.3)$$

Le champ moyen prédit donc une transition continue entre un état *actif* pour  $\gamma < \lambda$ , où une fraction finie de  $A$  survit indéfiniment, et un état absorbant dans lequel les  $A$  disparaissent à jamais. Dans toute la suite, nous utiliserons  $\gamma$  comme paramètre de contrôle et fixons tous les autres paramètres. Le champ moyen prédit donc une transition de phase du second ordre entre les deux états ; dans ce traitement la transition a lieu pour la valeur critique  $\gamma_c = \lambda$ . On en déduit une formule d'échelle pour la densité, faisant intervenir les différents exposants critiques du système :

$$n(t) = b^{-\frac{1+\eta}{2}} \mathcal{F}(b^{-z}t, b^{1/\nu}|\gamma - \gamma_c|). \quad (6.4)$$

Cette relation est valable pour  $b \gg 1$  et les arguments de  $\mathcal{F}$  fixés. Les exposants de champ moyen sont donc :  $\eta = 0$ ,  $z = 2$  et  $\nu^{-1} = 1/2$ . A la transition, la densité de particules à temps infini s'annule comme  $|\gamma - \gamma_c|^\beta$  lorsque  $\gamma \rightarrow \gamma_c^+$ , ce qui définit l'exposant  $\beta = 2\nu(1 + \eta)$ .

Du point de vue analytique, il existe très peu de résultats pour la percolation dirigée

en basse dimension ([69, 70]). Ce système est cependant important car il présente une transition de phase du second ordre dans son état stationnaire. Afin d'extraire des résultats analytiques, nous allons transformer ce système en une chaîne de spins puis en une théorie des champs fermionique. Cet arsenal technique permet *in fine* d'extraire les exposants critiques du modèle.

### 6.3 L'équation maîtresse et la chaîne de spins

Un microétat du système est caractérisé par l'ensemble des nombres d'occupation  $\{n_j\}_{j \in \mathbb{Z}}$  pour chaque site, défini par :

$$n_j = \begin{cases} 1 & \text{si le site } j \text{ est occupé par un } A \\ 0 & \text{si le site } j \text{ est inoccupé} \end{cases} \quad (6.5)$$

Définissons à présent la variable de *spin*  $s_j \equiv 2n_j - 1$ , et soit  $s \equiv \{s_j\}$  un microétat particulier du système, associé à un vecteur  $|s\rangle$  de l'espace de Hilbert. L'équation maîtresse du système gouverne l'évolution de la fonctionnelle de probabilité que le système soit dans la configuration  $s = s_i$  à l'instant  $t$ . On note cette probabilité  $P(s, t)$ . L'équation maîtresse est équivalente à l'équation d'évolution pour l'état défini par :

$$|\Phi(t)\rangle \equiv \sum_s P(s, t) |s\rangle \quad (6.6)$$

Cette équation d'évolution s'écrit :

$$\frac{d|\Phi(t)\rangle}{dt} = -\hat{H}|\Phi(t)\rangle \quad (6.7)$$

où  $\hat{H}$  est un opérateur d'évolution (appelé hamiltonien de façon abusive) agissant sur l'espace de Hilbert engendré par les vecteurs  $|s\rangle$ . Cet opérateur n'est pas forcément hermitien et nous sommes en temps imaginaire. En introduisant les matrices  $2 \times 2$  génératrices de  $SU(2)$   $\sigma_i^+$ ,  $\sigma_i^-$  et  $\sigma_i^z$  en chaque site (ces matrices augmentent, diminuent et comptent respectivement le nombre de particules au site  $i$ ), on exprime le hamiltonien sous la forme suivante :

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{diffusion}} + \hat{H}_{\text{désintégration}} + \hat{H}_{\text{branchement}} + \hat{H}_{\text{coagulation}} \quad (6.8)$$

où on a :

$$\hat{H}_{\text{diffusion}} = -\frac{D}{2} \sum_i \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_{i+1} \quad (6.9)$$

$$\hat{H}_{\text{désintégration}} = \gamma \sum_i \left( \frac{1}{2} \sigma_i^z - \sigma_i^- \right) \quad (6.10)$$

$$\hat{H}_{\text{branchement}} = -\frac{\lambda}{4} \sum_i (\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \sigma_i^+ + \sigma_{i+1}^+ \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^z + \sigma_{i+1}^+ \sigma_i^z) \quad (6.11)$$

$$\hat{H}_{\text{coagulation}} = \frac{k}{4} \sum_i (2\sigma_i^z - \sigma_i^- \sigma_{i+1}^- + \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \sigma_i^- \sigma_{i+1}^z - \sigma_{i+1}^- \sigma_i^z) \quad (6.12)$$

Dans les équations (6.9–6.12), nous avons retiré tous les termes constants. Ils assurent la conservation de la probabilité, mais ne jouent aucun rôle dans l'analyse qui suit. Avant de passer à la version théorie des champs de ce modèle, nous rappelons brièvement les propriétés du hamiltonien de cette chaîne de spins. Pour cela, nous introduisons un *état de projection*  $\langle \mathbf{p} |$  défini par :

$$\langle \mathbf{p} | \equiv \sum_s \langle s | \quad (6.13)$$

Etant donné une observable  $A(s)$ , nous appelons  $\hat{A}$  l'opérateur obtenu en remplaçant la variable  $s_i$  par l'opérateur  $\sigma_i^z$  dans l'expression explicite de  $A(s)$ . Par exemple, le choix  $A(s) = \frac{1}{2}(s_j + 1)$ , qui est le nombre de particules au site  $j$  conduit à  $\hat{A} = \frac{1}{2}(\sigma_j^z + 1)$ . La valeur moyenne de l'observable  $A(s)$  est donnée par ([72]) :

$$\langle A(s) \rangle(t) = \langle \mathbf{p} | \hat{A} | \Phi(t) \rangle \quad (6.14)$$

La conservation de la probabilité impose que  $\langle \mathbf{p} |$  est un état propre à gauche du hamiltonien avec la valeur propre 0 :

$$\langle \mathbf{p} | \hat{H} = 0 \quad (6.15)$$

Il en découle  $\forall t$ ,  $\langle \mathbf{p} | \Phi(t) \rangle = 1$ . Par ailleurs, le hamiltonien possède au moins un vecteur propre à droite avec la valeur propre 0 qui décrit l'état stationnaire du système. Les valeurs propres de  $\hat{H}$  ont toutes une partie réelle positive. On peut trouver de nombreux détails encore plus croustillants dans les revues de Alcaraz et al. ([73]) ou Henkel et al. ([74]).



Le calcul de la valeur moyenne d'une observable introduit une subtilité supplémentaire. En remarquant que  $\langle \mathbf{p} | = \langle -1 | e^{\sum_j \sigma_j^-}$ , on est ramené au calcul de :

$$\langle A(s) \rangle(t) = \langle -1 | \tilde{A}' e^{-\tilde{H}t} e^{\sum_j \sigma_j^-} | \Phi(0) \rangle \quad (6.16)$$

où  $\tilde{A}'$  et  $\tilde{H}$  se déduisent de  $\hat{A}$  et  $\hat{H}$  par commutation de l'exponentielle provenant du vecteur de projection. En remarquant que :

$$e^{\sigma_i^-} \sigma_i^+ = (\sigma_i^+ - \sigma_i^- - 2\sigma_i^+ \sigma_i^- + 1) e^{\sigma_i^-}, \quad (6.17)$$

on voit ces opérateurs s'obtiennent de la façon suivante : on les exprime en fonction de  $\sigma^+$  et  $\sigma^-$  seulement, et, pour chaque site  $j$ , on remplace  $\sigma_j^+$  par  $\sigma_j^+ - \sigma_j^- - 2\sigma_j^+ \sigma_j^- + 1$ . Ceci conduit à  $\tilde{A}$  et  $\tilde{H}$ . Dans  $\tilde{A}$ , on place tous les  $\sigma^+$  à gauche des  $\sigma^-$  et on met tous les  $\sigma^+$  à 0 car ils agissent à gauche sur l'état  $| -1 \rangle$ . Cela donne  $\tilde{A}'$ . Avec l'expression de  $\hat{H}$  de l'équation (6.8), on obtient pour  $\tilde{H}$  :

