Hamiltoniens effectifs pour des aimants quantiques sous champ magnétique

Andreas Abendschein

▶ **To cite this version:**

Andreas Abendschein. Hamiltoniens effectifs pour des aimants quantiques sous champ magnétique. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2008. Français. NNT : . tel-00346488

HAL Id: tel-00346488

https://theses.hal.science/tel-00346488

Submitted on 11 Dec 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *l'Université Toulouse III - Paul Sabatier*
Discipline ou spécialité : *Physique Théorique*

Présentée et soutenue par *Andreas ABENDSCHEIN*
Le *23 octobre 2008*

Titre :
Hamiltoniens effectifs pour des
aimants quantiques sous champ magnétique

JURY
Jean-Paul MALRIEU (Président)
Claude BERTHIER (Rapporteur)
Frédéric MILA (Rapporteur)
Fakher F. ASSAAD (Examinateur)
Pierre PUJOL (Examinateur)
Sylvain CAPPONI (Directeur de thèse)

Ecole doctorale : *Sciences de la Matière*
Unité de recherche : *Laboratoire de Physique Théorique*
Directeur(s) de Thèse : *Sylvain CAPPONI*
Rapporteurs : *(s'ils ne font pas partie des membres du jury)*

UNIVERSITÉ DE TOULOUSE
UNIVERSITÉ PAUL SABATIER

LABORATOIRE DE PHYSIQUE
THÉORIQUE

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de

Docteur en Sciences
Spécialité Physique Théorique

Hamiltoniens effectifs pour des aimants quantiques sous champ magnétique

par
Andreas ABENDSCHEIN

Soutenue le 23 octobre 2008 devant la commission d'examen :

Mr. Jean-Paul MALRIEU	*LCPQ, Toulouse*	Président
Mr. Claude BERTHIER	*GHMFL, Grenoble*	Rapporteur
Mr. Frédéric MILA	*EPFL, Lausanne*	Rapporteur
Mr. Fakher F. ASSAAD	*Universität Würzburg*	Examinateur
Mr. Pierre PUJOL	*LPT, Toulouse*	Examinateur
Mr. Sylvain CAPPONI	*LPT, Toulouse*	Directeur de thèse

Préface

La physique des solides suscite beaucoup d'intérêt en offrant la possibilité d'étudier des effets quantiques de manière expérimentale et théorique. Ce domaine a connu une évolution dynamique et aujourd'hui il existe une grande variété de méthodes expérimentales permettant d'analyser les propriétés de ces matériaux. Du côté théorique, la description de la matière condensée par des électrons fortement corrélés constitue un problème de grande complexité dont le traitement par des méthodes analytiques et surtout numériques a fait des progrès importants dans les deux dernières décennies.

Les travaux présentés dans ce manuscrit de thèse traitent de systèmes magnétiques de basse dimensionalité sous champ magnétique. Plus précisément, nous cherchons à dériver des hamiltoniens effectifs qui décrivent les propriétés essentielles de la physique de basse énergie de systèmes de dimères couplés que nous considérons. Dans le chapitre I, nous motivons cette étude par une présentation de composés qui sont des exemples d'aimants quantiques unidimensionnels et bidimensionnels. En particulier, nous mettons un accent sur des expériences montrant des plateaux d'aimantation lors du processus d'aimantation. Une introduction des notions indispensables de la modélisation de la matière condensée sert à faciliter la compréhension et interprétation des résultats expérimentaux. Dans le chapitre II, nous consolidons la modélisation théorique en introduisant une représentation de dimères qui trouve une correspondance dans d'autres modèles, comme celui des bosons de cœur dur. Grâce à la correspondance entre ces modèles, nous sommes capables de discuter un problème en utilisant différentes perspectives. Nous abordons la physique en une dimension qui se distingue de celle en deux dimensions puisqu'en une dimension les quasi-particules du liquide de Fermi ne peuvent pas exister et on observe des excitations collectives. La discussion de la théorie inclut également la dérivation de la courbe d'aimantation d'un système à partir de son état fondamental et une revue de certaines phases que l'on trouve dans le modèle de bosons de cœur dur en deux dimensions.

Les méthodes numériques appliquées dans cette thèse sont introduites dans le chapitre III. Cette partie technique traite de la diagonalisation exacte, une méthode très puissante qui permet d'accéder à toutes les observables d'un système. Son désavantage est la limitation à des relativement petits systèmes, ce qui motive la dérivation de modèles effectifs en utilisant la méthode « Contractor Renormalization (CORE) » que nous discutons en détails. Cette méthode non perturbative peut être appliquée à une grande variété de systèmes, unidimensionnels ou bidimensionnels,

frustrés ou non, que l'on ne peut pas traiter avec certaines autres méthodes numériques performantes.

Les résultats de notre étude se trouvent dans les chapitres IV, V, VI et VII. L'échelle de spin sous champ magnétique, que nous considérons dans le chapitre IV, est un système quasi-unidimensionnel très connu et bien étudié, qui nous sert à tester l'approche CORE. Nous discutons la fiabilité et la convergence de CORE pour cet exemple et trouvons un critère alternatif afin de sélectionner les états qui forment la base de CORE. Ceci est effectué en dérivant la courbe d'aimantation de l'échelle de spin frustrée et en analysant l'existence de plateaux d'aimantation. La bicouche de Heisenberg sous champ magnétique, que nous abordons dans le chapitre V, est un système bidimensionnel qui permet une approche CORE d'une certaine similarité par rapport à l'approche à l'échelle de spin. Nous considérons des termes de saut et d'interaction de particules du modèle effectif dans le contexte d'une transition entre une phase superfluide et une phase solide et donnons des arguments pour l'existence d'une phase supersolide. Le chapitre VI est consacré à l'étude de la chaîne de dimères orthogonaux sous champ magnétique qui permet la dérivation d'un modèle effectif classique pour des aimantations inférieures à un demi de la valeur saturée. Avec son modèle effectif, l'approche CORE explique la série infinie de plateaux que l'on trouve pour ce modèle. Enfin, le chapitre VII étudie le réseau de Shastry-Sutherland sous champ magnétique. Nous présentons des travaux théoriques qui visent à expliquer les expériences sur le composé $SrCu_2(BO_3)_2$, une réalisation du réseau de Shastry-Sutherland, révélant plusieurs plateaux d'aimantation qui sont vivement discutés. Notre approche CORE pour ce problème permet de dériver des modèles effectifs avec des termes de saut et d'interaction de particules que nous comparons avec d'autres approches théoriques. Nous comparons nos prédiction faites à partir d'un modèle effectif à des expériences récentes.

Table des matières

Préface **i**

I. Contexte expérimental et théorique **1**

1. Représentation des électrons fortement corrélés 1
2. Revue expérimentale de systèmes sous champ magnétique 4
   2.1. Systèmes quasi-unidimensionnels sous champ magnétique 4
   2.2. Systèmes quasi-bidimensionnels sous champ magnétique 14
3. Conclusion partielle 21

II. Notions sur les aimants quantiques en une et deux dimensions **23**

1. Description des dimères sous champ magnétique avec l'exemple de l'échelle de spin . 24
2. Courbe d'aimantation et phases correspondantes 28
3. Systèmes unidimensionnels 33
4. Systèmes bidimensionnels 38
5. Conclusion partielle 44

III. Méthodes numériques **45**

1. Diagonalisation exacte 46
   1.1. Algorithme de Lanczos 47
   1.2. Algorithme de Davidson 48
   1.3. Calcul d'observables 50
   1.4. Notions sur une implémentation efficace 52
   1.5. Convergence et effets de taille finie 55
2. La méthode de « Contractor Renormalization (CORE) » 57
   2.1. Le groupe de renormalisation dans l'espace réel « naïf » 58
   2.2. Le groupe de renormalisation dans l'espace réel avec des interactions effectives 60
   2.3. Le procédé de CORE 64
   2.4. Quelques précisions sur le procédé 66
   2.5. Exemples simples de l'application de CORE 68
3. Conclusion partielle 71

IV. L'échelle de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg sous champ magnétique **73**
1. L'approche CORE la plus simple 74
2. Le choix de la base de CORE 79
3. Conclusion partielle 89

V. La bicouche de Heisenberg **91**
1. La bicouche de Heisenberg anisotrope 91
2. La bicouche de Heisenberg frustrée 98
3. Conclusion partielle 100

VI. La chaîne de dimères orthogonaux sous champ magnétique **101**
1. Le modèle microscopique 101
2. L'approche de CORE à différentes portées 104
3. Conclusion partielle 109

VII. Le réseau de Shastry-Sutherland sous champ magnétique **111**
1. Le modèle microscopique et des résultats théoriques pour le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ . . 112
   1.1. La théorie des perturbations jusqu'au quatrième ordre 114
   1.2. Des approches théoriques alternatives 116
2. L'approche de CORE à différentes portées 119
   2.1. Sur la validité de notre approche de CORE 120
   2.2. Évolution d'amplitudes de processus avec la portée de CORE 122
3. Résultats de diagonalisation exacte du modèle effectif 129
4. Conclusion partielle 138

Conclusion générale et perspectives **139**

Publications **141**

Bibliographie **143**

Remerciements **151**

Chapitre I

Contexte expérimental et théorique

Ce chapitre introduit le contexte théorique et expérimental d'aimants quantiques sous champ magnétique. Dans la section 1, nous illustrons les notions indispensables des électrons fortement corrélés et présentons les modèles théoriques correspondants. Nous discutons également des théorèmes importants dans le contexte de la physique de basse dimensionalité en absence ou présence d'un champ magnétique. Ces notions servent à faciliter la compréhension des expériences avec des composés réels sous champ magnétique qui motivent cette thèse et que nous présentons dans la section 2. L'accent est mis sur des composés, décrits avec des modèles unidimensionnels et bidimensionnels, qui montrent des plateaux d'aimantation.

1 Représentation des électrons fortement corrélés

Dans la description des propriétés électroniques des solides, le liquide de Fermi est un modèle qui a connu beaucoup de succès malgré sa simplicité. Introduit par Landau [1–3], le liquide de Fermi établit que les propriétés physiques d'un grand nombre d'électrons interagissants sont qualitativement les mêmes que celles du gaz d'électrons sans interaction dont les paramètres sont renormalisés par les interactions. Le fait que ce modèle soit capable de bien décrire les propriétés macroscopiques de la majorité des métaux est tout à fait remarquable.
Dans cette théorie, les excitations élémentaires sont des quasi-particules qui correspondent à des électrons avec des propriétés renormalisées par les interactions. Leur vecteur d'onde k et leur énergie $E(k) = k^2/(2m^*)$ sont bien définis avec une masse effective m^* qui est généralement plus grande que la masse d'un électron libre. Contrairement au gaz d'électrons libres, la fonction spectrale d'une quasi-particule n'est pas un pic δ, mais plutôt un pic lorentzien. Il est centré sur $\omega = E(k)$ et sa largeur est proportionnelle à $(E - E_F)^2$ où E_F est l'énergie de Fermi qui est typiquement de l'ordre de quelques eV dans les solides. Comme l'énergie 1eV correspond à peu près à une température de 10^4K, les propriétés thermodynamiques sont essentiellement contrôlées par les excitations de basse énergie autour du niveau de Fermi. Remarquons, par contre, que le modèle du liquide de Fermi est limité à des systèmes de dimension $\mathcal{D} \geq 2$ et échoue en une dimension.

Comme nous le discutons dans la section 3 du chapitre II, en une dimension, il n'existe pas de quasi-particules et les excitations sont des modes *collectifs* de charge et de spin.
L'intérêt dans les systèmes de basse dimensionalité s'explique, outre une modélisation relativement simple du côté théorique, par l'importance accrue des fluctuations quantiques. Grâce au théorème de Mermin-Wagner [4, 5] on sait que les fluctuations quantiques empêchent la formation d'un ordre à longue distance quelle que soit la température en une dimension et à température finie en deux dimensions. Autrement dit, en une dimension, il ne peut pas exister de brisure de symétrie continue dans des systèmes quantiques avec interactions à courte portée et en dimension deux, ceci n'est le cas qu'à température finie. Un vrai ordre, comme un état Néel [6] qui brise la symétrie continue SU(2) de rotation de spin, n'est donc pas possible en une dimension ainsi qu'en deux dimensions pour T$\neq$0. Dans des systèmes de basse dimensionalité, on observe donc une compétition entre différents états possibles avec un diagramme de phase riche en phases conventionnelles et exotiques.

Le modèle de Hubbard

Le modèle le plus élémentaire dans la théorie de la matière condensée pour décrire les corrélations électroniques est le modèle de Hubbard [7–11] qui est exactement soluble en une dimension [12], mais pas en deux ou trois dimensions. Puisque le principe de Pauli est respecté, il existe quatre états $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ et $|\uparrow\downarrow\rangle$ sur une site. Dans les solides, on observe que l'interaction coulombienne est écrantée et décroît avec la distance. Dans le modèle de Hubbard, cet effet est pris en compte avec une seule interaction $U > 0$ entre des électrons sur le même site en négligeant les interactions à plus longue distance. En plus, on a l'intégrale de transfert t qui décrit un saut d'un électron d'un site à un autre site premier voisin. Avec ces deux termes, le modèle de Hubbard à une bande se présente comme suit :

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j\rangle,\ \sigma} \left(c^{\dagger}_{j,\sigma} c_{i,\sigma} + c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{j,\sigma}\right) + U \sum_{i} n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \tag{I.1}$$

où $c^{\dagger}_{j,\sigma}$ ($c_{j,\sigma}$) est l'opérateur de création (d'annihilation) d'un électron de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ au site j. L'opérateur $n_{i,\sigma} = c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{i,\sigma} = 0, 1$ décrit la densité électronique dans l'état σ sur le site i. Ce modèle permet facilement d'inclure des interactions à plus longue distance, comme dans le modèle de Hubbard étendu, ou de généraliser à plusieurs bandes.
On remarque la symétrie U(1) du modèle de Hubbard, c'est-à-dire la conservation du nombre total de particules $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$. Le spin total $\mathbf{S}$ est également conservé et le modèle est invariant par rapport à la rotation du spin. Cette symétrie SU(2) implique en particulier la conservation du spin selon la direction $\vec{z}$, donc $N_{\uparrow} - N_{\downarrow}$ est conservé. Le moment total est conservé grâce à l'invariance du modèle envers des translations du réseau. Nous remarquons également que dans le cas d'un réseau bipartite, l'énergie de l'état fondamental ne dépend pas du signe du terme de saut t en raison d'une symétrie particule-trou.
Considérons le modèle de Hubbard au demi-remplissage : en une dimension, le système est isolant

dès que $U > 0$, et en dimension $\mathcal{D} \geq 2$, on observe une transition de Mott [13–15] entre un phase métallique pour une faible interaction U et une phase isolante pour $U \gg t$. Dans la limite de forte interaction $U \gg t$ et en utilisant la théorie des perturbations, on peut montrer l'existence d'une interaction effective entre deux électrons du type Heisenberg $J\ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ avec un couplage antiferromagnétique $J = 4t^2/U > 0$.

Le modèle de Heisenberg

Le modèle de Heisenberg antiferromagnétique [6, 11] décrit donc un isolant de Mott avec le hamiltonien

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

et les opérateurs de spins $\mathbf{S}_i = c_{is}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{s,s'} c_{is}$ avec les matrices de Pauli $\boldsymbol{\sigma}$. Dans la section 1 du chapitre II, nous rappelons que les états propres à deux sites de l'interaction de Heisenberg sont un singulet $\big(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\big)/\sqrt{2}$ et les triplets $\big\{\big(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\big)/\sqrt{2},\ |\uparrow\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\downarrow\rangle\big\}$. Comme le modèle de Hubbard, ce modèle n'est soluble exactement qu'en une dimension [16, 17]. Nous remarquons les contributions diagonales d'Ising $S_i^z S_j^z$ qui ont tendance à aligner les spins dans des directions opposées, comme dans l'état Néel $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \cdots \uparrow\downarrow\rangle$ [6]. Pourtant, ce n'est pas un état propre du modèle de Heisenberg en raison des fluctuations quantiques, issues de la contribution de spin-flip $S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+$ qui renverse le spin selon l'axe $\vec{z}$. En outre, en une dimension, l'état Néel ne peut pas exister comme le stipule le théorème de Mermin-Wagner [4, 5].

Pour l'exemple de l'énergie du singulet, la contribution du terme Ising est $-\frac{J}{4}$ tandis que celle du spin-flip est $-\frac{J}{2}$. Ceci nous indique que les fluctuations quantiques abaissent l'énergie du système en favorisant le singulet, ou de manière équivalente des dimères, entre deux sites. Dans ce contexte, nous notons que l'approche d'Anderson [11, 18, 19] aux systèmes antiferromagnétiques dont la fonction d'onde de l'état fondamental est considérée comme une superposition de pavages de dimères a connu beaucoup de succès.

Outre le théorème de Mermin-Wagner [4, 5], le théorème de Lieb-Schultz-Mattis [20] est de grande importance pour le modèle de Heisenberg en une dimension. Il stipule que les chaînes de spins demi-entiers ont soit un état fondamental non-dégénéré avec un continuum d'excitations, soit un gap qui est nécessairement associée avec une dégénérescence et une brisure spontanée de la symétrie de translation. Pour des chaînes de spins entiers, en revanche, on peut avoir un gap et un état fondamental non-dégénéré [21–23]. Ceci se retrouve également dans le théorème Yamanaka-Oshikawa-Affleck [24] qui se base sur les considérations du théorème de Lieb-Schultz-Mattis et traite des commensurabilités d'un système unidimensionnel. Enfin, nous remarquons qu'une généralisation du Lieb-Schultz-Mattis [20] existe en deux dimensions [25].