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & - \left( D + \frac{\lambda}{2} \right) \sum_i \left[ \sigma_i^- \sigma_{i+1}^+ + \sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- - 2\hat{n}_i \right] \\ & + (\gamma - \lambda) \sum_i \hat{n}_i \\ & + (\lambda + k - 2D) \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1} \\ & + \frac{1}{2} (\lambda + k) \sum_i \left[ \sigma_i^- \hat{n}_{i+1} + \hat{n}_i \sigma_{i+1}^- \right] \\ & - \frac{\lambda}{2} \sum_i \left[ \sigma_i^+ \hat{n}_{i+1} + \hat{n}_i \sigma_{i+1}^+ \right] \end{aligned} \quad (6.18)$$

où on a noté  $\hat{n}_i \equiv \sigma_i^+ \sigma_i^-$ . Le terme constant du hamiltonien a été omis, et pour le retrouver, il faudrait placer tous les  $\sigma^+$  à gauche des  $\sigma^-$  et mettre les  $\sigma^+$  à 0 pour la même raison que ci-dessus. Ceci donne l'opérateur  $\tilde{H}'$ , et on ajuste la constante de sorte que  $\langle -1 | \tilde{H}' = 0$ .

## 6.4 Les champs de fermions

### 6.4.1 Fermions et états cohérents

Le point de départ pour écrire la version fermionique du modèle est la transformation de Jordan-Wigner (3.20). Rappelons qu'on peut passer des opérateurs de spin aux opérateurs

de fermions au prix des termes *string* pour obtenir l'anticommutation des opérateurs fermioniques sur des sites différents à partir des opérateurs de spin qui commutent de site à site. On peut ré-écrire le terme *string* avec la notation  $\hat{n}_j = \sigma_j^+ \sigma_j^- = c_j^\dagger c_j$  :

$$e^{\pm i\pi \sum_{\ell < i} \hat{n}_\ell} = \prod_{\ell < i} (1 - 2\hat{n}_\ell) \quad (6.19)$$

Un exemple de fermionisation, pour le terme de diffusion seul :

$$\tilde{H}_{\text{diffusion}} = -D \sum_i \left[ c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i - 2\hat{n}_i + 2\hat{n}_i \hat{n}_{i+1} \right] \quad (6.20)$$

Cette expression est invariante sous la transformation de l'équation (6.17). Dans la partie quadratique, on reconnaît le processus de diffusion, qui se ramène à un laplacien. En revanche, la contrainte d'exclusion vient du terme quartique.

Comme nous l'avons vu, le calcul de la valeur moyenne d'une observable s'effectue de la façon suivante :

$$\langle A \rangle(t) = \langle -1 | \tilde{A}' e^{-\tilde{H}t} e^{\sum_i \sigma_i^-} | \Phi(0) \rangle \quad (6.21)$$

Nous nous restreignons au cas où les particules sont distribuées de manière aléatoire et indépendamment les unes des autres dans l'état initial, avec une densité locale  $\rho_j$  au site  $j$  ; la distribution initiale s'écrit donc :

$$P(n, t = 0) = \prod_j \left[ \rho_j \delta_{n_j, 1} + (1 - \rho_j) \delta_{n_j, 0} \right] \quad (6.22)$$

Sous ces hypothèses, on vérifie aisément

$$|\Phi'(0)\rangle \equiv e^{\sum_i \sigma_i^-} |\Phi(0)\rangle = e^{\sum_j \rho_j \sigma_j^+} | -1 \rangle \quad (6.23)$$

On appellera à partir de maintenant  $|0\rangle$  le vide (*i.e.* l'état sans particule) au lieu de  $| -1 \rangle$ . En bref, la moyenne d'une observable  $A$  s'écrit :

$$\langle A \rangle(t) = \langle 0 | \tilde{A}' e^{-\tilde{H}t} | \Phi'(0) \rangle \quad (6.24)$$

On ré-écrit le facteur exponentiel de l'équation (6.24) avec la formule de Trotter :

$$e^{-\tilde{H}t} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( 1 - \frac{\tilde{H}t}{N} \right)^N \quad (6.25)$$

Introduisons les états cohérents associés aux opérateurs de création et d'annihilation. Soit  $|\psi_{ij}\rangle$ , pour  $j = 0, \dots, N$  et  $i \in \mathbb{Z}$  un ensemble d'états cohérents associés à  $c_i$  et  $c_i^\dagger$ :

$$\begin{aligned} |\psi_{ij}\rangle &= e^{-\frac{1}{2}\psi_{ij}^* \psi_{ij}} e^{-\psi_{ij} c_i^\dagger} |0\rangle \\ \langle \psi_{ij}| &= \langle 0| e^{-\frac{1}{2}\psi_{ij}^* \psi_{ij}} e^{-c_i \psi_{ij}^*} \end{aligned} \quad (6.26)$$

Ces états cohérents sont indexés par une paire de variables de Grassmann conjuguées  $\psi_{ij}$  et  $\psi_{ij}^*$ . Elle vérifient par définition :

$$c_i |\psi_{ij}\rangle = \psi_{ij} |\psi_{ij}\rangle, \quad \langle \psi_{ij}| c_i^\dagger = \langle \psi_{ij}| \psi_{ij}^* \quad (6.27)$$

Avec la définition de (6.26) on vérifie que :

$$\langle \psi_{ij}| \psi_{ij}\rangle = 1 \quad (6.28)$$

et avec les conditions d'intégration  $\int d\psi \psi = \int d\psi^* \psi^* = 1$ , on a :

$$\int d\psi_{ij}^* d\psi_{ij} e^{-\psi_{ij}^* \psi_{ij}} \psi_{ij}^n \psi_{ij}^{*m} = \delta_{nm} \quad (6.29)$$

Ceci implique :

$$\int d\psi_{ij}^* d\psi_{ij} |\psi_{ij}\rangle \langle \psi_{ij}| = \mathbf{1} \quad (6.30)$$

Cette équation généralisée à l'état :

$$|\psi_j\rangle \equiv \otimes_i |\psi_{ij}\rangle \quad (6.31)$$

conduit à

$$\begin{aligned} e^{-\tilde{H}t} &= \int \prod_{j=0}^N \prod_i [d\psi_{ij}^* d\psi_{ij}] |\psi_{j=N}\rangle \langle \psi_N| 1 - \tilde{H} \frac{t}{N} |\psi_{N-1}\rangle \dots \\ &\quad \langle \psi_1| 1 - \tilde{H} \frac{t}{N} |\psi_0\rangle \langle \psi_0| \end{aligned} \quad (6.32)$$

On a donc besoin des quantités

$$H_{j,j-1} \equiv \frac{\langle \psi_j | \tilde{H} | \psi_{j-1} \rangle}{\langle \psi_j | \psi_{j-1} \rangle}, \quad j = 1, \dots, N \quad (6.33)$$

ainsi que de

$$\langle \psi_j | \psi_{j-1} \rangle = e^{-\sum_i \psi_{ij}^* (\psi_{ij} - \psi_{i,j-1})} e^{\frac{1}{2} \sum_i \psi_{ij}^* \psi_{ij} - \frac{1}{2} \sum_i \psi_{i,j-1}^* \psi_{i,j-1}} \quad (6.34)$$

Pour obtenir  $H_{j,j-1}$  dans l'écriture sous ordre normal de  $\tilde{H}$  les opérateurs d'annihilation  $c_\ell$  par  $\psi_{\ell,j-1}$  et les opérateurs de création par  $c_m^\dagger$  by  $\psi_{mj}^*$ . La projection sur l'état initial  $|\Phi'(0)\rangle$  s'écrit

$$\langle \psi_{j=0} | \Phi'(0) \rangle = \dots e^{\rho_i \psi_{i0}^*} e^{\rho_{i+1} \psi_{i+1,0}^*} \dots \equiv P_i[\psi^*(x, 0)] \quad (6.35)$$

De façon similaire, on trouve

$$\langle 0 | \tilde{A}' | \psi_{j=N} \rangle = A'(\psi_N) \quad (6.36)$$

où  $A'$  est une fonction de  $\psi_N$  dont la détermination est donnée dans le paragraphe 6.4.4.