Dans le contexte d'aimants quantiques sous champ magnétique, le théorème d'Oshikawa-Yamanaka-Affleck [26] est crucial puisqu'il examine les conditions d'existence de plateaux d'aimantation. Également basé sur le théorème de Lieb-Schultz-Mattis [20], il démontre qu'une chaîne

de spin peut avoir un plateau d'aimantation par site m_{site} si la maille élémentaire inclut n spins S et que

$$n(S - m_{site}) \in \mathbb{Z}. \tag{I.3}$$

Des plateaux d'aimantation du système $m = \frac{m_{site}}{S}$ pour des fractions $0 < m < 1$, que nous exprimons par rapport à la valeur saturée m_{sat}, sont donc liés à la brisure de la symétrie de translation du système.

Avec ces notions de la description des électrons fortement corrélés, nous présentons dans ce qui suit des composés réels correspondants et leur comportement sous champ magnétique.

2 Revue expérimentale de systèmes sous champ magnétique

Pendant les dix dernières années, de nombreux composés de dimères couplés ont été synthétisés et analysés avec différentes méthodes expérimentales. Ces composés sont classés selon leur dimensionalité puisque la physique est souvent dominée et capturée par une structure unidimensionnelle ou bidimensionnelle qui est suffisamment isolée d'autres structures du même type. Ainsi, pour certains composés, on utilise un modèle unidimensionnel afin de décrire les degrés de liberté pertinents puisque le composé consiste de chaînes bien isolées les unes des autres et avec lesquelles une bonne description des propriétés physiques est déjà possible. Nous présentons des réalisations de modèles unidimensionnels, comme la chaîne de spin ou l'échelle de spin dans la section 2.1. En deux dimensions, il existe de nombreux modèles, comme les réseaux carré, damier, triangulaire, hexagonal ou bien le réseau Kagomé. Dans la section 2.2 nous illustrons certains exemples de composés caractérisés par un modèle bidimensionnel comme la bicouche de Heisenberg ou le réseau de Shastry-Sutherland.
Nous nous intéressons en particulier à la réponse des composés à un champ magnétique externe et discutons des courbes d'aimantation pour les composés pour lesquels les expériences correspondantes ont été effectuées. Des expériences de résonance magnétique nucléaire (RMN) nous donnent également des informations précieuses en mesurant le gap de spin qui est égal au plateau d'aimantation pour $m = 0$.

2.1 Systèmes quasi-unidimensionnels sous champ magnétique

Haldane [22] a conjecturé que les chaînes Heisenberg de spin-S ont un gap d'énergie de l'état fondamental à un état excité pour des spin-S entiers. Par contre, les chaînes de Heisenberg n'ont pas de gap pour des spin-S demi-entiers, c'est-à-dire qu'il existe des excitations arbitrairement basses dans la limite thermodynamique.

En vue des chaînes de spin-1 avec des couplages antiferromagnétiques et alternés se pose donc la question s'il y a un gap ou non. Si J indique le couplage entre les spins $\mathbf{S}_i$ sur les sites i et δ indique l'alternance du couplage avec $0 \leq \delta \leq 1$, ces chaînes sont décrites par le hamiltonien [27] :

$$H = J \sum_i \big(1 - (-1)^i \delta\big) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}. \tag{I.4}$$

Selon Singh et Gelfand [28] une transition de phase a lieu pour un paramètre d'alternance critique $\delta_c = 0.25$. Pour des liens faiblement alternés, on observe la phase de Haldane avec un gap de spin tandis que pour des valeurs $\delta > \delta_c$, on observe une phase de singulets de dimères qui est aussi gappée. En plus, on peut prendre en compte le critère d'Oshikawa, Yamanaka et Affleck [26] de l'équation (I.3) qui s'applique aux chaînes dimérisées. Pour le système de l'équation (I.4), ce critère autorise des plateaux non seulement pour des valeurs d'aimantation $m = 0$ et 1, mais aussi pour $m = \frac{1}{2}$ par rapport à la valeur saturée.
Le composé $[Ni_2(Medpt)_2(\mu\text{-ox})(\mu\text{-}N_3)]ClO_4 \cdot 0.5\ H_2O$ (avec Medpt = methyl-bis(3-aminopropyl)amine) est un représentant des chaînes de spin-1 avec des couplages antiferromagnétiques et alternées. La figure I.1 illustre la structure du composé et montre la courbe d'aimantation qui a été mesurée par Narumi *et al.* [29]. Cette courbe confirme les prédictions d'Oshikawa *et al.* (I.3) puisqu'on observe un gap de spin et donc un plateau pour $m = 0$ ainsi qu'un plateau pour $m = \frac{1}{2}$. En plus, Narumi *et al.* [29] ont trouvé un paramètre d'alternance des liens $\delta \sim \frac{0.7}{1.3} \simeq 0.54$ et en conséquence, l'état fondamental de ce matériau est dans la phase de singulets de dimères. En outre, ils notent une légère interaction du type Dzyaloshinskii-Moriya [30] de $D/J = 0.08$ en comparant leurs données expérimentales avec des calculs de diagonalisation exacte. Nous illustrons cette interaction plus loin dans la figure I.13 dans le contexte d'un composé bidimensionnel.

Un autre type de système quasi-unidimensionnel sont les matériaux dits chaînes zigzag qui consistent en deux chaînes couplées. La section III.2.5 est consacrée à un exemple simple de l'application de la méthode CORE à cette géométrie. Elle est, par ailleurs, équivalente à la chaîne $J_1 - J_2$ avec une interaction entre premiers voisins J_1 et une interaction frustrante entre deuxièmes voisins J_2. Pour le système avec $J_2/J_1 = 0.5$, Majumdar et Ghosh [31, 32] ont trouvé un état fondamental exact qui est deux fois dégénéré. En outre, ce système est non gappé pour $J_2/J_1 < \big(J_2/J_1\big)_c \approx 0.2411$ et gappé pour $J_2/J_1 > \big(J_2/J_1\big)_c$ [33–35]. À température ambiante, le composé NH_4CuCl_3 et les composés $XCuCl_3$, où X=(K, Tl) ont la même structure et sont des exemples de chaînes zigzag, comme le montre la figure I.2, ou de chaînes $J_1 - J_2$. Shiramura *et al.* [36] ont étudié NH_4CuCl_3 qui est un système de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg. Bien que la structure de NH_4CuCl_3 soit identique à celle de $KCuCl_3$ et $TlCuCl_3$, son état fondamental est magnétique et non gappé, contrairement à l'état fondamental des deux autres composés qui est gappé et de type de singulets de dimères. La courbe d'aimantation, également montrée dans la figure I.2, est très intéressante puisqu'on trouve des plateaux pour $m = \frac{1}{4}$ et $\frac{3}{4}$ ce qui pose des difficultés pour les différentes approches théoriques. Le critère d'Oshikawa *et al.* [26] donné par l'Eq. (I.3), as-

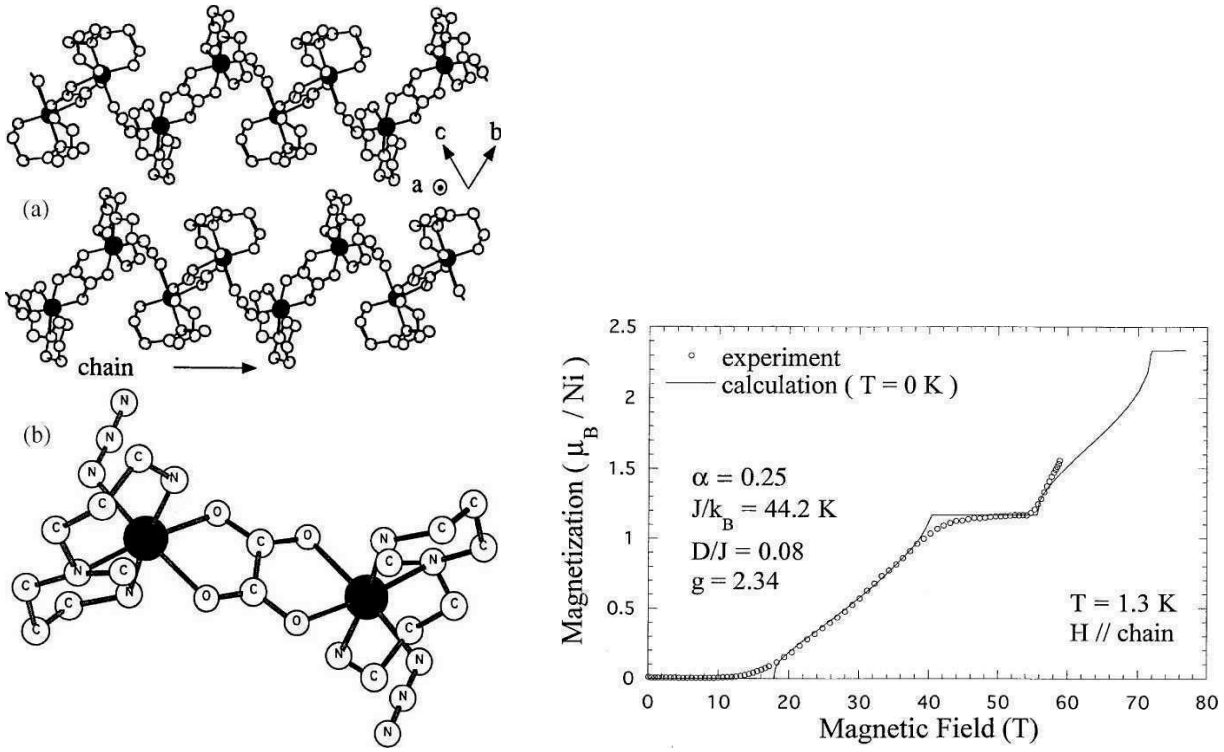


FIG. I.1: À gauche : (a) Structure schématique du composé $[Ni_2(Medpt)_2(\mu\text{-ox})(\mu\text{-}N_3)]ClO_4 \cdot 0.5\ H_2O$ qui est une chaîne de spin-1 avec des liens alternés. (b) Coordination atomique autour des sites de Ni (cercles noirs). À droite : courbe d'aimantation de ce composé avec un plateau pour $m = 0$ et $\frac{1}{2}$ par rapport à la valeur saturée. D'après Narumi *et al.* [29].

socie des plateaux à une périodicité du système et peut expliquer ces plateaux avec une maille élémentaire qui est composée de $n = 8$ sites. Par exemple, le plateau $m = \frac{1}{4}$ est réalisé avec quatre dimères, chacun formé par les sites A_i et B_i, où un dimère sur quatre est occupé par un triplet polarisé et les trois autres par des singulets. Évidemment, ce critère rend également possibles les plateaux $m = 0$ et $m = \frac{1}{2}$ où le dernier correspond au scénario suivant : chaque deuxième dimère est occupé par un triplet polarisé et ces dimères sont séparés par des dimères occupés par des singulets. Cette alternance de singulets et de triplets polarisés sur les dimères décrit l'image du plateau $m = \frac{1}{2}$ que l'on a pour toute sorte d'échelle frustrée. Rappelons par contre que le critère d'Oshikawa est seulement un critère nécessaire et non suffisant et ces deux plateaux ne sont pas observés dans les expériences. En plus, notons que ce critère est peu prédictif puisque l'on peut peut en principe expliquer des plateaux pour toutes les valeurs $\frac{p}{q}$ commensurables et imaginables à condition que la maille élémentaire contienne q sites. Néanmoins, Matsumoto [37] peut expliquer les plateaux observés pour $m = \frac{1}{4}$ et $m = \frac{3}{4}$ en proposant un modèle avec trois sous-réseaux de dimères différents. Une autre approche pour ce problème a été effectuée par Totsuka [38] en utilisant une technique de bosonisation. Il a trouvé un plateau pour $m = \frac{1}{2}$, ce qui est en contradiction avec les expériences et ne peut pas expliquer les plateaux pour $m = \frac{1}{4}$ et $m = \frac{3}{4}$. Afin d'expliquer ces deux plateaux, Shiramura *et al.* [36] argumentent qu'un effet de distorsion provoque ce comportement inattendu par la théorie. Pour des basses températures, une transition structurelle a lieu : à température ambiante, on observe une structure cristalline de groupe de symétrie $P2_1/c$ tandis qu'à basse température, la structure cristalline est caractérisé par le groupe de symétrie $P\bar{1}$ [39, 40]. Ceci entraîne états fondamentaux différents en fonction du champ magnétique, en particulier un état fondamental gappé pour les deux régions avec un plateau d'aimantation. En revanche, pour les régions où l'aimantation augmente de façon continue avec le champ magnétique, l'état fondamental est non gappé.

La chaîne de diamant est aussi un exemple d'un système quasi-unidimensionnel, mais elle est difficile à étudier expérimentalement à cause de l'absence de matériaux correspondants. Néanmoins, il existe des matériaux similaires, notamment les chaînes de diamant déformées. Kikuchi *et al.* [42, 43] ont mesuré la courbe d'aimantation, la susceptibilité magnétique ainsi que la chaleur spécifique d'un tel composé de spin-$\frac{1}{2}$, à savoir l'azurite ($Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$). Comme illustré dans la figure I.3, cette structure trimérisée est caractérisée par trois interactions différentes et on observe un plateau pour $m/m_{sat} = \frac{1}{3}$ qui est en accord avec le critère d'Oshikawa *et al.* [26] (I.3) pour $S = \frac{1}{2}$, $n = 3$ et $m_{site} = \frac{1}{6}$. Les données expérimentales révèlent une anisotropie puisque le plateau le long de l'axe cristallographique $\vec{b}$ est plus petit que pour des directions perpendiculaires à $\vec{b}$.

Pour un autre composé du type de chaîne de diamant déformée, il existe également quelques résultats expérimentaux, notamment pour $Cu_3Cl_6(H_2O)_2 \cdot 2H_8C_4SO_2$. Il s'agit d'un système de spin-$\frac{1}{2}$ pour lequel Ishii *et al.* [44] ont trouvé un gap de spin $\Delta_s \approx 5.2$K puisque l'aimantation

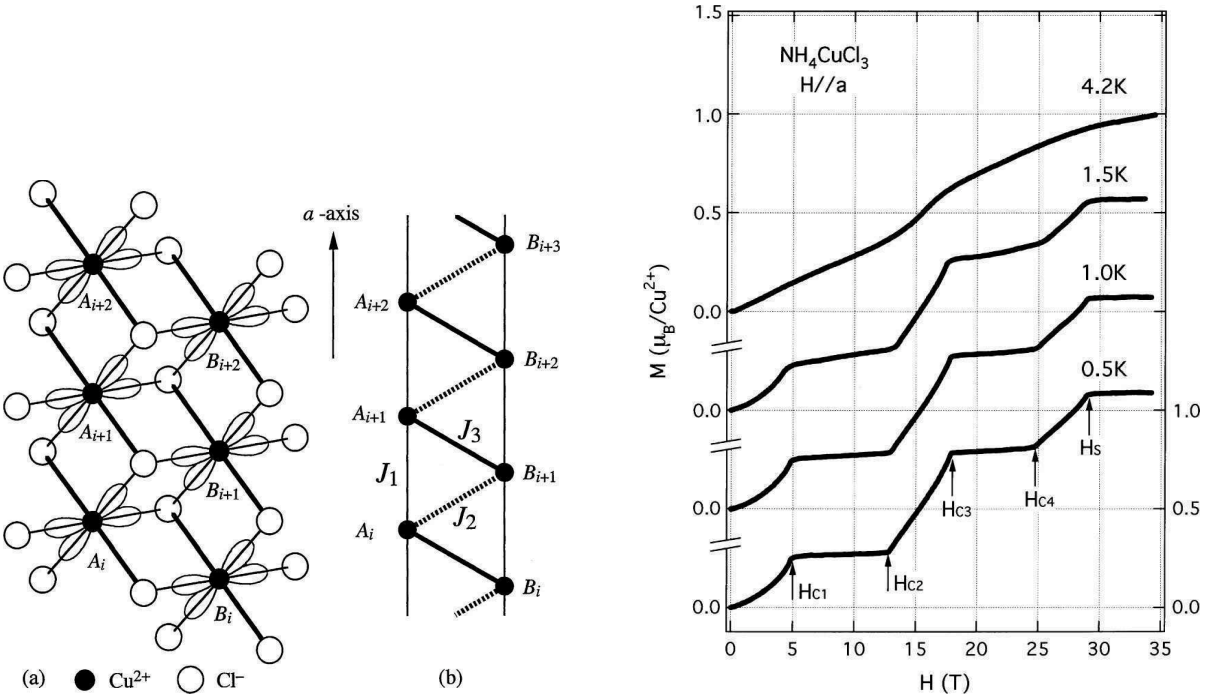


FIG. I.2: À gauche : (a) La structure des composés de $XCuCl_3$, où X=(K, Tl, NH_4) révèle une chaîne zigzag avec les interactions illustrées dans (b). D'après Takatsu *et al.* [41]. À droite, dans la courbe d'aimantatation de NH_4CuCl_3 le long l'axe cristallographique $\vec{a}$, on observe des plateaux pour $m = \frac{1}{4}$ et $\frac{3}{4}$. D'après Shiramura *et al.* [36].

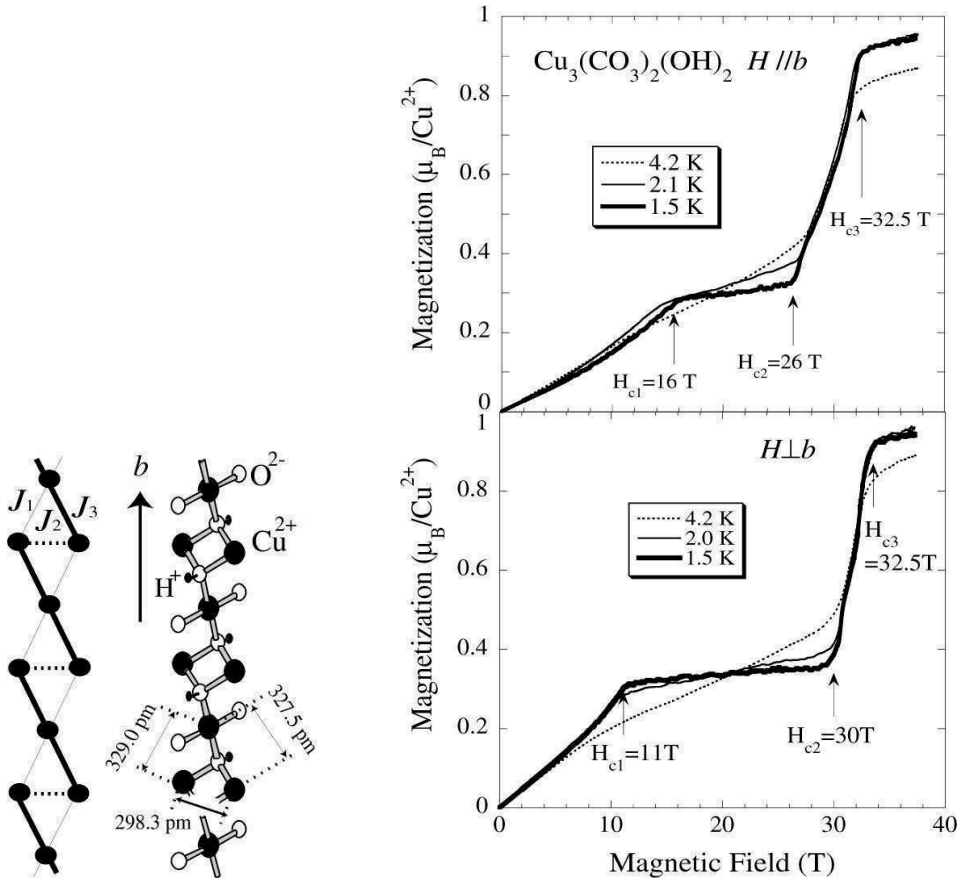


FIG. I.3: À gauche : la géométrie d'une chaîne de diamant déformée avec les couplages J_1, J_2 et J_3 et la structure schématique de l'azurite ($Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$) qui correspond à cette géométrie le long de l'axe cristallographique $\vec{b}$. À droite : courbes d'aimantation de l'azurite pour des basses températures le long de $\vec{b}$ (en haut) et perpendiculaire à $\vec{b}$ (en bas) qui révèlent une anisotropie. D'après Kikuchi *et al.* [42].

reste nulle pour des champs magnétiques inférieurs à un champ critique $H_c \approx 3.9\text{T}$[1]. Malheureusement, la courbe d'aimantation n'est pas complètement accessible à cause des champs magnétiques nécessaires trop élevés. Par exemple, pour le champ magnétique le plus fort de 58T, on se trouve environ à $m = \frac{1}{3}$ et l'observation du plateau pour $m = \frac{1}{3}$ nécessite des champs plus forts. Ainsi, on ne peut pas encore vérifier les prédictions de Tonegawa *et al.* [45] et de Honecker et Läuchli [46] pour des plateaux pour $m = \frac{1}{3}$ et $\frac{2}{3}$.
La chaîne de diamant est reliée à un autre type de chaîne qui est considéré avec la méthode CORE dans le chapitre VI. Il s'agit de la chaîne de dimères orthogonaux qui présente une série infinie de plateaux d'aimantation sous champ magnétique [47].

Après les chaînes de spin sous des différentes formes, comme les chaînes zigzag ou les chaînes de diamant déformées, abordons maintenant une autre géométrie quasi-unidimensionnelle, à savoir les échelles de spin. Elles sont très intéressantes non seulement puisqu'il existe plusieurs composés qui ont une structure d'échelle de spin, mais aussi puisqu'elles permettent d'étudier la transition entre des systèmes unidimensionnels et des systèmes bidimensionnels, comme le discutent Dagotto et Rice [48]. Ceci est rendu possible avec l'augmentation du nombre des montants de l'échelle : pour des échelles à seulement deux montants, on s'attend plutôt à une physique unidimensionnelle et pour des échelles avec un grand nombre de montants, on s'attend plutôt à une physique bidimensionnelle.
Les échelles de spin sont traitées en grand détail dans le chapitre IV où elle nous servent à étudier quelques aspects techniques de la méthode CORE.

Une famille d'échelles de spin-$\frac{1}{2}$, représentée par la formule générique $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$, fut découverte en 1991 par Hiroi *et al.* [49]. Comme le montre la figure I.4 à gauche, le nombre de montants de l'échelle est relié à n de la façon suivante : $n = 3$ (échelle à deux montants), 5 (trois montants), 7 (quatre montants), ... Azuma *et al.* [50] ont mesuré la susceptibilité magnétique χ en fonction de la température T pour l'échelle à deux montants ainsi que pour celle à trois montants et trouvent les courbes montrées dans la figure I.4 à droite. Elles permettent d'en tirer l'existence et la taille d'un gap de spin Δ_s, qui correspond à un plateau d'aimantation pour $m = 0$, en utilisant l'équation trouvée par Troyer *et al.* [51] :

$$\chi(T) \propto \frac{1}{\sqrt{T}} e^{-\Delta_s / k_B T}. \tag{I.5}$$

Ainsi, on trouve que l'échelle à deux montants a un gap de spin de $\Delta_s = 420\text{K}$ tandis que l'échelle à trois montants est non gappée. L'existence d'un gap de spin pour une échelle de spin à deux montants se comprend de façon intuitive : si l'interaction sur les barreaux domine, alors la physique

[1] Rappelons quelques relations simples et pratiques afin de convertir des énergies typiques : entre l'énergie (en électronvolt, eV) et la température (en Kelvin, K), on trouve $\frac{1eV}{k_B} = 11605\text{K}$, soit à peu près $1eV \simeq 10^4\text{K}$. Entre le champ magnétique (en Tesla, T) et la température (en Kelvin, K), on trouve $1\text{T} \cdot g \cdot \mu_B = 1.16 \times 10^{-4} eV = 1.34\text{K}$, donc $1\text{T} \simeq 1\text{K}$. Les abréviations sont : la constante de Boltzmann k_B, le facteur de Landé g et le magnéton de Bohr μ_B.

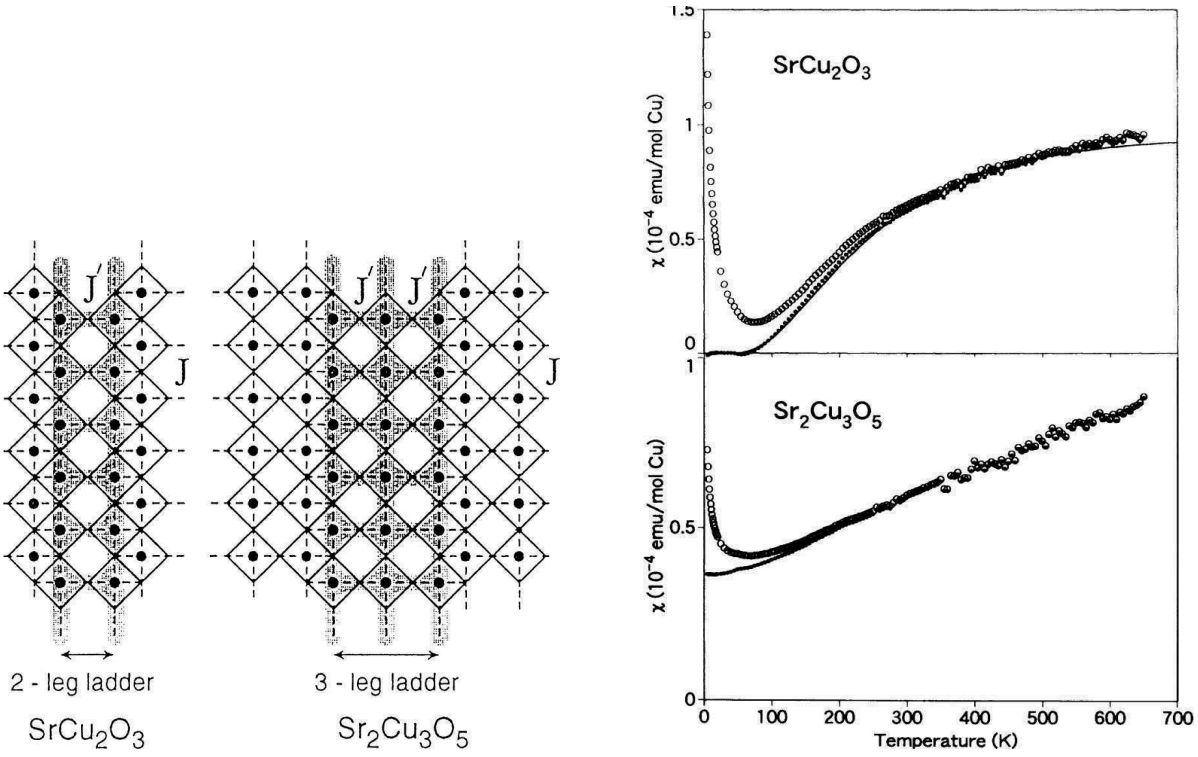


FIG. I.4: À gauche : structure des échelles $Sr_{n-1}Cu_{n+1}O_{2n}$ pour $n = 3$ (2 montants) et $n = 5$ (3 montants), d'après Rice [53]. À droite : les susceptibilités expérimentales montrent l'existence d'un gap de spin pour deux montants et son absence pour trois montants. Les contributions de type loi de Curie des impuretés ont été soustraites pour obtenir le signal en trait plein. D'après Azuma *et al.* [50].

de basse énergie est décrite par des singulets isolés sur les barreaux avec des triplets comme états excités. La différence d'énergie entre les deux états correspond à l'interaction sur le barreau et au gap du spin Δ_s en même temps. Les expériences d'Azuma *et al.* [50] démontrent l'existence ou l'absence d'un gap de spin en fonction de la structure de l'échelle, ce qui confirme les prédictions de Gopalan *et al.* [52]. Ils ont montré que les échelles de spin du type $Sr_{n-1}Cu_{n+1}O_{2n}$ sont gappées pour un nombre pair de montants (ce qui correspond à $n = 3, 7, 11, ...$) et non gappées pour un nombre impair de montants ($n = 5, 9, 13, ...$).

Un autre composé dont la structure contient des échelles de spin-$\frac{1}{2}$ est $La_6Ca_8Cu_{24}O_{41}$ où on trouve non seulement des plans d'échelles de spin, mais aussi des plans de chaînes de spin, comme le montre la figure I.5. Ce composé a été analysé par Matsuda *et al.* [54, 55] avec des expériences de diffraction de neutrons qui indiquent un gap de spin. En outre, Matsuda *et al.* montrent qu'il y a aussi une interaction cyclique à quatre spins en comparant les données expérimentales avec des calculs de diagonalisation exacte. Cette interaction cyclique est de l'ordre de $J_\square/J_\perp = 0.1$ par rapport au couplage du barreau $J_\perp$.

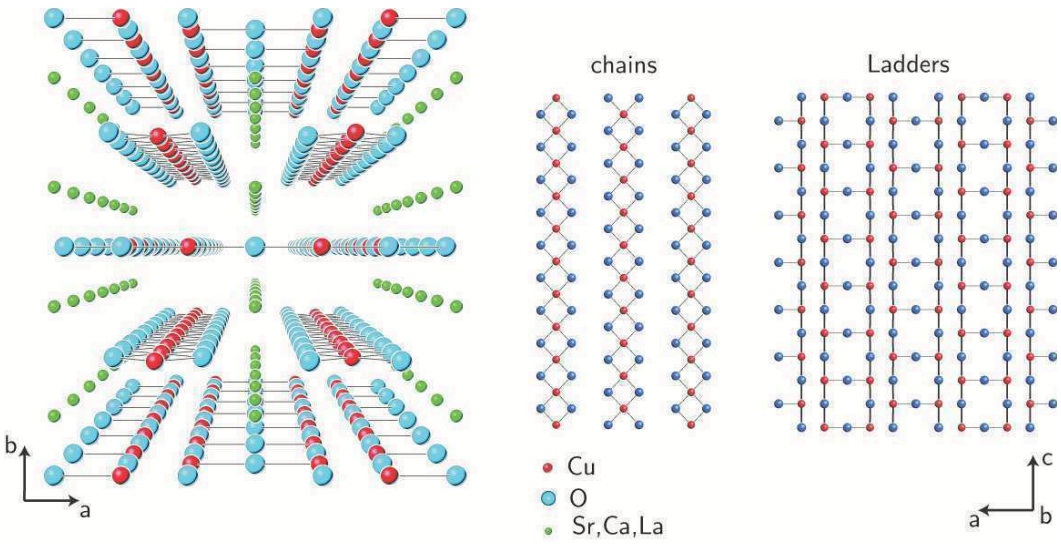


FIG. I.5: Le matériau $La_6Ca_8Cu_{24}O_{41}$ fait partie de la famille de composés de $Sr_{14}Cu_{24}O_{41}$ dont la figure (a) montre la structure le long de l'axe cristallographique $\vec{c}$. La structure contient des plans avec des échelles et d'autres avec des chaînes. D'après Gozar et Blumberg [56].

Comme illustré dans la figure I.6, le matériau $Cu_2(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$ est aussi une échelle de spin-$\frac{1}{2}$. Avec des expériences de résonance magnétique nucléaire (RMN), Chaboussant *et al.* [57–59] ont trouvé un gap de spin pour des basses températures. En plus, il y a un régime où ce matériau est un système tridimensionnel et une autre ou il est caractérisé comme un liquide de Tomonaga-Luttinger [60, 61], c'est-à-dire un système unidimensionnel avec des interactions entre les spins (cf. la section II.4). Clémancey *et al.* [62] ont aussi effectué des expériences qu'ils ont comparées avec des calculs de DMRG et arrivent à un bon accord en introduisant une interaction Dzyaloshinskii-Moriya [30] de $D/J_\perp = 0.05$ où $J_\perp$ l'interaction sur un barreau de l'échelle. Ensuite Capponi et Poilblanc [63] reprennent cette idée afin d'expliquer le comportement de la chaleur spécifique sous champ magnétique à basse température. En utilisant la diagonalisation exacte, ils calculent la courbe d'aimantation montrée dans la figure I.7 et confirment la valeur de l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya trouvée par Clémancey *et al.*.

Un composé très intéressant est l'échelle de spin-$\frac{1}{2}$ $CuBr_4(C_5H_{12}N)_2$ qui a été analysé par Klanjšek *et al.* [65] avec des expériences de résonance magnétique nucléaire (RMN). La figure I.8 montre non seulement la structure du composé, mais aussi la courbe d'aimantation qui a été mesurée à très basse température, à savoir à $T = 40$mK. Cette courbe révèle que le système est dans un régime unidimensionnel sauf près des champs critiques où il est dans un régime tridimensionnel. Cela est reconnaissable puisque l'aimantation est une fonction linéaire du champ magnétique près des champs critiques non de racine carrée comme pour les systèmes unidimensionnels [66]. Les expériences de RMN montrent que $J_\perp/J_\parallel = 3.6$, c'est-à-dire l'interaction sur les barreaux

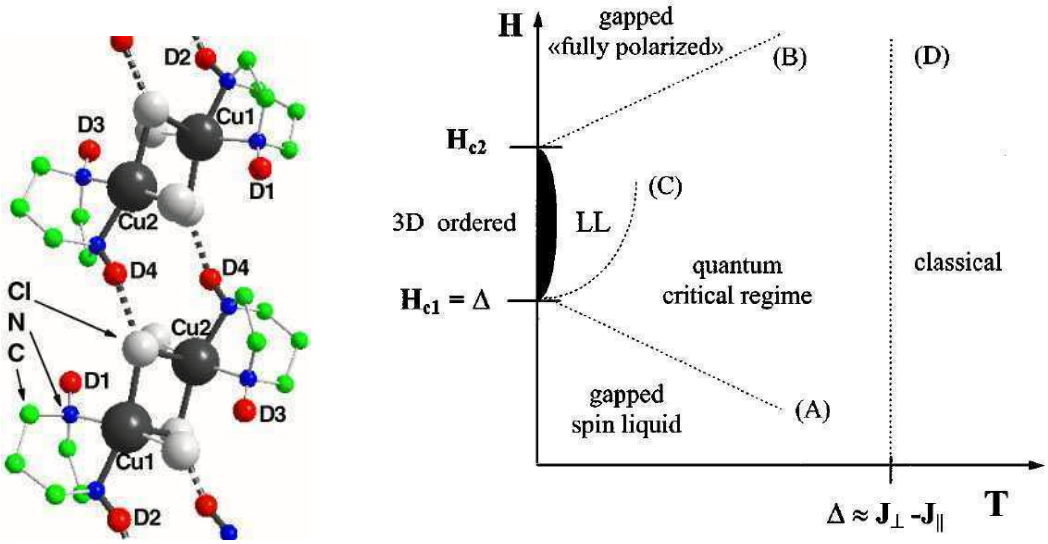


FIG. I.6: À gauche, structure de l'échelle de spin $Cu_2(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$, d'après Clémancey *et al.* [62]. À droite, diagramme de phase de ce composé organique sous champ magnétique en fonction de la température. D'après Chaboussant *et al.* [59].