## 6.4.2 La théorie des champs continue

On décompose  $H_{j+1,j}$  sous la forme :

$$H_{j+1,j} = E_{j+1,j} + O_{j+1,j} \quad (6.37)$$

où  $E_{j+1,j}$  et  $O_{j+1,j}$  désignent les composantes paires et impaires de  $H_{j+1,j}$ , respectivement. dans la limite  $\Delta t \rightarrow 0$ , le produit ordonné

$$\overleftarrow{\Pi} \equiv (1 - \Delta t H_{N,N-1}) \dots (1 - \Delta t H_{1,0}) \quad (6.38)$$

ne se réduit pas à une simple exponentielle car les termes du produit ne commutent pas.

Pour une suite de variables grassmanniennes  $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ , on a ([75]):

$$e^{\alpha_N} \dots e^{\alpha_1} = e^{\sum_n \alpha_n + \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^{n-1} \alpha_n \alpha_m} \quad (6.39)$$

En ré-exprimant  $\overleftarrow{\Pi}$  sous la forme

$$\overleftarrow{\Pi} = \exp \left[ -\Delta t \sum_j H_{j+1,j} + \Delta t^2 \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{\ell=0}^{j-1} O_{j+1,j} O_{\ell+1,\ell} \right] \quad (6.40)$$

On obtient à la limite continue :

$$\begin{aligned} \overline{\Pi} = \exp \left[ - \int_0^{t_f} dt H[\psi(t), \psi^*(t)] \right. \\ \left. + \int_0^{t_f} dt dt' \Theta(t-t') \mathcal{O}[\psi(t), \psi^*(t)] \mathcal{O}[\psi(t'), \psi^*(t')] \right] \end{aligned} \quad (6.41)$$

On définit l'action  $S$  par

$$\begin{aligned} S[\bar{\psi}, \psi] = \int dx dt \bar{\psi} \partial_t \psi \\ + \int dt H[\psi, \bar{\psi}] \\ - \int dt dt' \Theta(t-t') \mathcal{O}[\psi(t), \bar{\psi}(t)] \mathcal{O}[\psi(t'), \bar{\psi}(t')] \end{aligned} \quad (6.42)$$

où la notation  $H[\psi(t), \bar{\psi}(t)]$  signifie qu'on a remplacé les opérateurs de création et d'annihilation dans  $\hat{H}$  par leurs valeurs propres. La quantité  $\mathcal{O}[\psi(t), \bar{\psi}(t)]$  est la composante impaire de  $H[\psi(t), \bar{\psi}(t)]$ . On obtient donc une action non locale dans l'espace et dans le temps.

De plus, en utilisant Eq. (6.39), on trouve

$$P_i[\bar{\psi}(x, 0)] = \exp \left[ \sum_i \rho_i \bar{\psi}_i(0) + \sum_{i < j} \rho_i \rho_j \bar{\psi}_i(0) \bar{\psi}_j(0) \right], \quad (6.43)$$

ce qui nous permet de calculer la valeur moyenne d'une observable  $A$  sous forme d'une intégrale de chemin :

$$\langle A \rangle(t_f) = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi A'[\psi(x, t_f)] e^{-S[\bar{\psi}, \psi]} P_i[\bar{\psi}(x, 0)]. \quad (6.44)$$

### 6.4.3 Comparaison avec les méthodes bosoniques

Lorsque la contrainte d'exclusion n'est pas imposée ([76, 77]), il peut y avoir un nombre arbitraire de particules au même site, et un traitement par des méthodes bosoniques est possible. Les opérateurs bosoniques  $(a_i, a_i^\dagger)$  remplacent les opérateurs de spin et interviennent dans l'expression de l'opérateur d'évolution  $\hat{H}$ . L'état de projection s'écrit :

$$\langle \mathbf{p} | = \langle 0 | e^{\sum_i a_i} \quad (6.45)$$

et l'analogie bosonique de l'Eq. (6.17) est  $e^{a_i} a_i^{\dagger n} = (a_i^\dagger + 1)^n e^{a_i}$ . La commutation du facteur  $e^{\sum_i a_i}$  à travers  $e^{-\hat{H}t}$  peut être effectuée directement, mais il est possible, par un

shift du champ associé aux opérateurs de création, de faire cette transformation dans l'intégrale fonctionnelle elle-même. Ici, il semble qu'une telle transformation non linéaire ayant le même effet que Eq. (6.17) soit difficile à trouver et à mettre en œuvre.

#### 6.4.4 Valeur moyenne de quelques observables

L'observable intéressante est le nombre local de particules  $A = n_i$ . Donc  $\hat{A} = \hat{n}_i$  et  $\tilde{A} = \hat{n}_i + \sigma_i^-$ , et par conséquent :  $\tilde{A}' = \sigma_i^-$ . Puisque

$$\langle 0 | \tilde{A}' = \langle 0 | c_i, \quad (6.46)$$

On peut écrire la valeur moyenne du nombre de particules au site  $i$  sous forme d'intégrale fonctionnelle :

$$\langle n_i \rangle(t) = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \psi_i(t) e^{-S[\psi, \bar{\psi}]} P_i[\bar{\psi}] \quad (6.47)$$

Une autre quantité physique d'importance est la fonction de corrélation à deux points à temps égaux  $A = n_i n_j$ , avec  $i < j$ . L'opérateur  $\tilde{A}'$  associé s'écrit :

$$\tilde{A}' = \sigma_i^- \sigma_j^- = \prod_{\ell=i}^{j-1} (1 - 2\hat{n}_\ell) c_j c_i \quad (6.48)$$

d'où  $\langle 0 | \tilde{A}' = \langle 0 | c_j c_i$ , ce qui conduit à la fonction de corrélation

$$\langle n_i n_j \rangle(t) = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \psi_j(t) \psi_i(t) e^{-S[\psi, \bar{\psi}]} P_i \quad (6.49)$$

Pour  $i = j$ , la formule ci-dessus ne fonctionne plus, et on trouve  $\tilde{A}' = c_i$ , si bien qu'on retombe sur la relation  $\langle n_i^2 \rangle = \langle n_i \rangle$ . D'autres corrélations à temps égaux se calculent de manière similaire.

## 6.5 La réaction d'annihilation

Avant de considérer la percolation dirigée, nous allons mettre en exergue l'intérêt du formalisme fermionique sur l'exemple de la réaction d'annihilation  $A + A \rightarrow \emptyset$  ; appelons  $k$  le taux de réaction. En supprimant l'interaction de cœurs durs, on obtient le cas traité par

Lee et Cardy ([71]) qui ont montré que la densité de particules décroît comme  $1/\sqrt{t}$  avec une amplitude universelle, indépendante de  $k$ . Pour une distribution initiale de particules homogène, l'équation de champ moyen s'écrit :

$$\frac{dn}{dt} = -kn^2. \quad (6.50)$$

On en déduit le comportement asymptotique de la densité de particules A au temps  $t$  :  $\rho_a(t) \sim 1/\sqrt{t}$ .

Avec le formalisme décrit ci-dessus, on obtient la théorie fermionique suivante ([80]) :

$$\hat{H}_{annihilation} = k \sum_i [c_i c_{i+1} + \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}]. \quad (6.51)$$

On constate que le choix  $k = 2D$  () donne lieu à un hamiltonien total (en tenant compte de la partie de diffusion) quadratique, ce qui signifie en terme de chaîne de spins que la chaîne est intégrable. Le hamiltonien peut donc être diagonalisé. Dans le cas général, la transformation non linéaire sur  $\sigma^+$  conduit à des termes cubiques :

$$\tilde{H}_{annihilation} = k \sum_i [c_i c_{i+1} - 2\hat{n}_i \xi_i \partial_x c_i + \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}]. \quad (6.52)$$

où on a introduit une notation pour le terme string non local :

$$\xi_i(t) \equiv \prod_{\ell \leq i} e^{-2\bar{\psi}_\ell(t) \psi_\ell(t)} \quad (6.53)$$

L'action qui s'en déduit est :

$$\begin{aligned} S[\bar{\psi}, \psi] = & \int dx dt [\bar{\psi}(\partial_t - D\partial_x)\psi + k\psi\partial_x\psi + (k - 2D)\bar{\psi}\psi\partial_x(\bar{\psi}\psi) + k\psi\bar{\psi}\xi\partial_x\psi] \\ & - 4k^2 \int dx dt dx' dt' (\psi\bar{\psi}\xi\partial_x\psi)(x, t)\Theta(t - t')(\psi\bar{\psi}\xi\partial_{x'}\psi)(x', t'). \end{aligned} \quad (6.54)$$

Le terme quartique est non pertinent, et le terme  $\psi\partial_x\psi$  ne contribuera jamais aux développements perturbatifs pour ne pas violer la causalité. Ainsi, les vertex d'interaction ne sont pas renormalisés et les propriétés d'échelle sont données par une analyse dimensionnelle naïve :

$$\rho_A(t) = \langle \psi \rangle = b^{-1} \mathcal{F}(t/b^2, k) = \frac{1}{\sqrt{t}} \mathcal{F}(1, k). \quad (6.55)$$

On a bien retrouvé la décroissance en  $1/\sqrt{t}$ , mais l'amplitude n'est *a priori* plus universelle. L'outil numérique doit pouvoir confirmer ces résultats.

## 6.6 La percolation dirigée

### 6.6.1 L'action du problème

Revenons à présent au problème de la percolation dirigée. Il est décrit par l'opérateur d'évolution (6.18). On passe à la limite continue, et l'action s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
S[\bar{\psi}, \psi] = & \int dx dt [\bar{\psi}(\partial_t + D\sigma - D\partial_x^2)\psi + Dg_0\bar{\psi}\xi(\partial_x\psi - \partial_x\bar{\psi})] \\
& + \int dx dy dt dt' [u_1\{\bar{\psi}\xi\partial_x\psi\}_{(x,t)}\Theta(t-t')\{\bar{\psi}\xi\partial_y\bar{\psi}\}_{(y,t')} \\
& + u_2\{\bar{\psi}\xi\partial_x\bar{\psi}\}_{(x,t)}\Theta(t-t')\{\bar{\psi}\xi\partial_y\psi\}_{(y,t')} \\
& + u_3\{\bar{\psi}\xi\partial_x\psi\}_{(x,t)}\Theta(t-t')\{\bar{\psi}\xi\partial_y\psi\}_{(y,t')} \\
& + u_4\{\bar{\psi}\xi\partial_x\bar{\psi}\}_{(x,t)}\Theta(t-t')\{\bar{\psi}\xi\partial_y\bar{\psi}\}_{(y,t')}]
\end{aligned} \tag{6.56}$$

Les couplages nus sont  $u_1 = u_2 = -u_3 = -u_4 = (Dg_0)^2$ . Un simple comptage de puissance en unités de moment fournit les dimensions des champs et des couplages :

$$[\psi] = [\bar{\psi}] = \frac{1}{2}, \quad [x^2] = [t] = -2, \quad [g_0^2] = 1 \tag{6.57}$$

### 6.6.2 Une hypothèse

Dans l'action finale, les termes non locaux exponentiels :

$$\xi(x, t) = \exp(-2 \int_{-\infty}^x dy \bar{\psi}\psi(y, t)) \tag{6.58}$$

jouent un rôle crucial. Dans un développement perturbatif, ces termes auront pour effet de rajouter une masse non constante dans l'espace. Malheureusement, cette façon de procéder est élégante, mais nous n'avons pu la mettre en œuvre jusqu'au bout. Une autre approche consiste à développer l'exponentielle en puissances de  $\int_{-\infty}^x dy \bar{\psi}\psi(y, t)$ . Cela a pour conséquence de produire une infinité de nouveaux vertex tels que :

$$\frac{(-2)^n}{n!} Dg_n \bar{\psi}\xi\partial_x\psi(x, t) \left( \int_{-\infty}^x dy \bar{\psi}\psi(y, t) \right)^n \tag{6.59}$$

Ces termes ont tous la même dimension que le couplage original. Un traitement perturbatif de ces couplages est impossible car il engendre une infinité de couplages, ce qui nous pousse



à émettre une conjecture assez forte sur la structure de la théorie : nous supposons que la théorie admet un unique point fixe stable, les opérateurs engendrés étant non pertinents au point fixe, et l'algèbre du groupe de renormalisation restant fermée. Cela impose alors en particulier des relations entre les différents  $g_n$  au point fixe. Dans ce qui suit, nous nous limiterons au traitement à une boucle, on l'on voit effectivement que cette conjecture est robuste et permet de trouver une relation entre  $g_0$  et  $g_1$  au point fixe.

### 6.6.3 Les fonctions de vertex

Compte tenu de l'hypothèse effectuée ci-dessus, on est en mesure de déployer l'artillerie du groupe de renormalisation. Appelons  $\Gamma^{(p,q)}$  la fonction de vertex à  $p$  pattes externes  $\bar{\psi}$  et  $q$  pattes externes  $\psi$ . Des calculs très usuels à une boucle donnent :

$$\begin{aligned} \Gamma^{(1,1)}(k, \omega) = & -i\omega \left( 1 - \frac{g_0^2}{2} \int \frac{dq}{2\pi} \frac{q^2}{(q^2 + \sigma)^2} \right) \\ & + Dk^2 \left( 1 - g_0^2 \int \frac{dq}{2\pi} \frac{q^2 \sigma}{(q^2 + \sigma)^3} \right) \\ & + D\sigma + Dg_0^2 \int \frac{dq}{2\pi} \frac{q^2}{q^2 + \sigma} + \mathcal{O}(k^4, \omega^2) \end{aligned} \quad (6.60)$$

De même, on trouve pour la dérivée de la fonction de vertex à 3 pattes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Gamma^{(1,2)}}{\partial (ik_3)}(\{k_i = 0, \omega_i = 0\}_{i=1,2,3}) = & 2Dg_0 \left( 1 + 4g_0(g_0 - g_1) \int \frac{dq}{2\pi} \frac{q^4}{(q^2 + \sigma)^3} \right. \\ & \left. - 5g_0(g_0 - g_1) \int \frac{dq}{2\pi} \frac{q^2}{(q^2 + \sigma)^2} \right) \end{aligned} \quad (6.61)$$

Les diagrammes apparaissant dans ces deux équations sont donnés dans l'article 3, ainsi que les valeurs explicites des intégrales. La série de perturbation s'effectue en puissances du couplage adimensionné  $g_0^2/\sqrt{\sigma}$ , et nous sommes intéressés par le régime critique (de masse nulle)  $\sigma \rightarrow 0$  ; c'est à ce stade que la renormalisation doit dépasser le traitement perturbatif naïf pour extraire l'information physique.