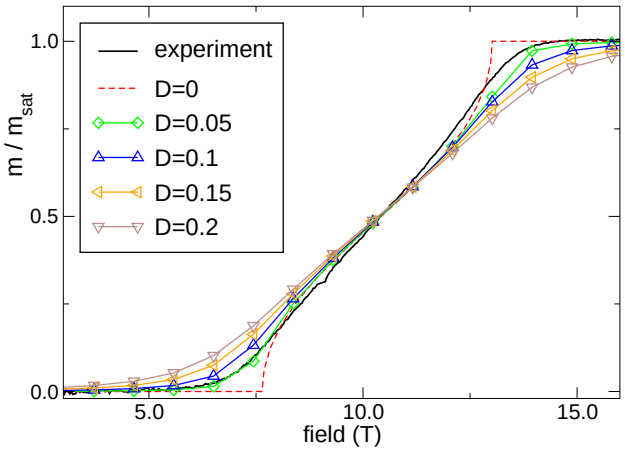


FIG. I.7: Courbe d'aimantation du composé $Cu_2(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$ (cf. figure I.6) : les données expérimentales de Hayward *et al.* [64] sont comparées avec des calculs pour une échelle de Heisenberg avec une interaction Dzyaloshinskii-Moriya D. On observe un bon accord pour $D \simeq 0.05 J_\perp$. D'après Capponi et Poilblanc [63].

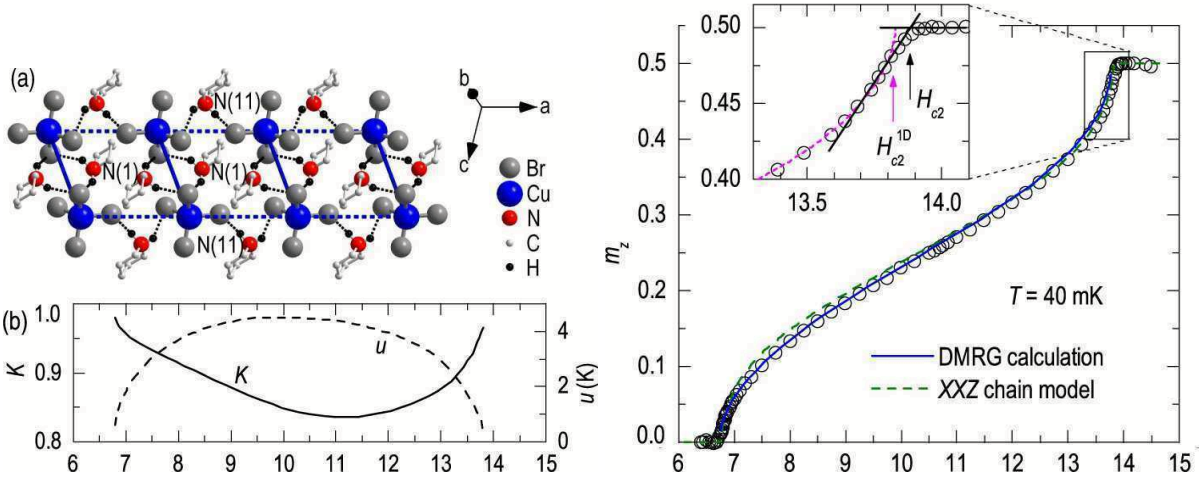


FIG. I.8: À gauche : (a) La structure du composé $CuBr_4(C_5H_{12}N)_2$ montre que les Cu^{2+} forment une échelle de spin. (b) En fonction du champ magnétique, on voit les paramètres de Luttinger $K(H)$ et $u(H)$ (calculés avec le DMRG). À droite, courbe d'aimantation expérimentale pour ce composé, mesurée à $T = 40$mK. Les données expérimentales sont comparées avec des calculs théoriques et de DMRG pour $J_\perp/J_\parallel = 3.6$. D'après Klanjšek *et al.* [65].

domine celle le long de l'échelle. En plus, en effectuant des calculs de DMRG basés sur ces résultats expérimentaux, on peut dériver les paramètres de Luttinger u et K en fonction du champ magnétique pour ce composé (cf. la figure I.8 (b)). Nous brièvement discutons le modèle de Luttinger-Tomonaga [60, 61] de fermions interagissants en une dimension dans la section 3 du chapitre II et notons que ce système permet de directement contrôler les paramètres de Luttinger en fonction du champ magnétique ce qui est tout à fait remarquable et très utile afin d'étudier les différentes propriétés de ce type de système.

2.2 Systèmes quasi-bidimensionnels sous champ magnétique

Le pigment de « pourpre de Han » (« Han purple » en anglais) est connu depuis longtemps et constitue pourtant un composé qui a suscité beaucoup d'intérêt récemment. Ce matériau de formule chimique $BaCuSi_2O_6$ est un système de spin-$\frac{1}{2}$ où des dimères couplés sont arrangés selon la géométrie de la bicouche de Heisenberg, comme le montre la figure I.9 qualitativement. Ces dimères peuvent être occupés par des singulets pour des faibles champs magnétiques et par des triplets polarisés le long du champ magnétique lorsque celui-ci est plus fort. Il y a une faible interaction entre les couches qui est frustrante ce qui rend bien séparées les couches l'une de l'autre et par conséquent, il s'agit d'un système quasi-bidimensionnel. Jaime *et al.* [67] ont mesuré la susceptibilité magnétique ainsi que la courbe d'aimantation et trouvent un gap de spin pour des

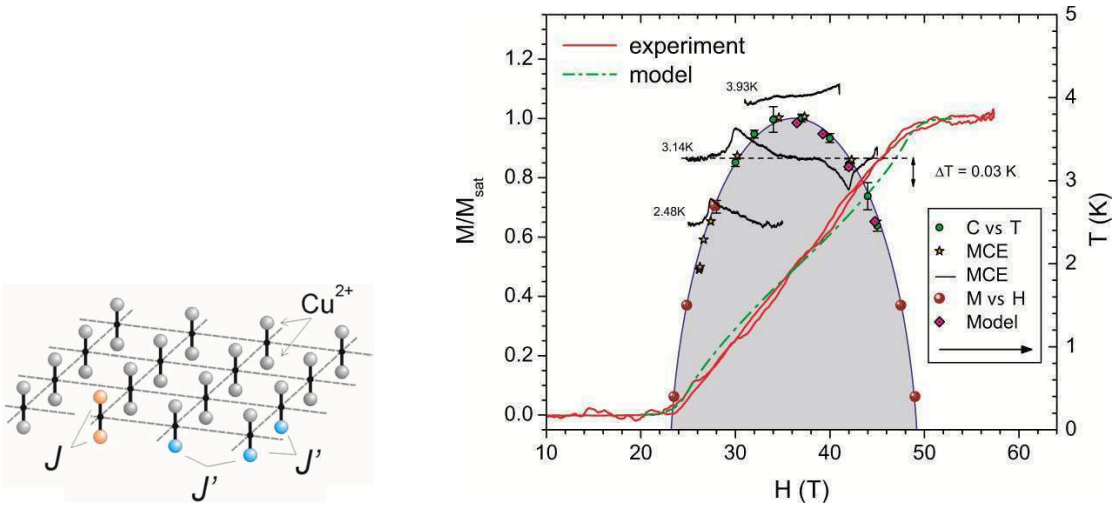


FIG. I.9: À gauche : un plan de dimères de Cu^{2+} dans le matériau $BaCuSi_2O_6$, connu comme « pourpre de Han ». Les dimères sont arrangés dans un réseau carré que l'on appelle bicouche de Heisenberg puisque il s'agit des couplages J et J' de Heisenberg. À droite : la courbe d'aimantation de $BaCuSi_2O_6$ avec un gap de spin, mesurée à $T = 1.5$K. La région grise indique la phase où l'on observe un condensat de Bose-Einstein. D'après Jaime *et al.* [67].

basses températures. Il est très excitant qu'ils trouvent en plus une phase de condensation de Bose-Einstein des triplets qui se sont formés sous champ magnétique. Comme illustré par la figure I.9, la comparaison des données expérimentales avec des calculs de Monte Carlo Quantique donne un très bon accord et confirme le modèle de la bicouche de Heisenberg ainsi que l'existence d'un condensat de Bose-Einstein pour ce composé.

Du côté théorique, la géométrie de la bicouche de Heisenberg a aussi été étudiée, par exemple par Ng et Lee [68] ainsi que par Laflorencie et Mila [69]. Avec des calculs de Monte Carlo Quantique[2], ils ont trouvé une phase supersolide pour une anisotropie $3 \lesssim \Delta \lesssim 4$ de la composante de spin S_z dans les interactions entre les dimères. Remarquons également l'étude de Sengupta et Batista [70] qui montre une phase supersolide dans la bicouche de spin-1 de Heisenberg frustrée et isotrope. Néanmoins, une telle phase n'a pas encore été trouvée expérimentalement.

Le chapitre V est dédié à une étude de la bicouche de Heisenberg en utilisant la méthode CORE. Le modèle effectif que nous dérivons pour le cas anisotrope inclut aussi une phase supersolide, comme le montre Picon *et al.* [71] dans une étude récente. Outre le cas anisotrope, nous considérons aussi le cas de la bicouche isotrope et frustrée.

Un autre représentant des systèmes bidimensionnels est le matériau La_2CuO_4 qui a été étudié par

[2]Des calculs de Monte Carlo Quantique sont faisables pour cet exemple puisqu'il s'agit d'un système non-frustré et par conséquent, il n'y a pas de termes hors-diagonaux positifs. Dans l'algorithme du Monte Carlo Quantique, ceux-ci entraînent des grandes difficultés avec l'apparition de probabilités négatives.

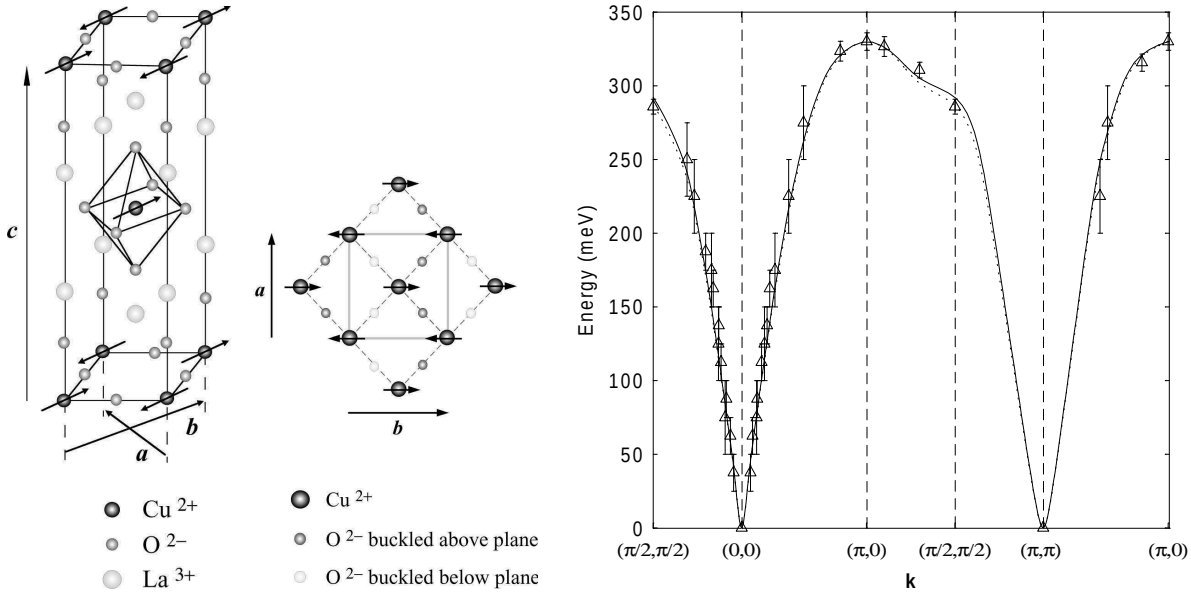


FIG. I.10: À gauche : Maille élémentaire du composé La_2CuO_4. Au centre : on reconnaît un réseau carré dans la structure d'un plan de Cu^{+2} et O^{-2} qui est perpendiculaire à l'axe cristallographique $\vec{c}$ de ce composé. D'après Lee *et al.* [74]. À droite : dispersion d'onde de spin de La_2CuO_4. Le modèle théorique avec échange cyclique à quatre spins [73] (ligne continue) donne un bon accord avec les données expérimentales de Coldea *et al.* [72] (triangles et extrapolation comme ligne pointillée). D'après Katanin *et al.* [73].

Coldea *et al.* [72] avec des expériences de diffraction de neutrons. La figure I.10 montre la structure de ce composé qui est non gappé et décrit par le modèle bidimensionnel de Heisenberg avec un échange cyclique à quatre spins $J_\square$. L'existence de cette interaction a déjà été trouvée par Coldea *et al.* ainsi et ensuite, Katanin et Kampf [73] ont corrigé la valeur à $J_\square/J = 0.24$ en effectuant des calculs basés sur la théorie des ondes de spin.
La méthode CORE permet aussi de dériver un modèle effectif pour le modèle bidimensionnel de Heisenberg avec un échange cyclique ce qui représente une autre application intéressante de cette méthode.

Un composé qui a attiré beaucoup d'attention pendant les dix dernières années est le célèbre $SrCu_2(BO_3)_2$ qui est modélisé par le réseau de Shastry-Sutherland [75–77]. Il s'agit d'un système de spins -$\frac{1}{2}$ qui forment des dimères couplés. La figure I.11 montre la structure et la géométrie ainsi que la courbe d'aimantation. Les plateaux d'aimantation pour $m = \frac{1}{4}$ et $m = \frac{1}{8}$ ont été découverts par Kageyama *et al.* [78] et ensuite Onizuka *et al.* [79] ont mesuré le plateau pour $m = \frac{1}{3}$. Kodama *et al.* [80, 81] ont analysé la structure du plateau $m = \frac{1}{8}$ avec des expériences de résonance magnétique nucléaire (RMN) et trouvé une maille élémentaire de 16 spins arrangés dans un parallélogramme qui est aussi illustrée dans la figure I.12, à gauche.
Plus récemment, des plateaux supplémentaires en dessous du plateau $m = \frac{1}{4}$ et pour des valeurs

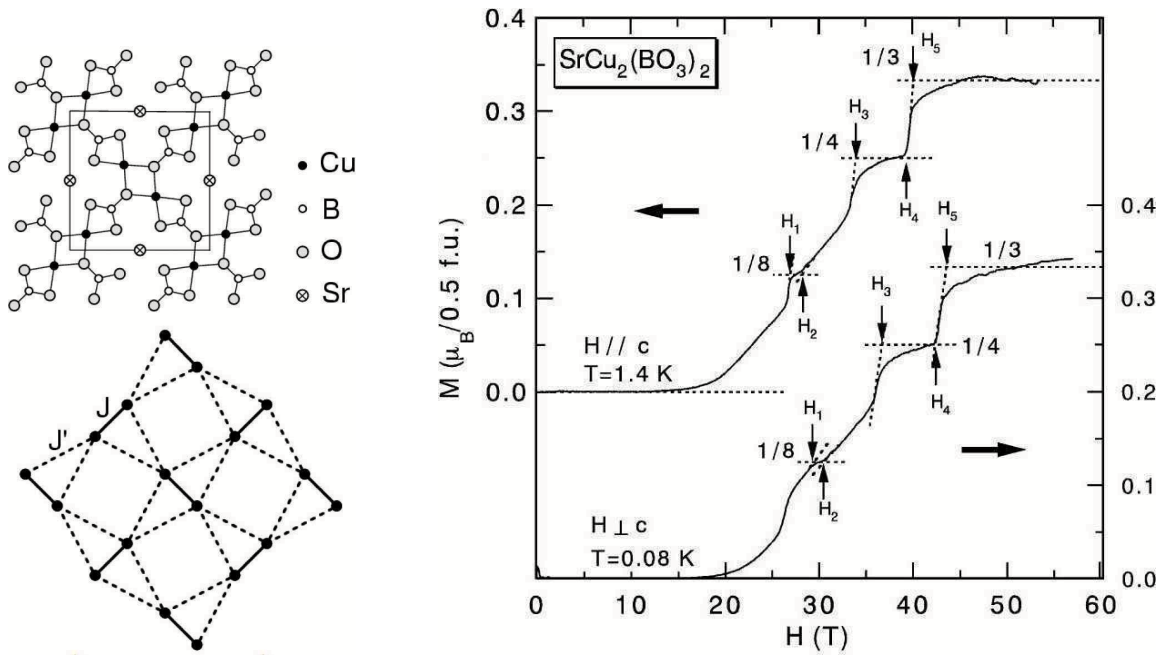


FIG. I.11: À gauche : en haut, la structure du composé $SrCu_2(BO_3)_2$ le long de l'axe cristallographique $\vec{c}$ où le cadre indique la maille élémentaire. En bas, le réseau de Shastry-Sutherland correspond au réseau des ions Cu^{2+} dans $SrCu_2(BO_3)_2$. D'après Kodama *et al.* [80]. À droite : la courbe d'aimantation de ce matériau manifeste un gap de spin et plusieurs plateaux d'aimantation. D'après Onizuka *et al.* [79].