### 6.6.4 Renormalisation

Nous définissons les champs et couplages renormalisés suivants :

$$\begin{aligned}
\psi &= Z_\psi^{1/2} \psi_R \\
\bar{\psi} &= Z_\psi^{1/2} \bar{\psi}_R \\
D &= Z^{-1} Z_D D_R \\
(\bar{\psi}\psi) &= Z_\sigma^{-1} (\bar{\psi}\psi)_R \\
g_0 &\equiv Z_D^{-1} Z_\psi^{-1/2} Z_g g_{0R} \sigma_R^{1/4}
\end{aligned} \tag{6.62}$$

Les facteurs de renormalisation  $Z$  sont déterminés par les conditions suivantes :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \Gamma_R^{(1,1)}}{\partial(-i\omega)}(0,0) = 1, \quad \frac{\partial \Gamma_R^{(1,1)}}{\partial k^2}(0,0) = D_R, \quad \Gamma_R^{(1,1)}(0,0) = D_R \sigma_R \\
\frac{\partial \Gamma_R^{(1,2)}}{\partial(i k_3)}(\{0,0\}) = 2D_R g_R
\end{aligned} \tag{6.63}$$

Il s'écrivent au premier ordre :

$$Z_\psi = 1 + \frac{g_{0R}^2}{8}, \quad Z_D = 1 + \frac{g_{0R}^2}{16}, \quad Z_\sigma = 1 + \frac{g_{0R}^2}{4}, \quad Z_g = 1 + \frac{7g_{0R}(g_{1R} - g_{0R})}{16} \tag{6.64}$$

En introduisant la longueur de corrélation renormalisée  $\xi \equiv \sigma_R^{-1/2}$ , les fonctions de Wilson à une boucle  $\gamma_i \equiv -\xi \frac{d \ln Z_i}{d \xi}$ ,  $i = \psi, D, \sigma, g$  s'écrivent :

$$\gamma_\psi \simeq -\frac{g_{0R}^2}{8}, \quad \gamma_D \simeq -\frac{g_{0R}^2}{16}, \quad \gamma_\sigma \simeq -\frac{g_{0R}^2}{4}, \quad \gamma_g \simeq -\frac{7g_{0R}(g_{1R} - g_{0R})}{16} \tag{6.65}$$

La fonction beta s'en déduit immédiatement :

$$\beta_g \equiv -\xi \frac{dg_R}{d\xi} = g_R \left( -\frac{1}{2} + \gamma_D + \frac{1}{2} \gamma_\psi - \gamma_g \right) \tag{6.66}$$

En supposant qu'il existe un point fixe physique invariant d'échelle, les interactions pertinentes engendrées par les termes non locaux doivent s'annuler, ce qui implique  $g_{1R}^* = \frac{3}{2} g_{0R}^*$ . Le flot du groupe de renormalisation possède alors un point fixe stable unique

$g_{0R}^{*2} = \frac{16}{3}$ , et les exposants critiques du système sont alors donnés par :

$$\begin{aligned}\eta &= \gamma_\psi^* \simeq -\frac{2}{3} \\ z &= 2 - \gamma_D^* + \gamma_\psi^* \simeq \frac{5}{3} \\ \nu^{-1} &= 2 - \gamma_D^* + \gamma_\sigma^* \simeq \frac{4}{3}\end{aligned}\tag{6.67}$$

Ces valeurs numériques sont en accord raisonnable avec les résultats numériques de Dickman ([83]) ( $\eta = -0.405$ ,  $z = 1.767$ ,  $\nu^{-1} = 1.142$ ). Ils sont aussi du même degré de précision que les résultats en  $4 - \epsilon$  :  $\eta = -\epsilon/6$ ,  $z = 2 - \epsilon/12$ ,  $\nu^{-1} = 2 - \epsilon/4$ .

## 6.7 Conclusion

Notre méthode fermionique souffre de certains points faibles. Les valeurs numériques pour les exposants critiques sont en accord très partiel avec les vraies valeurs obtenues par simulation. En effet notre méthode ne contient aucun petit paramètre pour justifier le développement à une boucle. On est un peu dans la situation d'un développement en  $\epsilon$  où on prendrait  $\epsilon = 1$  ou  $2$ . On peut aussi s'interroger sur la convergence du développement des exposants critiques en puissance des couplages renormalisés. Mais ce qui nous fait désespérément défaut, c'est un argument fort en faveur de la renormalisabilité de la théorie, propriété que l'on pressent ; il nous a manqué un argument de symétrie pour l'établir de façon convaincante. Un autre point faible de ce formalisme est la lourdeur de sa mise en œuvre, et sans doute les problèmes liés à la renormalisabilité proviennent-ils de là.

Toutefois, nous avons construit une nouvelle technique systématique, alternative au développement en  $\epsilon$ . Cette technique doit s'appliquer à de nombreux systèmes, et un de ses intérêts est qu'elle s'accommode particulièrement bien de la topologie à une dimension. Ce formalisme doit s'appliquer à d'autres processus de réaction-diffusion tels que les marches aléatoires avec processus de branchement et d'annihilation. On peut espérer que l'approche proposée fournisse un point de vue qualitativement meilleur que par les théories des champs bosoniques ([81, 82]).



# Conclusion

L'essentiel de cette thèse est consacré à l'étude des chaînes de spin sous faible désordre ou contenant des impuretés. Nous avons montré comment la technique de bosonisation pouvait décrire les excitations de la chaîne de spin 1 sous faible désordre. Nous avons étendu la méthode de développement de produits d'opérateurs, bien connue dans les théories conformes perturbées, au cas du faible désordre. La nouveauté par rapport au cas pur est la présence d'opérateurs non locaux dans la théorie. Cette non localité est prise en compte par notre traitement, et on en déduit les fonctions beta à une boucle, qui prennent en compte correctement la compétition entre désordre et interactions lorsque tous deux sont pertinents. Nous avons en particulier démontré la stabilité de la phase de Haldane sous faible désordre.

La présence d'impuretés non magnétiques dans la chaîne de spin  $1/2$  se traite différemment que le faible désordre. En effet, les impuretés coupent la chaîne, et on obtient une théorie avec bord. On démontre alors que certaines quantités physiques, comme par exemple le temps de relaxation longitudinal du spin nucléaire de l'impureté est sensible aux exposants de bord du système, qui sont en général différents des exposants de bulk.

Enfin, dans un dernier chapitre, nous proposons une méthode fermionique pour l'étude des processus de réaction-diffusion à  $(1+1)$  dimensions. Cette méthode est lourde à mettre en œuvre, mais elle permet d'accéder à certains résultats de manière plus convaincante qu'une méthode bosonique, par exemple dans la réaction d'annihilation, et qui prédit un coefficient non universel pour la loi de décroissance de la densité. Nous l'avons appliquée à un processus qui appartient à la classe d'universalité de la percolation dirigée, et nous avons obtenu une valeur approchée des exposants critiques du système.



# Annexe A

## Développement de produits d'opérateurs (OPE)

### A.1 Notation complexe

En temps réel, on a  $\partial_\mu^2 = \partial_x^2 - 1/v^2 \partial_t^2$ . Si on pose  $\tau = -ivt$ , alors  $\partial_\mu^2 = \partial_x^2 + \partial_\tau^2$ . Passons à présent à la variable complexe :

$$\begin{aligned} z &= x + i\tau = x + vt, \\ \bar{z} &= x - i\tau = x - vt. \end{aligned} \tag{A.1}$$

On obtient alors :

$$\begin{aligned} (\partial_\mu \phi)^2 &= 4\partial_z \phi \partial_{\bar{z}} \phi \\ \partial_z \tilde{\phi} &= \frac{1}{K} \partial_{\bar{z}} \phi \\ \partial_{\bar{z}} \tilde{\phi} &= -\frac{1}{K} \partial_z \phi \\ \partial_z \tilde{\phi} \partial_{\bar{z}} \tilde{\phi} &= -\frac{1}{K^2} \partial_z \phi \partial_{\bar{z}} \phi \end{aligned} \tag{A.2}$$

En notations complexes, les corrélations s'écrivent :

$$\begin{aligned} \langle \phi(z, \bar{z}) \phi(0, 0) \rangle &\sim -\frac{K}{4\pi} \ln z \bar{z} \\ \langle \phi(z, \bar{z}) \phi(\tilde{0}, 0) \rangle &\sim -\frac{K}{4\pi} \ln \frac{\bar{z}}{z} \\ G_L = \langle \phi_L(z) \phi_L(0) \rangle &\sim -\frac{K}{4\pi} \ln z \end{aligned} \tag{A.3}$$