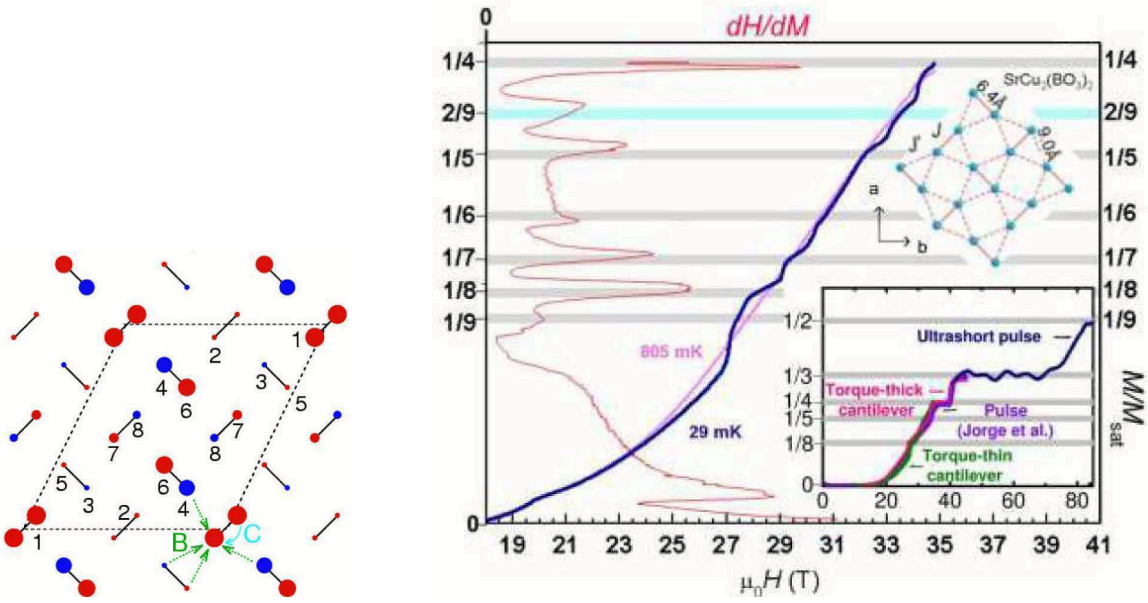


FIG. I.12: Pour le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ (cf. figure I.11), à gauche : la maille élémentaire de 16 spins pour le plateau $m = \frac{1}{8}$. Les valeurs moyennes de la composante du spin $\langle S_z \rangle$ d'un site sont indiquées par la couleur des points (rouge=négative, bleu=positive) et leurs tailles. D'après Kodama *et al.* [80]. À droite : la courbe d'aimantation, mesurée par Sebastian *et al.* [82] : en dessous du plateau $m = \frac{1}{4}$ se trouve encore une variété de plateaux indiqués par la susceptibilité inverse $\frac{dH}{dM}$ (en rouge).

plus exotiques ont été détectés par Sebastian *et al.* [82]. En considérant la susceptibilité inverse $\frac{dH}{dM}$ dans la courbe d'aimantation, ils trouvent des plateaux pour $m = \frac{1}{q}$ avec $4 \leq q \leq 9$ ainsi que pour $m = \frac{2}{9}$, comme illustré dans la figure I.12 (à droite). La stabilité thermodynamique de certains de ces plateaux est, par contre, contestée par Levy *et al.* [83] qui attribuent les plateaux $m = \frac{1}{9}$ et $\frac{1}{7}$ à un mauvais calibrage du champ magnétique ou aux conditions expérimentales des champs magnétiques pulsés qui sont des expériences hors équilibre. En outre, Levy *et al.* [83] et Takigawa *et al.* [84] trouvent une nouvelle phase qui est située légèrement au-dessus du plateau $m = \frac{1}{8}$. Dans cette phase, ils constatent la présence du paramètre d'ordre d'une phase solide puisqu'ils observent la cristallisation des triplets comme dans le plateau $m = \frac{1}{8}$. Et en plus, des propriétés d'une phase superfluide sont trouvées puisque l'aimantation peut augmenter avec le champ magnétique dans cette phase. Toutefois, l'existence d'une phase supersolide qui contient les deux paramètres d'ordre de la phase solide et superfluide est exclue par la présence d'une interaction Dzyaloshinskii-Moriya.

Considérons cette interaction plus en détail dans ce qui suit. Dans le composé $SrCu_2(BO_3)_2$, l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya affecte le couplage intra-dimère J [30, 85, 86] ainsi que le couplage inter-dimère J' [87]. Tandis que le couplage inter-dimère Dzyaloshinskii-Moriya résulte dans

une consolidation du terme de saut des triplets, le couplage intra-dimère Dzyaloshinskii-Moriya entraîne une différence importante entre l'aimantation longitudinale m_z (qui est alignée avec le champ magnétique h_z) et l'aimantation transversale M_s ($\perp\ h_z$) [83]. Nous limitons donc notre discussion de l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya au terme affectant le couplage intra-dimère J et nous illustrons ce couplage ainsi que la différence entre m_z et M_s dans la figure I.13.
La figure I.13, à gauche, montre une illustration de ce couplage qui est caractérisé par un vecteur $\mathbf{D}$ et qui apporte une contribution $\mathbf{D} \cdot \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j$ au hamiltonien du système sous champ magnétique h_z. Ce terme brise la symétrie SU(2) et en plus, cette interaction brise la symétrie de réflexion par rapport au plan du réseau de Shastry-Sutherland [89]. En considérant la figure I.13, à gauche, on s'aperçoit que la minimisation de l'énergie avec la contribution de l'interaction intra-dimère Dzyaloshinskii-Moriya sous champ magnétique h_z favorise une inclinaison des spins vers le plan de dimères du réseau de Shastry-Sutherland. Cette inclinaison des spins sous champ magnétique h_z résulte dans une aimantation transverse alternée (« staggered » en anglais) M_s dans le plan $x - y$ de dimères que l'on peut mesurer avec la résonance magnétique nucléaire (RMN) [86]. En plus, à un ordre supérieur en D/J, une aimantation transverse uniforme M_u apparaît qui est accessible avec des expériences de couple τ en fonction du champ magnétique [83, 88]. Enfin, on peut accéder à l'aimantation longitudinale m_z avec des expériences de RMN et en mesurant la force dans un champ magnétique inhomogène selon $F_z = -m_z \frac{\partial h_z}{\partial z}$.
Dans les expériences avec $SrCu_2(BO_3)_2$ [83], les courbes d'aimantation transverse alternée M_s d'une part et d'aimantation longitudinale m_z d'autre part montrent des différences importantes pour des faibles aimantations $m \leq \frac{1}{8}$, illustrées dans la figure I.13, à droite : la courbe de m_z indique très clairement un grand gap de spin de $\Delta_s \approx 18$T, contrairement à la courbe de M_s où l'on observe une aimantation finie pour des champs magnétiques $5\text{T} \leq h \leq 18\text{T}$. Comme l'expliquent Levy *et al.* [83], cette différence peut directement être attribuée à l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya sur les liens intra-dimères J. Ces observations expérimentales nous montrent que l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya peut avoir des conséquences importantes sur le processus d'aimantation, surtout pour des faibles aimantations $m \leq \frac{1}{8}$.
Les nombreux résultats expérimentaux pour le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ suscitent aussi l'intérêt des théoriciens qui cherchent une compréhension des processus microscopiques. Une approche prometteuse est la dérivation de hamiltoniens effectifs qui a récemment été effectuée par Dorier *et al.* [90] en utilisant la théorie des perturbations. La méthode CORE a été appliquée au réseau de Shastry-Sutherland pour le même but et la publication [91] ainsi que le chapitre VII discutent les résultats en grand détail. Remarquons qu'en raison de la brisure de symétrie de spin, l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya rend plus difficile les approches théoriques et dans notre approche CORE au réseau de Shastry-Sutherland, par exemple, nous avons dans un premier temps négligé ce terme.

La recherche autour du composé $SrCu_2(BO_3)_2$ reste donc très active ce qui est aussi illustré par Haravifard *et al.* [92] qui trouvent des excitations dans le gap de spin pour le composé dopé $SrCu_{2-x}Mg_x(BO_3)_2$.

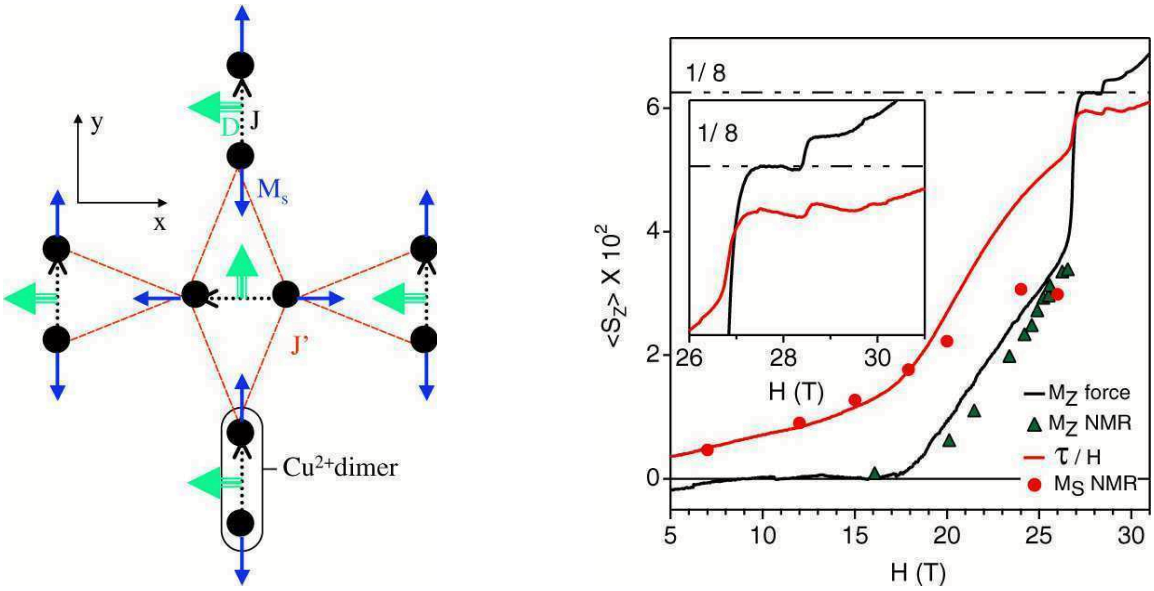


FIG. I.13: Pour le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ (cf. figure I.11) :

À gauche : la structure schématique des dimères formés par les ions Cu^{2+} (cercles noirs). Le lien d'un dimère de deux spins $\mathbf{S}_i$ et $\mathbf{S}_j$, qui sont orientés suivant $\uparrow$ ou $\downarrow$ dans l'axe cristallographique $\vec{c} = \vec{z}$, a « la direction » $i \rightarrow j$, indiquée par une flèche noire. Pour une interaction intra-dimère Dzyaloshinskii-Moriya finie (vecteur $\mathbf{D}$ et flèche verte), une contribution supplémentaire $\mathbf{D} \cdot \mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j$ émerge dans le hamiltonien. Sous champ magnétique h_z qui est dirigé vers $\vec{z}$, la minimisation de l'énergie du système favorise une inclinaison des spins $\mathbf{S}_i$ et $\mathbf{S}_j$ vers la direction $\pm\vec{x}$ pour les dimères horizontaux et vers la direction $\pm\vec{y}$ pour les dimères verticaux. Pour des aimantations $m_z \leq \frac{1}{8}$, les spins inclinés vers le plan $x-y$ engendrent une aimantation transverse alternée (« staggered » en anglais) M_s (flèche bleue) par rapport au champ magnétique appliqué h_z.

À droite : courbe d'aimantation transverse alternée M_s et courbe d'aimantation longitudinale m_z, mesurées avec la résonance magnétique nucléaire (RMN). Afin de comparer et vérifier, m_z est également dérivée en mesurant la force dans un champ magnétique inhomogène selon $F_z = -m_z \frac{\partial h_z}{\partial z}$. En plus, l'aimantation transverse alternée est comparée avec des résultats de couple τ en fonction du champ magnétique. Le couple τ permet de détecter une aimantation transverse uniforme M_u qui apparaît à un ordre supérieur en D/J par rapport à l'aimantation transverse alternée M_s [88]. D'après Levy *et al.* [83].

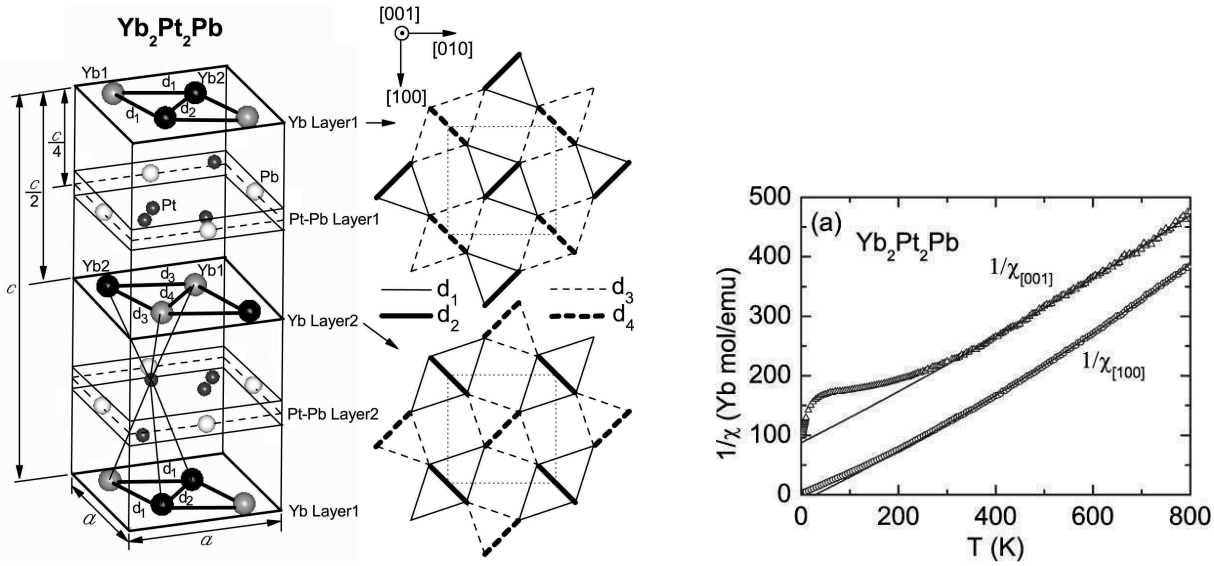


FIG. I.14: À gauche : maille élémentaire du matériau Yb_2Pt_2Pb. Au centre : réseau de Shastry-Sutherland dans la structure des Yb dans les couches « Yb Layer1 » en haut et « Yb Layer2 » en bas. À droite : pour ce composé, l'inverse de la susceptibilité magnétique en fonction de la température dévie de la loi de Curie-Weiss et montre une forte anisotropie. D'après Kim *et al.* [93].

La géométrie du réseau de Shastry-Sutherland se retrouve dans un certain nombre d'autres composés, comme par exemple dans Yb_2Pt_2Pb. Kim *et al.* [93] ont synthétisé ce composé et effectué entre autres des expériences d'aimantation et de chaleur spécifique. La figure I.14 montre leurs résultats pour la susceptibilité magnétique avec une très forte anisotropie ainsi que la structure.
Un groupe de composés de borides de terres rares XB_4, où X=(Tb, Er, Tm), est caractérisé par le réseau de Shastry-Sutherland avec un spin plus élevé. Des expériences montrent des plateaux d'aimantation $m = \frac{1}{4}, \frac{1}{3}$ et $\frac{1}{2}$ pour TbB_4 [94], un plateau d'aimantation $m = \frac{1}{2}$ pour ErB_4 [95] et enfin des plateaux d'aimantation $m = \frac{1}{8}$ et $\frac{1}{2}$ pour TmB_4 [96, 97]. Le spin élevé de ces composés motive une étude théorique très récente de Moliner *et al.* [98] du réseau de Shastry-Sutherland *classique* (c'est-à-dire le spin $S \to \infty$) qui révèle un quasi-plateau $m = \frac{1}{3}$ pour un rapport des couplages intra-dimère J et inter-dimère J' de $J'/J = 0.5$.
Notons enfin que le réseau de Shastry-Sutherland avec un spin élevé est également réalisé dans le composé Nd_2BaZnO_5 [99].

3 Conclusion partielle

Comme nous l'avons vu dans ce chapitre, il existe de nombreux composés de basse dimensionalité qui ont des diagrammes de phase et des comportements sous champ magnétique intéressants. Les

expériences avec les systèmes quasi-unidimensionnels identifient des composés gappés, comme certaines échelles de spin, ainsi que l'existence de plateaux d'aimantation avec $m \neq 0$ pour des systèmes frustrés, comme certaines chaînes zigzag ou chaînes tordues. En deux dimensions, la physique est très riche avec différentes phases conventionnelles ou exotiques et on observe également une variété de composés frustrés qui montrent plusieurs plateaux d'aimantation.
Grâce à la synthèse de nouveaux composés et aux bobines supraconductrices et résistives, et aux champs magnétiques pulsés qui permettent d'examiner les composés sous champs magnétiques de plus en plus forts, ce domaine de la physique promet de continuer son évolution dynamique.

Chapitre II

Notions sur les aimants quantiques en une et deux dimensions

Dans ce chapitre nous illustrons le fondement de la physique de systèmes de dimères couplés antiferromagnétiquement en une et deux dimensions. Pour les modèles correspondant aux composés présentés dans les sections 2.1 et 2.2 du chapitre I, nous introduisons des formulations et des outils pratiques. Ceci nous permet d'interpréter plus facilement et de mieux comprendre les quantités et propriétés les plus importantes des systèmes sous champ magnétiques que nous étudions dans les chapitres IV à VII avec des méthodes numériques et surtout avec la méthode de Contractor Renormalization (CORE), discutée dans la section 2 du chapitre III.

Ce chapitre est structuré comme suit : dans la section 1, nous introduisons les modèles qui décrivent la physique de basse énergie d'un dimère sous champ magnétique. Ceci est appliqué à l'exemple de l'échelle de spin pour laquelle nous présentons également des résultats théoriques du processus d'aimantation qui montre des plateaux d'aimantation. De façon générale et pour des systèmes physiques quelconques, nous précisons dans la section 2 la dérivation du processus d'aimantation et de la courbe d'aimantation à partir de l'énergie de l'état fondamental sous champ magnétique. En utilisant la correspondance entre les différents modèles que nous utilisons pour l'interprétation de la physique, nous expliquons également les phases qui correspondent à un certain comportement de la courbe d'aimantation. Dans la section 3, nous illustrons les aspects les plus importants de la physique en une dimension en présentant une brève introduction à la transformation de Jordan-Wigner [100] et au modèle de Tomonaga-Luttinger [60, 61]. En particulier, nous analysons le diagramme de phase avec une phase isolante et gappée qui correspond aux aimants quantiques unidimensionnels. Enfin, la section 4 est consacrée à une discussion d'aimants quantiques bidimensionnels que nous effectuons en analysant les phases du modèle de Bose-Hubbard d'un réseau carré sous champ magnétique. Avec l'exemple du réseau de Shastry-Sutherland, nous traitons également une version bidimensionnelle de la transformation de Jordan-Wigner afin de calculer la courbe d'aimantation correspondante.

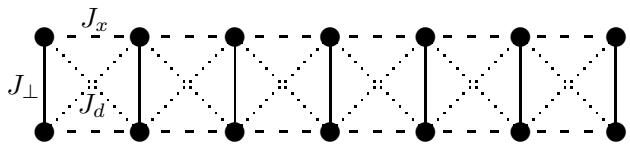


FIG. II.1: L'échelle de spin avec le couplage $J_\perp$ sur les barreaux, J_x sur les liens le long de l'échelle et J_d sur les liens diagonaux. Dans notre étude $J_\perp = 1$.

1 Description des dimères sous champ magnétique avec l'exemple de l'échelle de spin

Afin d'étudier le comportement de systèmes magnétiques quantiques sous champ magnétique, nous considérons le modèle de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg qui s'avère être un modèle simple qui capture l'essentiel de la physique. Dans notre travail, nous nous intéressons en particulier à des composés de dimères couplés dont l'échelle de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg à deux montants est un bon exemple pédagogique. Ce modèle se retrouve dans différents composés, comme discuté dans la section I.2.1 (cf. les figures I.4, I.5 et I.6). Nous discutons l'application de notre méthode de Contractor Renormalization aux échelles en détail dans le chapitre IV. Considérons dans ce qui suit une échelle de spin frustrée [101, 102], dont le hamiltonien est défini comme suit :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= J_\perp \sum_{r=1}^{L} \mathbf{S}_{r,1} \cdot \mathbf{S}_{r,2} + J_x \sum_{r=1}^{L} \sum_{i=1}^{2} \mathbf{S}_{r,i} \cdot \mathbf{S}_{r+1,i} + \\ &+ J_d \sum_{r=1}^{L} \left(\mathbf{S}_{r,1} \cdot \mathbf{S}_{r+1,2} + \mathbf{S}_{r,2} \cdot \mathbf{S}_{r+1,1} \right) - h \sum_{r=1}^{L} \sum_{i=1}^{2} S^z_{r,i}. \end{aligned} \tag{II.1}$$

Comme le montre la figure II.1, l'indice $r = 1, \cdots, L$ indique les L barreaux de l'échelle et $i = 1, 2$ définit les deux chaînes qui constituent l'échelle. Les spins $\mathbf{S} = \uparrow, \downarrow$ sur chaque site sont couplés de façon suivante : l'interaction $J_\perp = 1$ définit les barreaux qui sont des dimères, ensuite, le couplage J_x agit le long des deux chaînes qui constituent l'échelle et enfin, le couplage J_d est une interaction diagonale frustrante. Remarquons la symétrie qui nous permet d'échanger les couplages J_x et J_d. Enfin, le dernier terme de l'équation (II.1) décrit le couplage au champ magnétique h. Dans le chapitre IV, nous présentons des courbes d'aimantation et le diagramme de phase (cf. les figures IV.1 et IV.2 (b)), calculées pour des tailles finies à partir du modèle microscopique en utilisant la diagonalisation exacte (cf. la section 1 du chapitre III).

Considérons le cas spécial d'une échelle de spin dont tous les couplages sauf $J_\perp = 1$ sont nuls ce qui nous donne des dimères isolés sur les barreaux. Un de ces dimères consiste de deux spin-$\frac{1}{2}$, et en conséquence, son espace de Hilbert est composé de quatre états, à savoir un singulet $|s\rangle$ de parité impaire avec spin total $S = 0$ et la composante du spin $S_z = 0$ ainsi que trois états d'un triplet de parité paire avec $S = 1$ et $S_z = -1, 0$ et $+1$. Si dans la configuration $|\sigma_1\sigma_2\rangle$, le spin σ_1

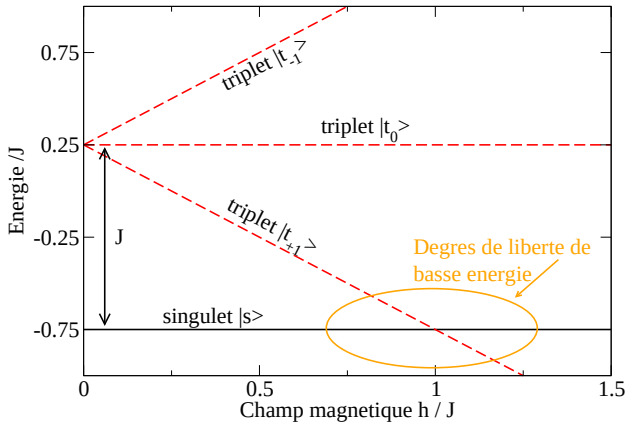


FIG. II.2: Énergies des états d'un dimère couplé par une interaction J en fonction d'un champ magnétique h. Pour notre exemple (cf. équation (II.2), $J = J_\perp$.

(σ_2) se trouve sur la chaîne 1 (2), on a :

$$\begin{aligned} |s\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\big) \quad \text{et} \quad E_{|s\rangle} = -\frac{3}{4}J_\perp, \\ |t_{-1}\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \quad \text{et} \quad E_{|t_{-1}\rangle} = \frac{1}{4}J_\perp + h, \\ |t_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\big) \quad \text{et} \quad E_{|t_0\rangle} = \frac{1}{4}J_\perp, \\ |t_{+1}\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \quad \text{et} \quad E_{|t_{+1}\rangle} = \frac{1}{4}J_\perp - h. \end{aligned} \tag{II.2}$$

Comme le montre la figure II.2, en absence d'un champ magnétique h, on observe un spectre gappé et le premier état excité, qui correspond aux triplets, avec une énergie plus élevée de $J_\perp$ par rapport à l'état fondamental singulet. La dégénérescence des triplets est ensuite levée sous champ magnétique h, connu comme splitting de Zeeman. En plus, on note que pour le champ magnétique $h = J_\perp$, l'état fondamental d'un dimère change du singulet $|s\rangle$ au triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ et que l'aimantation du système saute de nul à saturation de manière discontinue.

Si les couplages J_x et J_d ont des valeurs finies, mais petites par rapport au couplage d'un barreau $J_\perp$, cette transition n'a plus lieu pour le champ magnétique précis $h_c = J_\perp$, mais plutôt dans une région entre h_c^1 et h_c^2, où la grandeur de $(h_c^2 - h_c^1)$ est déterminée par le plus grand couplage parmi J_x et J_d. Afin de mieux comprendre le comportement du système entre $h_c^1 \leq h \leq h_c^2$ dans la limite $0 < |J_x|, |J_d| \ll |J_\perp|$, nous divisons le hamiltonien (II.1) en deux parties :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1, \\ \mathcal{H}_0 &= J_\perp \sum_{r=1}^{L} \mathbf{S}_{r,1} \cdot \mathbf{S}_{r,2} - h_c \sum_{r=1}^{L}\sum_{i=1}^{2} S^z_{r,i}, \\ \mathcal{H}_1 &= J_x \sum_{r=1}^{L}\sum_{i=1}^{2} \mathbf{S}_{r,i} \cdot \mathbf{S}_{r+1,i} + J_d \sum_{r=1}^{L} \big(\mathbf{S}_{r,1} \cdot \mathbf{S}_{r+1,2} + \mathbf{S}_{r,2} \cdot \mathbf{S}_{r+1,1}\big) - (h - h_c) \sum_{r=1}^{L}\sum_{i=1}^{2} S^z_{r,i}. \end{aligned} \tag{II.3}$$

Comme chaque barreau peut être dans l'état $|s\rangle$ ou $|t_{+1}\rangle$, l'état fondamental de $\mathcal{H}_0$ est 2^L fois dégénéré et le premier état excité a une énergie $J_\perp$. La dégénérescence de l'état fondamental est levée par $\mathcal{H}_1$, et on peut dériver un hamiltonien effectif en utilisant la théorie des perturbations. En suivant Mila [101], nous introduisons les opérateurs σ_r qui sont des opérateurs de pseudo-spin-$\frac{1}{2}$ agissants sur les deux états $|s\rangle_r$ et $|t_{+1}\rangle_r$ du barreau r selon :

$$\begin{aligned} \sigma_r^z|s\rangle_r &= -\frac{1}{2}|s\rangle_r \qquad \sigma_r^z|t_{+1}\rangle_r = \frac{1}{2}|t_{+1}\rangle_r, \\ \sigma_r^+|s\rangle_r &= |t_{+1}\rangle_r, \qquad \sigma_r^+|t_{+1}\rangle_r = 0 \\ \sigma_r^-|s\rangle_r &= 0, \qquad \sigma_r^-|t_{+1}\rangle_r = |s\rangle_r. \end{aligned} \tag{II.4}$$

En négligeant une constante, le hamiltonien effectif au premier ordre est défini comme suit :

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{r=1}^{L} \left[J_{xy}^{\text{eff}} \left(\sigma_r^x \sigma_{r+1}^x + \sigma_r^y \sigma_{r+1}^y \right) + J_z^{\text{eff}} \sigma_r^z \sigma_{r+1}^z \right] - h^{\text{eff}} \sum_{r=1}^{L} \sigma_r^z, \tag{II.5}$$

où les paramètres sont donnés par :

$$\begin{aligned} J_{xy}^{\text{eff}} &= J_x - J_d, \\ J_z^{\text{eff}} &= \frac{J_x}{2} + \frac{J_d}{2}, \\ h^{\text{eff}} &= h - J_\perp - \frac{J_x}{2} - \frac{J_d}{2}. \end{aligned} \tag{II.6}$$

Le hamiltonien de l'équation (II.5) est aussi connu comme modèle de spin XXZ dans un champ magnétique longitudinal [66, 103–105] dont on connaît les différentes propriétés, comme les fonctions de corrélation.

Afin de faciliter la discussion suivante, nous effectuons une transformation de Jordan-Wigner [100, 106] pour le modèle effectif. Comme nous discutons dans la section 3 de ce chapitre, cette transformation est donnée par l'équation (II.22) et résulte dans un modèle $t - V$ unidimensionnel de fermions sans spin interagissants :

$$\mathcal{H}_{\text{SF}} = t \sum_{r=1}^{L} \left(c_r^\dagger c_{r+1} + c_r c_{r+1}^\dagger \right) + V \sum_{r=1}^{L} n_r n_{r+1} + \mu \sum_{r=1}^{L} n_r. \tag{II.7}$$

Ici, l'opérateur $c_r^\dagger$ (c_r) crée (annihile) un fermion sans spin sur le site effectif r de sorte que le terme t décrit le saut d'un tel fermion d'un site à un site voisin. Ensuite, V est l'interaction entre deux fermions voisins et μ est le potentiel chimique. Notons que cette transformation s'applique à des systèmes unidimensionnels et afin d'effectuer une telle transformation en deux dimensions, on a besoin d'introduire un champ magnétique fictif [107, 108], comme nous discutons dans la section 4 de ce chapitre.
Remarquons dans ce contexte la correspondance entre le modèle de pseudo-spin-$\frac{1}{2}$ avec les

Sous-espace réel	**Modèle de pseudo-spin-$\frac{1}{2}$**	**Bosons de cœur dur**
triplet polarisé $\|t_{+1}\rangle$	spin up $\sigma =\uparrow$	site occupé $\bullet$
singulet $\|s\rangle$	spin down $\sigma =\downarrow$	site vide $\circ$
champ magnétique h	champ magnétique h^{eff}	potentiel chimique μ
composante du spin S_z	composante du spin σ^z	nombre de particules n
Phases observables et paramètres d'ordre correspondants		
	aimantation transverse m_{trans}	phase superfluide
	aimantation longitudinale m_{long}	phase solide, cristalline
	et m_{trans} et m_{long}	phase supersolide

TAB. II.1: Correspondance entre les différents langages utilisés dans l'équation (II.1) pour le modèle de spin-$\frac{1}{2}$ dans le sous-espace réel, dans l'équation (II.5) pour le modèle de pseudo-spin $\sigma = \frac{1}{2}$ et dans l'équation (II.7) pour le modèle de bosons de cœur dur.

opérateurs σ_r^+ et σ_r^- d'une part et le modèle de bosons de cœur avec les opérateurs de création $b_r^\dagger$ et d'annilihation b_r d'autre part [109] :

$$\sigma_r^+ \longleftrightarrow b_r^\dagger, \qquad \sigma_r^- \longleftrightarrow b_r \qquad \text{avec} \qquad n_r = b_r^\dagger b_r = \sigma_r^z - \frac{1}{2} = \begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases}. \tag{II.8}$$

En conclusion, comme nous montrons dans le tableau II.1, un barreau de l'échelle de spin occupé par un triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ se traduit en site effectif occupé par un boson de cœur dur (noté comme $\bullet$) [38, 110]. En revanche, un barreau occupé par un singulet $|s\rangle$ correspond à un site effectif vide (noté comme $\circ$) et un boson est donc absent sur ce site.

En utilisant les paramètres de l'équation (II.6), nous pouvons exprimer les termes t, V et μ de l'équation (II.7) avec les couplages de l'échelle de spin :

$$\begin{aligned} t &= \frac{J_{xy}^{\text{eff}}}{2} = \frac{J_x - J_d}{2}, \\ V &= J_z^{\text{eff}} = \frac{J_x + J_d}{2}, \\ \mu &= -h^{\text{eff}} - J_z^{\text{eff}} = J_\perp - h. \end{aligned} \tag{II.9}$$

Les champs magnétiques critiques h_c^1 et h_c^2 peuvent enfin être calculés au premier ordre en considérant le potentiel chimique d'un boson μ dans un système vide ou bien le potentiel chimique d'un trou μ_h dans un système complètement rempli. Avec $2|t| = \mu$ pour h_c^1 et $2|t| = \mu_h$ pour h_c^2, on peut exprimer les deux champs magnétiques critiques en termes des couplages de l'échelle de spin :

$$h_c^1 = J_\perp - J_x + J_d \qquad \text{et} \qquad h_c^2 = J_\perp + 2J_x. \tag{II.10}$$

Notons que ces valeurs sont en bon accord avec les expériences pour le composé $Cu_2(C_5H_{12}N_2)_2Cl_4$ [57].
Considérons maintenant deux cas différents pour l'échelle de spin : premièrement, l'échelle non frustrée avec $J_d = 0$ ce qui implique $J_{xy}^{\text{eff}} = 2J_z^{\text{eff}} = J_x$. Il s'agit d'un système non gappé qui se trouve dans la classe d'universalité XY du modèle anisotrope de Heisenberg et qui est décrit par le modèle du liquide de Luttinger [66]. Ce modèle qui traite des fermions interagissants dans une dimension est brièvement discuté dans la section 3. Et deuxièmement, nous considérons l'échelle frustrée avec $J_x \neq 0$ et $J_d \neq 0$. Pour des relativement petites valeurs de J_x, ce système se trouve à nouveau dans la classe d'universalité XY. En revanche, une transition de premier ordre à la classe d'universalité Ising a lieu lorsque $J_{xy}^{\text{eff}} = J_z^{\text{eff}}$ ce qui se traduit par

$$J_d = J_x/3 \tag{II.11}$$

en termes de couplages de l'échelle de spin et à

$$V/|t| = 2 \tag{II.12}$$

dans le langage de fermions sans spin (et de façon équivalente de bosons de cœur dur). Dans la limite d'Ising pour un couplage V relativement fort, le système est demi-rempli et isolant [111] et l'échelle de spin correspondante possède un plateau d'aimantation en fonction du champ magnétique h pour $m = \frac{1}{2}$ par rapport à la valeur saturée. En analysant l'échelle de spin de façon systématique [102, 112], on trouve les différentes propriétés des échelles de spin, et nous montrons les courbes d'aimantation et le diagramme de phase d'une échelle de spin frustrée avec $J_x = J_d$ dans la figure II.3.
Nous retrouvons le critère (II.12) pour le plateau d'aimantation $m = \frac{1}{2}$ d'une échelle de spin dans la section 1 du chapitre IV où nous comparons nos résultats analytiques de l'application de la méthode de CORE à portée 2 avec les résultats perturbatifs. En considérant la figure IV.2, on note que l'approche perturbative marche bien pour des petites valeurs de J_x et J_d, mais a des difficultés pour des valeurs plus élevées que l'on ne peut plus traiter comme une perturbation.
Discutons dans ce qui suit la dérivation de courbes d'aimantation à partir de la connaissance de l'état fondamental et les phases le plus importantes que l'on peut trouver dans des systèmes de dimères couplés.