## A.2 OPE locaux

Une théorie conforme perturbée par des opérateurs pertinents s'écrit près du point fixe :

$$S = S^* + \sum_i \lambda_i \int \mathcal{O}_i d^2r.$$

On développe n'importe quelle fonction de corrélation en puissances des couplages sans dimension  $g_i = a^{2-x_i} \lambda_i$ , où  $x_i$  est la dimension d'échelle de l'opérateur  $\mathcal{O}_i$ . La fonction de corrélation s'écrit de la façon suivante:  $\langle ..\mathcal{O}_i(z)\mathcal{O}_j(0).. \rangle$ . On remplace ces deux opérateurs par leur OPE lorsque  $|z| \rightarrow 0$  :

$$\mathcal{O}_i(z).\mathcal{O}_j(0) \sim \sum_k \frac{1}{|z|^{x_k-x_i-x_j}} C_{ijk} \mathcal{O}_k(0).$$

La corrélation ne doit pas dépendre du cut-off  $a$  :  $a\partial_a = 0$ . Le terme d'ordre 2 en interaction peut être réabsorbé par une redéfinition des constantes de couplage. On obtient la fonction  $\beta$  à une boucle :

$$\beta(g_k) = (2 - x_k)g_k - \pi \sum_{ij} C_{ijk} g_i g_j + O(g^3).$$

Les OPE pour les opérateurs de vertex et de vortex ne nécessitent aucune connaissance des théories conformes pour être calculés. Avec l'identité  $e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]}$ , on obtient :

$$\begin{aligned} e^{i\beta\phi(z)} e^{-i\beta\phi(0)} &\sim \frac{1}{|z|^{\beta^2 K/2\pi}} \left[ 1 + i\beta(z\partial_z\phi(0) + \bar{z}\partial_{\bar{z}}\phi(0)) \right. \\ &\quad \left. - \beta^2 \left( |z|^2 \partial_z\phi(0)\partial_{\bar{z}}\phi(0) + \frac{z^2}{2}(\partial_z\phi)^2 + \frac{\bar{z}^2}{2}(\partial_{\bar{z}}\phi)^2 \right) + \dots \right] \end{aligned}$$

D'autres OPE utiles, qui se démontrent en développant l'exponentielle en série :

$$\begin{aligned} \partial_z\phi(z)e^{i\beta\phi(0)} &\sim \frac{i\beta K}{4\pi z} e^{i\beta\phi(0)} + \dots \\ \partial_z\tilde{\phi}(z)e^{i\beta\phi(0)} &\sim \frac{i\beta}{4\pi z} e^{i\beta\phi(0)} + \dots \\ \partial_{\bar{z}}\tilde{\phi}(z)e^{i\beta\phi(0)} &\sim -\frac{i\beta}{4\pi z} e^{i\beta\phi(0)} + \dots \\ \partial_z\phi(z)e^{i\beta\tilde{\phi}(0)} &\sim -\frac{i\beta}{4\pi\bar{z}} e^{i\beta\tilde{\phi}(0)} + \dots \\ \partial_{\bar{z}}\phi(z)e^{i\beta\tilde{\phi}(0)} &\sim \frac{i\beta}{4\pi z} e^{i\beta\tilde{\phi}(0)} + \dots \end{aligned} \tag{A.4}$$



## A.3 OPE non locaux

Soit  $\phi(x, t)$  un champ bosonique. Nous cherchons à évaluer la plus forte singularité engendrée par l'insertion de l'opérateur  $I(z_1, z_2) = H(z_1).H(z_2)$  dans une fonction de corrélation lorsque  $z_1$  tend vers  $z_2$ , où l'opérateur  $H$  est non local :

$$H(z) = \int dt' e^{i\alpha\phi(x,t)} e^{-i\alpha\phi(x,t')} \quad (\text{A.5})$$

On a alors :

$$I(z_1, z_2) = \int dt'_1 dt'_2 e^{i\alpha\phi(x_1,t'_1)} e^{-i\alpha\phi(x_1,t'_1)} e^{i\alpha\phi(x_2,t'_2)} e^{-i\alpha\phi(x_2,t'_2)}. \quad (\text{A.6})$$

Du fait de l'intégration sur  $t'_1$  et  $t'_2$ , la plus forte singularité sera obtenue pour  $t_1 = t_2$  et sera donc en  $1/\Delta x$ ,  $\Delta x = |x_1 - x_2|$ . La plus forte singularité est obtenue lorsqu'on considère l'OPE de la première avec la dernière exponentielle et l'OPE des deux exponentielles du milieu.

On introduit la fonction régularisatrice à support compact  $f_b(t)$  (voir figure) et d'intégrale unité et convergeant vers  $\delta$  au sens des distributions lorsque  $b$  tend vers 0.

En injectant la relation suivante dans l'expression de  $I(z_1, z_2)$  :

$$b^2 \left[ f_b(|t_1 - t'_2|) \cdot f_b(|t'_1 - t_2|) + \left( \frac{1}{b^2} - f_b(|t_1 - t'_2|) \cdot f_b(|t'_1 - t_2|) \right) \right] = 1, \quad (\text{A.7})$$

on obtient :

$$I(z_1, z_2) = \int dt'_1 dt'_2 \left[ b f_b(|t_1 - t'_2|) e^{i\alpha\phi(x_1,t'_1)} e^{-i\alpha\phi(x_1,t'_1)} \right] \cdot \left[ b f_b(|t'_1 - t_2|) e^{i\alpha\phi(x_2,t'_2)} e^{-i\alpha\phi(x_2,t'_2)} \right] + \text{termes hautement non locaux.} \quad (\text{A.8})$$

Nous supposons dans la suite que la singularité la plus grande ne provient que du premier terme. Les divergences des termes hautement non locaux ne sont pas contrôlées

et seront omises. On note dans la suite  $I_{loc}(z_1, z_2)$  ce premier terme, et on ne gardera que ce terme tout en prenant la limite  $b \rightarrow 0$ . Toutefois, afin de capturer le bon comportement provenant de la non localité, on fera  $b \rightarrow 0$  après  $\Delta x \rightarrow 0$ .

Le calcul de l'OPE au sein des deux crochets présents dans l'expression de  $I_{loc}(z_1, z_2)$  conduisent à l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
I_{loc}(z_1, z_2) &= \int dt'_1 dt'_2 \frac{1}{[(\Delta x)^2 + u^2(t_1 - t'_2)^2]^\heartsuit} \frac{1}{[(\Delta x)^2 + u^2(t_2 - t'_1)^2]^\heartsuit} \\
&\times [1 + i\alpha(\Delta x + iu(t_1 - t'_2))\partial_z\phi(z_1) + hc] \\
&\times [1 + i\alpha(-\Delta x - iu(t_2 - t'_1))\partial_{\bar{z}}\phi(z_2) + hc] \\
&\times b^2 f_b(|t_1 - t'_2|) \cdot f_b(|t'_1 - t_2|),
\end{aligned} \tag{A.9}$$

où  $\heartsuit = \alpha^2 K/4\pi$ . Les termes linéaires dans le temps donnent zéro après intégration temporelle. En posant  $y_i = (t_1 - t'_i)/\Delta x$ , il vient finalement :

$$I_{loc}(z_1, z_2) = \int \frac{2\alpha^2}{\Delta x^{4\heartsuit}} \frac{dy_1}{(1 + u^2 y_1^2)^\heartsuit} \frac{dy_2}{(1 + u^2 y_2^2)^\heartsuit} \partial_z\phi(z_1) \partial_{\bar{z}}\phi(z_2) b^2 f_b(|y_1|\Delta x) \cdot f_b(|y_2|\Delta x) \tag{A.10}$$

La bonne prescription de passage à la limite est de prendre d'abord  $\Delta x \rightarrow 0$ , donc  $b f_b(|y_1|\Delta x) \rightarrow 1$ , pour tout  $b$ . Puis, lorsque  $z_1, z_2 \rightarrow z$  :

$$I_{loc}(z_1, z_2) \sim \frac{2\alpha^2}{\Delta x^{4\heartsuit}} g(u) \partial_z\phi(z) \partial_{\bar{z}}\phi(z). \tag{A.11}$$

où :

$$g(u) = \left[ \int \frac{dy}{(1 + u^2 y^2)^\heartsuit} \right]^2. \tag{A.12}$$

## Annexe B

### Corrélations de la chaîne S=1/2

Dans cet appendice, nous exposons les résultats du calcul des fonctions de corrélation de spin pour la chaîne de spins 1/2 avec bord. Chaque corrélation contient une partie uniforme et une partie alternée. Nous avons, en deux points  $x_1$  et  $x_2$  arbitraires :

$$\langle S^z(x_1, 0)S^z(x_2, t) \rangle_u \sim -\frac{K}{4\pi^2} \left[ \frac{T^2}{\text{sh}^2(\pi T(-x_2 - x_1 + t))} + \frac{T^2}{\text{sh}^2(\pi T(x_2 + x_1 + t))} \right. \\ \left. + \frac{T^2}{\text{sh}^2(\pi T(x_2 - x_1 + t))} + \frac{T^2}{\text{sh}^2(\pi T(-x_2 + x_1 + t))} \right]. \quad (\text{B.1})$$

$$\langle S^z(x_1, 0)S^z(x_2, t) \rangle_a \sim (-)^{x_1 - x_2} \left[ \frac{T^2}{\text{sh}(2\pi T x_1)\text{sh}(2\pi T x_2)} \right]^K \times \quad (\text{B.2}) \\ \left\{ \left[ \frac{\text{sh}(\pi T(-x_2 - x_1 + t))\text{sh}(\pi T(x_2 + x_1 + t))}{\text{sh}(\pi T(x_2 - x_1 + t))\text{sh}(\pi T(-x_2 + x_1 + t))} \right]^K \right. \\ \left. - \left[ \frac{\text{sh}(\pi T(x_2 - x_1 + t))\text{sh}(\pi T(-x_2 + x_1 + t))}{\text{sh}(\pi T(-x_2 - x_1 + t))\text{sh}(\pi T(x_2 + x_1 + t))} \right]^K \right\}.$$

$$\langle S^+(x_1, 0)S^-(x_2, t) \rangle_u \sim \frac{T^{2K+\frac{1}{2K}}}{[\text{sh}(2\pi T x_1)\text{sh}(2\pi T x_2)]^{K-\frac{1}{4K}}} \times \quad (\text{B.3})$$

$$\left\{ \frac{[\text{sh}(\pi T(x_2 + x_1 + t))\text{sh}(\pi T(-x_2 - x_1 + t))]^{K-\frac{1}{4K}}}{[\text{sh}(\pi T(x_2 - x_1 + t))\text{sh}(\pi T(-x_2 + x_1 + t))]^{K+\frac{1}{4K}-1}} \right. \\ \left. \left[ \frac{1}{\text{sh}^2(\pi T(-x_2 + x_1 + t))} + \frac{1}{\text{sh}^2(\pi T(x_2 - x_1 + t))} \right] \right. \\ \left. + \frac{[\text{sh}(\pi T(x_2 - x_1 + t))\text{sh}(\pi T(-x_2 + x_1 + t))]^{K-\frac{1}{4K}}}{[\text{sh}(\pi T(x_2 + x_1 + t))\text{sh}(\pi T(-x_2 - x_1 + t))]^{K+\frac{1}{4K}-1}} \right. \\ \left. \left[ \frac{1}{\text{sh}^2(\pi T(-x_2 - x_1 + t))} + \frac{1}{\text{sh}^2(\pi T(x_2 + x_1 + t))} \right] \right\}. \quad (\text{B.4})$$

$$\langle S^+(x_1, 0)S^-(x_2, t) \rangle_s \sim (-)^{x_1-x_2} \quad (\text{B.5}) \\ \left[ \frac{T^2 \text{sh}(\pi T 2x_1) \text{sh}(\pi T 2x_2)}{\text{sh}(\pi T(-x_2 - x_1 + t)) \text{sh}(\pi T(x_2 + x_1 + t)) \text{sh}(\pi T(x_2 - x_1 + t)) \text{sh}(\pi T(-x_2 + x_1 + t))} \right]^{\frac{1}{4K}}.$$

Pour obtenir les expressions au bord, il suffit de prendre  $x_1 = x_2 = a$ .

# Bibliographie

- [1] J. P. Renard et al. Europhys. Lett. **3**, 945 (1987);
- [2] J. C. Bonner et M. E. Fisher, Phys. Rev. **133**,
- [3] R. B. Griffiths, Phys. Rev. **135**, A640 (1964).
- [4] M. Takahashi, Phys. Rev. B **43**, 5788 (1990).
- [5] S. Ma et al. Phys. Rev. Lett. **24**, 3571 (1992).
- [6] O. Golinelli, T. Jolicœur et R. Lacaze, J. Phys.: Condens. Matter C **5**, 1399 (1993).
- [7] T. Sakai, M. Takahashi, Phys. Rev. B **43**, 13383 (1991).
- [8] T. Takeushi et al. Journ. Phys. Soc. Jap. **61**, 3262 (1992).
- [9] I. Affleck, Phys. Rev. B **43**, 3215 (1990).
- [10] V. L. Pokrovsky et A. L. Talapov, Theory of incommensurate crystals, Soviet scientific reviews (1984).
- [11] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Third edition, Oxford Science Publications (1996).
- [12] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag (1994).
- [13] F. D. M. Haldane, Phys. Lett. **93A**, 464 (1983); Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [14] I. Affleck, D. Haldane, Phys. Rev. B **36**, 5291 (1987)
- [15] O. Golinelli, T. Jolicœur et R. Lacaze, Phys. Rev. B **50**, 3037 (1994).

- [16] Thèse, Université Paris XI (1995).
- [17] U. Schollwöck, T. Jolicœur, T. Garel, Phys. Rev. B ,
- [18] M. Oshikawa, J. Phys.: Condens. Matter **4**, 7469 (1992).
- [19] D. Arovas et A. Auerbach, Phys. Rev. B **38**, 316 (1988).
- [20] R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **50**, 1395 (1983).
- [21] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **51**, 605 (1983).
- [22] T. Kennedy et H. Tasaki, Phys. Rev. B **45**, 304 (1992).
- [23] T. Kennedy, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 5737 (1990).
- [24] S. Miyashita et S. Yamamoto, Phys. Rev. B **48**, 913 (1993).
- [25] M. Hagiwara et a., Phys. Rev. Lett. **65**, 3181 (1990).
- [26] C. A. Doty et D. S. Fisher, Phys. Rev. B**45**, 2167 (1992).
- [27] R. Shankar, Int. Jour.of Mod. Phys. B **4**, 2371 (1990).
- [28] D. S. Fisher, Phys. Rev. B**50**, 3799 (1994); Phys. Rev. B**51**, 6411 (1995).
- [29] S. K. Ma, C. Dasgupta, et C. K. Hu, Phys. Rev. Lett. **43**, 1434 (1979); C. Dasgupta et S. K. Ma, Phys. Rev. B**22**, 1305 (1980).
- [30] J. Cardy, Cours école d'été, Les Houches (1988).
- [31] M. Mézard, G. Parisi et M. A. Virasoro, Spin glass theory and beyond, World Scientific (1987).
- [32] H. J. Schulz, Phys. Rev. B**34**, 6372 (1986).
- [33] M. den Nijs et K. Rommelse, Phys. Rev. B**40**, 4709 (1989).
- [34] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb et H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
- [35] R. A. Hyman et K. Yang, Phys. Rev. Lett. **78**, 1783 (1997).