2 Courbe d'aimantation et phases correspondantes

Pour des champs magnétiques externes h (aussi dénotés par B) de différentes amplitudes, des systèmes de spin de Heisenberg antiferromagnétiques réagissent en montrant différents comportements typiques. Afin d'étudier ces effets comme des gaps de spin ou des plateaux d'aimantation,

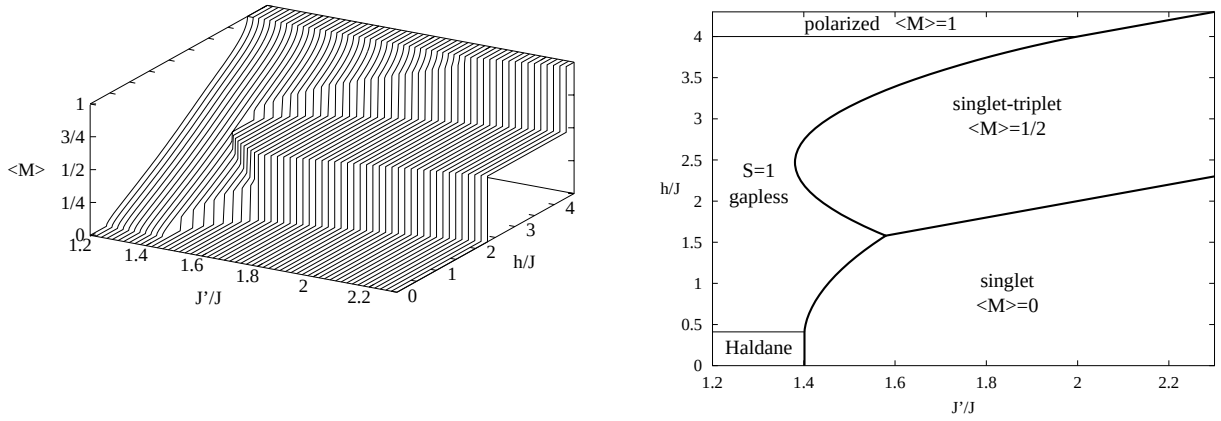


FIG. II.3: (a) courbes d'aimantation et (b) diagramme de phase de l'échelle de spin frustrée de l'équation (II.1) avec la notation $J = J_x = J_d$ et $J' = J_\perp$. Dans (b), les lignes épaisses indiquent des transitions de premier ordre, les lignes fines de deuxième ordre. D'après Honecker *et al.* [102]. Voir aussi la figure IV.2.

considérons l'exemple du modèle bidimensionnel de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg sur un réseau carré :

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - h \sum_i S_i^z, \tag{II.13}$$

où la notation $\langle i, j \rangle$ indique des proches voisins et nous nous intéressons en particulier au processus d'aimantation de ce système. Ceci nous facilitera la compréhension du processus d'aimantation dans les systèmes de dimères couplés que nous analysons dans les chapitres IV à VII. Avec les correspondances du tableau II.1, nous notons que la courbe d'aimantation $m(h)$ est équivalente au nombre de particules en fonction du potentiel chimique $n(\mu)$ dans le langage des bosons de cœur dur.

À température nulle et en absence d'un champ magnétique, le modèle bidimensionnel de Heisenberg est divisé en deux sous-réseaux avec des aimantations partielles opposées qui s'annulent [113, 114]. En appliquant un champ magnétique h et en augmentant son amplitude, l'aimantation partielle des deux sous-réseaux va tourner et a tendance à s'aligner avec le champ magnétique appliqué. Comme le montrent les figures II.4 (a) - (d), ce processus s'arrête lorsque le champ magnétique dépasse une valeur critique h_{sat} (ou bien B_{sat}) et l'aimantation totale atteint saturation.

Afin de calculer la courbe d'aimantation $m(h)$, nous définissons l'énergie par site $e(m) = E(m)/N$ du système, qui est une fonction de l'aimantation normalisée $m = \frac{M}{M_{sat}}$. Pour un champ magnétique h donné, nous minimisons la somme de l'énergie par site et la contribution du champ magnétique par rapport à l'aimantation m :

$$\frac{\partial\big(e(m) - mh\big)}{\partial m} \stackrel{!}{=} 0 \tag{II.14}$$

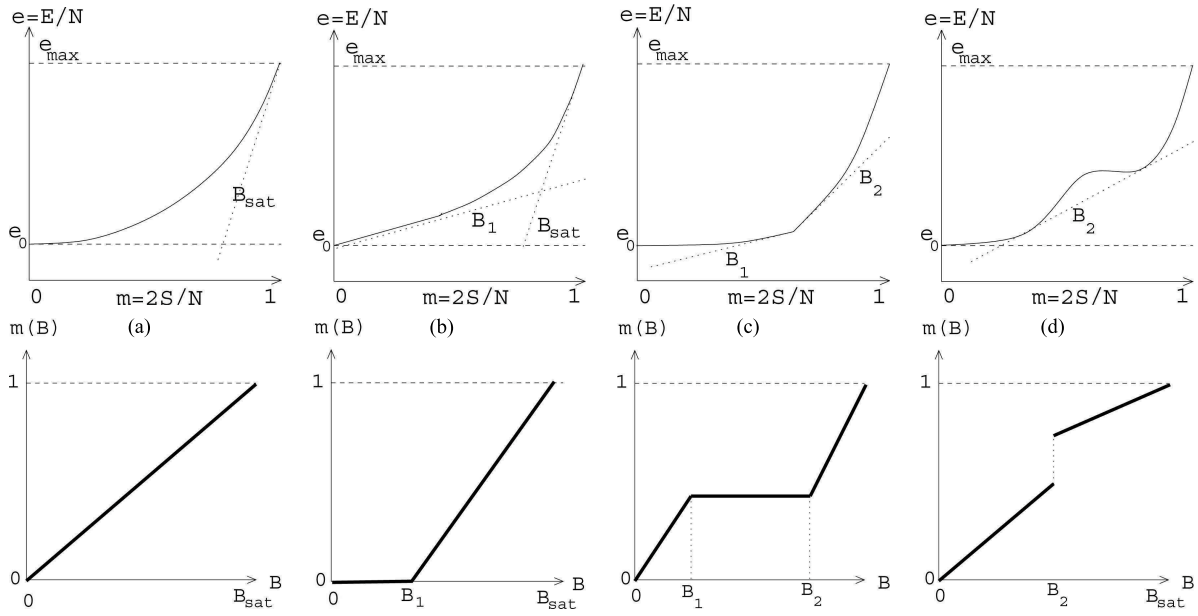


FIG. II.4: Courbes de l'énergie par site $e = E/N$ en fonction de l'aimantation $m = 2S/N$ (en haut) et courbes d'aimantation m correspondantes en fonction du champ magnétique h (ou B) (en bas). Les comportements d'aimantation typiques sont illustrés : (a) courbe linéaire, (b) gap de spin, (c) plateau d'aimantation et (d) saut d'aimantation. D'après Lhuillier et Misguich [113, 114].

et on a $h = \frac{\partial e(m)}{\partial m}$. Nous effectuons donc une transformation de Legendre afin de calculer la courbe d'aimantation $m(h)$ à partir de l'énergie $e(m)$. Pour l'exemple d'un réseau carré du modèle de Heisenberg antiferromagnétique (cf. l'équation (II.13)) nous trouvons que l'énergie $e(m) = \frac{m^2}{2\chi_0}$ est quasiment quadratique et comme le montre la figure II.4 (a) cela résulte dans une courbe d'aimantation presque linéaire.

Pour des systèmes plus complexes, on peut aussi trouver des plateaux d'aimantation et nous considérons l'énergie par site $e(m)$ afin de les expliquer. Comme le montre la figure II.4 (b), un gap de spin Δ_s implique l'existence d'un plateau d'aimantation pour $m = 0$ pour des champs magnétiques inférieurs à un champ critique h_1 (ou bien B_1). Un gap de spin apparaît si l'énergie par site $e(m)$ a une pente strictement positive à aimantation nulle, et plus précisément, sa taille se calcule comme suit : $\frac{\partial e(m)}{\partial m}\big|_{m=0} = \Delta_s \sim h_1$. Dans le langage des bosons de cœur dur, le gap de spin Δ_s et le champ magnétique h_1 correspondent au potentiel chimique μ_1 à partir duquel la bande commence à se remplir. Cette transition peut être critique et de premier ordre, comme par exemple en une dimension où on trouve $m \sim \sqrt{\delta h}$ en considérant des magnons interagissants d'une chaîne de spins entiers [115]. Comme nous l'avons vu dans la section précédente, pour un dimère qui consiste de deux spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg et en absence d'un champ magnétique, le couplage J entre les deux spins est égal à l'énergie entre l'état fondamental et le premier état excité, c'est-à-dire le couplage J correspond au gap de spin. Ceci est aussi le cas pour des échelles de spin dont les barreaux sont faiblement couplés et la physique est dominée par des dimères isolés.

Des plateaux d'aimantation avec des valeurs d'aimantation finies, comme le montre la figure II.4 (c), peuvent apparaître pour des systèmes frustrés [116]. Ce sont des systèmes antiferromagnétiques, souvent avec des couplages entre premiers et deuxièmes voisins qui sont en compétition. Ce scénario est réalisé dans de nombreux modèles, parmi lesquels on trouve en une dimension la chaîne zigzag (cf. la section I.2.1) et les échelles de spin frustrées que nous abordons dans le chapitre IV. En deux dimensions, le modèle de Heisenberg sur un réseau triangulaire, du type Kagomé ou de géométrie en damier en sont des exemples ainsi que le réseau de Shastry-Sutherland, que nous étudions dans le chapitre VII. Comme le montre la figure II.4 (c), un plateau d'aimantation correspond à une discontinuité de $\frac{\partial e(m)}{\partial m}$ qui saute d'une valeur B_1 à B_2. La situation est comparable au gap de spin puisque des excitations magnétiques qui augmentent ou diminuent l'aimantation totale sont gappées entre les champs magnétiques B_1 et B_2 et l'aimantation $m(h)$ reste constante. Comme pour le gap de spin, on peut également trouver des comportements critiques aux bords du plateau. Nous allons discuter les plateaux d'aimantation en grand détail pour différents systèmes dans les chapitres IV à VII puisqu'ils sont au cœur de cette thèse. Rappelons dans ce contexte que le critère pour l'existence de plateaux d'Oshikawa, Yamanaka et Affleck [26] a déjà été présenté dans la section I.1. Concrétisons les plateaux d'aimantation en considérant l'exemple d'une échelle de spin frustrée, pour laquelle on observe un plateau pour $m = \frac{1}{2}$ dont la taille est reliée au couplage frustrant. La physique correspondante est décrite par la configuration où chaque deuxième barreau est occupé par un triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ (c'est-à-dire une particule dans

le langage des bosons de cœur dur) et les barreaux restants par des singulets $|s\rangle$ (des sites vides). Ensuite, la taille du plateau se calcule avec le coût d'énergie afin d'enlever ou d'ajouter une particule.
Enfin, la figure II.4 (d) montre une transition métamagnétique qui est caractérisée par un saut d'aimantation dû à une courbe $e(m)$ concave. Comme le discutent Lhuillier et Misguich [113, 114], ce comportement peut apparaître dans des aimants quantiques pour des systèmes frustrés avec des configurations qui correspondent à des états quasi-dégénérés appartenant à différentes phases avec différentes brisures de la symétrie spatial. Une autre explication sont des impuretés dans les composés magnétiques.

Considérons maintenant la courbe d'aimantation dans le contexte de la correspondance entre le modèle de Heisenberg microscopique pour les dimères et le langage des bosons de cœur dur [109, 115, 117, 118] qui est récapitulé dans le tableau II.1 de la section précédente.

– Nous remarquons qu'une phase superfluide pour les bosons de cœur dur correspond à l'absence d'un plateau d'aimantation, plus précisément à une courbe $m(h)$ continue et strictement croissante. On observe en outre que le système possède une compressibilité finie et que la symétrie de jauge U(1) est brisée pour des systèmes de dimension $\mathcal{D} > 1$. Dans cette phase, les particules peuvent se déplacer et sauter d'un site à un autre et en conséquence, il s'agit d'un gaz de bosons interagissants qui sont généralement dans l'état de condensation de Bose [38, 110, 115, 119].
– En revanche, un plateau d'aimantation correspond à une phase solide avec la cristallisation des particules de manière commensurable, aménagées dans un cristal de Wigner [26, 78, 80, 119] qui brise la symétrie de translation. Les particules cristallisées ne peuvent pas se déplacer en raison d'un terme de saut t trop faible ($V \geq 2|t|$, cf. l'équation (II.12)) par rapport au couplage V. Dans le langage de bosons de cœur dur, cette cristallisation de particules correspond à une onde de densité de charge et on note en plus que le système est incompressible [110]. Remarquons que la transition entre une phase superfluide et une phase solide correspond à la transition de Mott [13–15] entre une phase métallique et une phase isolante dans le langage de fermions sans spin.
– Et enfin, une phase supersolide [109, 117], qui réunit les paramètres d'ordre de ces deux phases [68, 69, 71, 120–122] et qui brise à la fois la symétrie de jauge U(1) et la symétrie de translation, est caractérisée par une courbe $m(h)$ continue et strictement croissante comme dans la phase superfluide. En utilisant une image qualitative de cette phase, on note des particules qui sautent d'un site à un autre et en plus, des particules cristallisées et fixées entre lesquelles se déplacent d'autres particules en sautant. Remarquons, par contre, qu'il s'agit d'une phase exotique qui n'a jamais été observée dans des expériences.

Nous faisons référence à la section 4 de ce chapitre où nous discutons en profondeur le modèle de Bose-Hubbard en deux dimensions et les différentes phases que l'on peut trouver dans ce modèle et l'existence de la phase supersolide, en particulier. Dans les chapitres IV à VII, nous allons discuter la phase superfluide et la phase solide en étudiant les courbes d'aimantation et

plus précisément l'existence de plateaux d'aimantation pour différents systèmes. En outre, nous dérivons des modèles effectifs pour deux modèles bidimensionnels, à savoir la bicouche de Heisenberg dans le chapitre V et le réseau de Shastry-Sutherland dans le chapitre VII. Nos modèles effectifs décrivent des bosons de cœur dur et contiennent des termes de saut corrélé diagonal qui peuvent favoriser une phase supersolide [123]. Pour le modèle de la bicouche de Heisenberg une phase supersolide à été trouvée numériquement en utilisant la méthode de Monte Carlo Quantique (QMC) [68, 69], mais très récemment aussi par Picon *et al.* [71] en étudiant notre modèle effectif [124]. Une telle phase est aussi soupçonnée au-dessus du plateau $m = \frac{1}{8}$ dans le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ [83] qui est décrit par le réseau de Shastry-Sutherland.

Discutons dans les deux sections suivantes quelques aspects théoriques de la physique de systèmes interagissants en une et deux dimensions.

3 Systèmes unidimensionnels

Le paradigme du liquide de Fermi, discuté dans la section 1 du chapitre I a connu beaucoup de succès dans la description de systèmes interagissants, mais ne s'applique qu'en dimension $\mathcal{D} \geq 2$. Cette description échoue en une dimension où les excitations sont des modes collectifs et la physique de systèmes non gappés est décrite par le liquide de Luttinger [61]. Dans ce qui suit, nous présentons une très brève introduction qui est inspirée de différents travaux et revues importants de ce domaine [66, 103, 125] ainsi que de thèses [126–128].
Nous considérons avec plus de détails la correspondance traitée dans la section 1 de ce chapitre, à savoir celle entre les pseudo-spins-$\frac{1}{2}$ du modèle XXZ de l'équation (II.5) d'une part, et le modèle de fermions sans spin interagissants, décrit par le modèle $t-V$ unidimensionnel de l'équation (II.7) d'autre part. Dans ce but, nous retraçons la bosonisation d'opérateurs fermioniques qui nous sert à trouver le modèle de Tomonaga-Luttinger [60, 61], une formulation du hamiltonien qui est quadratique en terme d'opérateurs bosoniques et donc soluble. Nous discutons enfin le diagramme de phase et l'apparition d'un gap de spin en fonction des paramètres du modèle XXZ qui se traduit en transition de Mott pour les fermions sans spin interagissants du modèle $t - V$.