- [36] C. Monthus, O. Golinelli et Th. Jolicœur, Phys. Rev. Lett. **79**, 3254 (1997).  
C. Monthus, O. Golinelli et Th. Jolicœur, Phys. Rev. B. **58**, 805 (1998).
- [37] T. Giamarchi et H. J. Schulz, Phys. Rev. **B37**, 325 (1988); J. Phys. (Paris) **49**, 819 (1988).
- [38] Y. Nishiyama, *preprint* cont-mat/9805110.
- [39] S. Fujimoto et N. Kawakami, Phys. Rev. **B 54**, 11018 (1996).
- [40] Y. Imry et S. K. Ma, Phys. Rev. Lett. **35**, 1399 (1975).
- [41] E. Orignac et T. Giamarchi, Phys. Rev. **B57**, 5812 (1998).
- [42] J. Timonen et A. Luther, J. Phys. **C18**, 1439 (1985).
- [43] V. J. Emery, in *Highly Conducting One-Dimensional Solids*, ed. by J. T. DeVreese, R. E. Evrard et V. E. Van Doren, Plenum Press, New York (1979). See also I. Affleck, in *Fields, Strings et Critical Phenomena*, ed. by E. Brézin et J. Zinn-Justin, Elsevier Science Publishers B. V., Amsterdam (1989).
- [44] M. P. M. den Nijs, Physica **111A**, 273 (1982).
- [45] I. Affleck, Les Houches (1988).
- [46] K. Hida, Preprint, cond-mat/9903014.
- [47] X. Wang et S. Mallwitz, Phys. Rev. B **53**, R492 (1996).
- [48] J. F. Di Tusa et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 1857 (1994).
- [49] D. Canet, La RMN, concepts et méthodes, InterEditions (1991).
- [50] J. Cardy, Nucl. Phys. **B240**, 514 (1984), *ibid.*, **B270**, 186 (1986), *ibid.*, **B275**, 200 (1986).
- [51] T. Moriya, Prog. Theor. Phys. **16**, 23 (1956).  
T. Moriya, Prog. Theor. Phys. **28**, 371 (1962).
- [52] S. Sachdev, Phys. Rev. **B50**, 13006 (1994).

- [53] A. W. Sandvik, Phys. Rev. **B52**, 9831 (1995).
- [54] M. Takigawa, N. Motoyama, H. Eisaki et S. Uchida, Phys. Rev. Lett. **76**, 4612 (1996).
- [55] V. Barzykin, Preprint cond-mat/9904250 (1999).
- [56] See e. g. the contribution by D. Jérôme, in *Organic Superconductors: from (TMTSF)<sub>2</sub>PF<sub>6</sub> to Fullerenes*, p. 405, M. Dekker, New York, 1994.
- [57] S. Eggert et I. Affleck, Phys. Rev. **B46**, 10866 (1992)
- [58] I. Affleck, D. Gepner, H. J. Schulz et T. Ziman, J. Phys. **A22**, 511 (1989).
- [59] R. R. P. Singh, M. Fisher et R. Shankar, Phys. Rev. **B39**, 2562 (1989).
- [60] S. Eggert, I. Affleck et M. Takahashi, Phys. Rev. Lett. **73**, 332 (1994).
- [61] N. Motoyama, H. Eisaki et S. Uchida, Phys. Rev. Lett. **76**, 3212 (1996).
- [62] V. Barzykhin et I. Affleck, e-print cond-mat/9810075.
- [63] S. Eggert, A. Mattsson et J. M. Kinarets, Phys. Rev. **B56**, 15537 (1997).
- [64] S. Eggert, H. Johannesson et A. Mattsson, Phys. Rev. Lett. **76**, 1505 (1996).
- [65] A. Mattsson, S. Eggert et H. Johannesson, Phys. Rev. **B56**, 15615 (1997).
- [66] J. B. Bronzan et J. W. Dash, Phys. Rev. **D 10**, 4208 (1974).  
P. Grassberger et A. de la Torre, Ann. Phys. NY **122**, 373 (1979).  
J. L. Cardy et R. L. Sugar, J. Phys. A **13**, L423 (1980).  
H. K. Janssen, Z. Phys. B **42**, 151 (1981).
- [67] R. C. Brouwer, M. A. Furman et M. Moshe, Phys. Lett. B **76**, 213 (1978).  
R. C. Brouwer, M. A. Furman et K. Subbarao, Phys. Rev. **D 15**, 1756 (1977).
- [68] R. Kroon, H. Fleurent, R. Sprik, Phys. Rev. E **47**, 2462 (1992).
- [69] T. M. Liggett, *Interacting particle systems* (Springer, New York 1985).



- [70] R. Dickman in: *Nonequilibrium statistical mechanics in one dimension*, V. Privman ed. (Cambridge University Press, Cambridge 1997).
- [71] B. Lee, J. Cardy, J. Stat. Phys. **80**, 871 (1995).
- [72] U. Felderhof, Rep. Math. Phys. **1**, 219 (1970).
- [73] F. C. Alcaraz, M. Droz, M. Henkel et V. Rittenberg, Ann. Phys. (NY) **230**, 250 (1994).
- [74] M. Henkel, E. Orlandini et J. Santos, Ann. Phys. (NY) **259**, 163 (1997).
- [75] P. Degiovanni, F. Delduc et E. Mandonnet, *Le spin 1/2 en champ magnétique par l'intégrale des chemins*, Rapport de stage ENS Lyon, Laboratoire de Physique Théorique (1995).
- [76] L. Peliti, J. Physique **46**, 1469 (1985).
- [77] J. L. Cardy in: *The mathematical beauty of physics*, J.-M. Drouffe et J.-B. Zuber eds. (World Scientific, Saclay 1996).
- [78] G. Parisi, J. Stat. Phys. **23**, 49 (1980).
- [79] J. L. Cardy, *preprint* cond-mat 9806098.
- [80] V. Brunel et F. van Wijland, *unpublished*.
- [81] J. Cardy et U. C. Täuber, Phys. Rev. Lett. **77**, 4780 (1996), et J. Stat. Phys. **90**, 1 (1998).
- [82] R. Kree, B. Schaub et B. Schmittman, Phys. Rev. **A 39**, 2214 (1989).  
F. van Wijland, K. Oerding et H. J. Hilhorst, Physica **A 251**, 179 (1998).
- [83] R. Dickman, *preprint* cond-mat 9902304.

# Articles

## Résumé

Cette thèse regroupe trois travaux qui concernent respectivement la chaîne de spins 1 désordonnée, les impuretés non magnétiques dans la chaîne de spins 1/2 et les processus de réaction-diffusion.

La chaîne de spins 1 sous faible désordre est étudiée par la bosonisation abélienne et le groupe de renormalisation. Cette technique permet de prendre en compte la compétition entre le désordre et les interactions, et prédit le devenir des différentes phases de la chaîne de spins 1 anisotrope sous plusieurs types de désordre. L'un des résultats est la grande stabilité de la phase de Haldane, et l'instabilité de la phase antiferromagnétique sous champ magnétique aléatoire, qui sont prouvés par des arguments de groupe de renormalisation.

Un deuxième travail utilise les impuretés non magnétiques comme sondes locales des corrélations dans la chaîne de spins 1/2. Dans le cas où les impuretés sont couplées au bord de la chaîne, je prédis un comportement en température du taux de relaxation du spin nucléaire des impuretés ( $1/T_1$ ) radicalement différent du cas où ces mêmes impuretés sont couplées à la chaîne tout entière. Ceci peut en particulier être utilisé pour mesurer les exposants de surface des systèmes quantiques unidimensionnels.

Le dernier travail traite des processus réaction-diffusion à une dimension dont la matrice de transfert s'exprime comme un modèle de spin. La transformation de Jordan-Wigner permet d'obtenir une théorie des champs fermionique dont les exposants critiques se déduisent du groupe de renormalisation. Cette nouvelle approche fournit une méthode alternative aux développements en  $\epsilon$ , et semble validée par l'accord raisonnable avec les résultats numériques pour la réaction de Schlögl.

**Mots clefs :** chaînes de spins antiferromagnétiques, bosonisation, groupe de renormalisation, désordre, impuretés non magnétiques, processus réaction-diffusion