Fermions sans spin

À basse énergie, la relation de dispersion des électrons dans un modèle de liaison forte peut être approximée au voisinage des points de Fermi en introduisant le modèle de Tomonaga-Luttinger [60, 61]. Si le potentiel chimique se trouve vers le milieu de la bande, on peut introduire deux sortes de fermions avec une dispersion linéaire : les fermions « droits » (R) se propagent avec une impulsion k et les fermions « gauches » (L) avec une impulsion $-k$. En conséquence, la dispersion sinusoïdale initiale est divisée en deux branches linéaires en décrivant la pente de la dispersion à l'impulsion de Fermi $k = k_F$ (R) et $k = -k_F$ (L) pour les deux sortes de fermions qui se déplacent avec $v_F = \pm 2t \sin(k_F)$. En utilisant les opérateurs de création (d'annihilation)

des deux sortes de fermions $c^\dagger_{r,k}$ ($c_{r,k}$), la partie cinétique du modèle $t-V$ de l'équation (II.7) se présente comme suit :

$$\mathcal{H}_0 = v_F \sum_{k,\ r=R,L} (\epsilon_r k - k_F) c^\dagger_{r,k} c_{r,k}, \tag{II.15}$$

où $\epsilon_{r=R,L} = \pm 1$. On définit les opérateurs de densité de fermions « droits » ρ_R et « gauches » ρ_L pour des impulsions $p > 0$:

$$\rho_r(q) = \sum_k c^\dagger_{r,k+q} c_{r,k} \qquad \text{où} \qquad r = R, L \tag{II.16}$$

et on note que l'opérateur $\rho_R(p)$ crée une paire électron-trou « droite » si $k < k_F$ et $k + p > k_F$ en déplaçant un électron de l'état k à l'état $k + p$ tandis que l'opérateur $\rho_L(-p)$ crée une paire électron-trou « gauche » pour $-k_F < k$ et $k - p < -k_F$. En plus, on remarque que $\rho^\dagger_R$ et $\rho^\dagger_L$ commutent ainsi que $\rho^\dagger(q) = \rho(-q)$. Les commutateurs de ces opérateurs bosoniques avec le hamiltonien cinétique nous permettent de reformuler la partie cinétique du hamiltonien pour une chaîne de longueur L_{chaine} comme suit :

$$\mathcal{H}_0 = \frac{2\pi v_F}{L_{chaine}} \sum_{q>0} \big[\rho_R(q)\rho_R(-q) + \rho_L(q)\rho_L(-q)\big]. \tag{II.17}$$

Le passage à la représentation en termes d'opérateurs de densité est exact et permet de simplifier le traitement d'interactions qui sont du type densité-densité, c'est-à-dire quadratique dans les opérateurs de densité. On a donc trouvé une formulation du hamiltonien cinétique qui est quadratique en terme d'opérateurs de bosons et par conséquent soluble, exactement comme les termes d'interactions. Quant aux interactions, on se limite souvent à des interactions vers l'avant $g_2 : (k_F; -k_F) \rightarrow (k_F; -k_F)$ et $g_4 : (k_F; k_F) \rightarrow (k_F; k_F)$ qui respectent le fait que les opérateurs des fermions « droit » et « gauche » sont indépendants et commutent. Par contre, on néglige des interactions vers l'arrière $g_1 : (k_F; -k_F) \rightarrow (-k_F; k_F)$ ou des termes d'*umklapp* $g_3 : (k_F; k_F) \rightarrow (-k_F; -k_F)$ pour lesquels des fermions « droits » se transforment en fermions « gauches » et vice versa.

En prenant en compte le terme cinétique ainsi que le terme d'interaction, on obtient le hamiltonien global qui représente le modèle de Tomonaga-Luttinger. Puisqu'il est quadratique en terme d'opérateurs bosoniques, il peut être résolu par une transformation de Bogoliubov.

En revanche, afin de calculer des fonctions de corrélations, il est nécessaire d'exprimer les opérateurs fermioniques en fonctions d'opérateurs bosoniques. On doit donc effectuer la procédure de *bosonisation* et dans ce but, nous introduisons deux champs bosoniques $\phi(x)$ et $\theta(x)$:

$$\nabla\phi(x) = -\pi[\rho_R(x) + \rho_L(x)], \qquad \nabla\theta(x) = +\pi[\rho_R(x) - \rho_L(x)]. \tag{II.18}$$

La densité de particules (droites et gauches) est décrite par $-\frac{1}{\pi}\nabla\phi(x)$ tandis que $\Pi(x) = \frac{1}{\pi}\nabla\theta(x)$ correspond au courant vers la droite des particules. Les opérateurs $\Pi(x) = \frac{1}{\pi}\nabla\theta(x)$ et $\phi(x)$ sont conjugués et on peut montrer qu'ils obéissent la relation de commutation

$$\big[\theta(x'), \Pi(x)\big] = i\pi\delta(x - x'). \tag{II.19}$$

Cela nous permet de formuler le hamiltonien générique qui décrit des termes d'énergie cinétique et d'énergie d'interaction :

$$\mathcal{H} = \int \frac{dx}{2\pi}\left[uK\big(\pi\Pi(x)\big)^2 + \frac{u}{K}\big(\nabla\phi(x)\big)^2\right]. \tag{II.20}$$

Ce hamiltonien est caractérisé par les deux paramètres du Luttinger : u et K, où u a la dimension d'une vitesse et K est sans dimension. Par exemple, $K = 1$ et u vaut la vitesse de Fermi v_F pour des fermions libres, tandis que pour des bosons libres, u vaut la vitesse du son et $K = \infty$. Nous rappelons dans ce contexte les expériences avec le composé $CuBr_4(C_5H_{12}N)_2$ [65], discutées dans la section 2.1 du chapitre I. Pour ce composé, les deux paramètres de Luttinger peuvent être contrôles par un champ magnétique, comme illustré dans la figure I.8. En outre, on remarque que le hamiltonien de l'équation (II.20) décrit une chaîne élastique dont les modes propres correspondent aux modes collectifs d'onde de densité de charge du liquide de fermions. Comme nous allons discuter plus loin, il n'existe pas d'excitations à une particule en une dimension tandis que des excitations collectives sont possibles.

Bosonisation des spins-$\frac{1}{2}$

Nous considérons le hamiltonien XXZ pour des spins-$\frac{1}{2}$ qui est défini comme suit :

$$\mathcal{H}_{\mathrm{XXZ}} = \frac{J_{xy}}{2}\sum_{r=1}^{L}\left(S^+_{r+1}S^-_r + S^-_{r+1}S^+_r\right) + J_z\sum_{r=1}^{L}S^z_{r+1}S^z_r. \tag{II.21}$$

Nous rappelons l'équivalence du modèle de pseudo-spins-$\frac{1}{2}$ σ de l'équation (II.5) avec les fermions sans spin interagissants et les bosons de cœur dur, discutée dans la section 1 de ce chapitre. À partir du modèle XXZ, on retrouve le modèle des fermions sans spin interagissants, c'est-à-dire le modèle $t-V$ de l'équation (II.7), avec les paramètres $t = \frac{J_{xy}}{2}$ et $V = J_z$. Ceci est possible en effectuant une transformation canonique, à savoir la transformation de Jordan et Wigner [100] :

$$S^z_r = n_r - \frac{1}{2}, \qquad S^+_r = c^\dagger_r\ \exp\Big(i\pi\sum_{s<r}n_s\Big), \qquad S^-_r = \exp\Big(-i\pi\sum_{s<r}n_s\Big)c_r, \tag{II.22}$$

où $n_r = c^\dagger_r c_r$. Les opérateurs S_r peuvent être exprimés par des champs bosoniques $\phi(x)$ et $\theta(x)$ en passant à la description dans le continu :

$$\begin{aligned} S^z(x) &= -\frac{1}{\pi}\nabla\phi(x) + \frac{(-1)^x}{\pi\alpha}\cos(2\phi(x)), \\ S^+(x) &= \frac{e^{-i\theta(x)}}{\sqrt{2\pi\alpha}}\big[(-1)^x + \cos(2\phi(x))\big]. \end{aligned} \tag{II.23}$$

Ici, S^z correspond à la densité de spins et par conséquent à l'aimantation locale. En plus, le champ ϕ est relié à la projection du spin selon z tandis que le champ θ est relié à la partie du spin dans le plan $x-y$ [66]. Les deux expressions de $S^z(x)$ et $S^+(x)$ nous donnent accès aux fonctions de corrélation et sont de grande importance afin d'interpréter les résultats expérimentaux

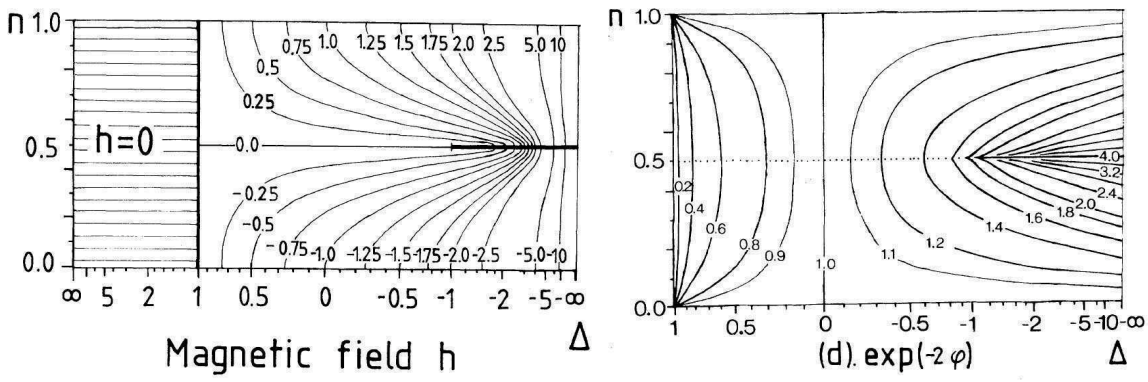


FIG. II.5: Diagramme de phase d'une chaîne XXZ. n est le remplissage de fermions sans spin (l'aimantation est $m = n - 1/2$) et $\Delta = J_z/J_{xy}$ est l'anisotropie (et non le gap, voir texte) du modèle XXZ de l'équation (II.21). Les lignes de niveau indiquent le champ magnétique h (à gauche) et l'inverse du paramètre de Luttinger $K^{-1} = \exp(-2\varphi)$ (à droite). D'après Haldane [103].

ou numériques.

La bosonisation de la chaîne XXZ de l'équation (II.21) résulte dans un hamiltonien quadratique et en prenant en compte non seulement les interactions vers l'avant, mais aussi les processus d'*umklapp*, on peut observer l'ouverture d'un gap de spin Δ_s. Pour $m = 0$, le système est demi rempli et le gap s'ouvre pour $K < \frac{1}{2}$ ce qui correspond à $V/|t| > 2$ pour le modèle $t - V$ de l'équation (II.7). Les paramètres Luttinger u et K du hamiltonien de Tomonaga-Luttinger peuvent être calculés pour le modèle XXZ en utilisant l'ansatz de Bethe [16, 17, 129]. Au demi-remplissage, ce calcul est analytique et pour un remplissage quelconque, on obtient des résultats numériques [103], illustrés dans la figure II.5.

En considérant la figure II.5, on note que pour une anisotropie $\Delta = J_z/J_{xy} \geq 1$ du modèle XXZ, le système est ferromagnétique[1] et ne peut pas être décrit comme liquide de Luttinger. Par conséquent, le paramètre de Luttinger K diverge ($K^{-1} \to 0$) dans cette région. D'autre points spéciaux incluent $\Delta = J_z/J_{xy} = 0$ qui décrit des fermions libres avec $K = 1$. Pour $\Delta = J_z/J_{xy} = -1$ le système est antiferromagnétique et isotrope et on observe des corrections logarithmiques aux fonctions de corrélation. On trouve le liquide de Luttinger pour $\Delta = J_z/J_{xy} < 1$, sauf sur la ligne $n = \frac{1}{2}$ (cela correspond à l'aimantation $m = 0$) et $\Delta = \frac{J_z}{J_{xy}} < -1$ où l'on observe l'ouverture d'un gap de spin Δ_s et $K < \frac{1}{2}$. Ceci correspond à une transition de Mott dans le langage de fermions sans spin et on observe que le système gappé se trouve dans phase ordonnée antiferromagnétique. En plus, on remarque une transition commensurable-incommensurable au-

[1]Dans la notation de Haldane [103] et la figure II.5, les couplages J_{xy} et J_z ne sont pas définis de même façon : $J_{xy} < 0$ est ferromagnétique tandis que $J_z > 0$ est ferromagnétique. Ainsi l'anisotropie $\Delta = J_z/J_{xy} \geq 1$ avec $J_{xy} < 0$ et $J_z < 0$ résulte dans un système *ferromagnétique*. Pour $\Delta = J_z/J_{xy} = -1$ avec $J_z > 0$ et $J_{xy} < 0$ le système est *isotrope* et *antiferromagnétique*.

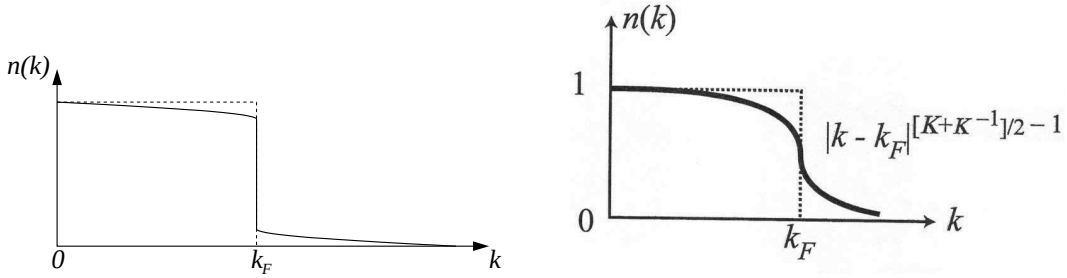


FIG. II.6: Facteur d'occupation des états $n(k)$ à température nulle dans les liquides de Fermi (à gauche, d'après Roux [128]) et de Luttinger (à droite, d'après Giamarchi [66]) : à la différence du liquide de Fermi, celui de Luttinger n'a pas de discontinuité au niveau de Fermi mais une singularité.

tour de cette ligne et l'aimantation varie selon $m \sim \sqrt{h - \Delta_s}$.
Comme déjà discuté dans les sections 1 et 2 de ce chapitre, le gap de spin Δ_s de la chaîne XXZ de l'équation (II.5) pour $K < \frac{1}{2}$ se traduit en plateau d'aimantation $m = \frac{1}{2}$ d'un système de dimères couplés, comme nous les considérons dans les chapitres IV à VII. Le critère correspondant $V/|t| = 2$ de l'équation (II.12) afin de trouver la transition entre une phase quasi-superfluide et une phase solide dans le modèle $t - V$ de fermions sans spin interagissants est donc de grande importance pour nos considérations.

Nous rappelons que le liquide de Luttinger caractérise des systèmes *unidimensionnels et interagissants* pour lesquels le paradigme du liquide de Fermi échoue. Cela se manifeste, par exemple, dans le facteur d'occupation des états $n(k)$ que nous illustrons dans la figure II.6. Pour le liquide de Fermi qui décrit des systèmes interagissants de dimension $\mathcal{D} \geq 2$, le facteur d'occupation $n(k)$ a une discontinuité à $k = k_F$ dont la taille correspond au poids de quasi-particules. Cette discontinuité n'existe pas pour le liquide de Luttinger indiquant ainsi l'absence de quasi-particules. Plutôt, le système est caractérisé par des excitations *collectives* et par des fonctions de corrélations *algébriques* avec des lois de puissance dont les exposants ne dépendent que du paramètre de Luttinger K. Dans notre discussion, nous n'avons pas traité la bosonisation de fermions avec spin qui joue un rôle important dans les conducteurs unidimensionnels [66, 127, 130]. Ces systèmes montrent la séparation spin-charge, une particularité remarquable de la physique en une dimension, et on observe deux modes collectifs bosoniques. Ce sont les excitations de charge, appelée holon, et de spin, appelée spinon, qui se propagent avec des vitesses différentes $v_{holon} \neq v_{spinon}$.
Évidemment, le liquide de Luttinger offre encore beaucoup plus de physique intéressante, mais nous nous limitons à un bref rappel des propriétés les plus importantes dans le contexte de cette thèse. Pour plus de détails, le livre de Giamarchi [66] est fortement recommandé.

4 Systèmes bidimensionnels

Afin d'interpréter des systèmes de dimères bidimensionnels sous champ magnétique, il est souvent avantageux d'utiliser la représentation de spins-$\frac{1}{2}$ comme des bosons de cœur dur. Dans cette section nous discutons par conséquent le modèle de Bose-Hubbard qui peut avoir un diagramme de phase riche en fonction des termes que l'on inclut. Comme nous avons vu dans la section précédente, en une dimension, la transformation de Jordan-Wigner [100] de l'équation (II.22) est une correspondance *exacte* entre fermions sans spin interagissants avec un modèle $t-V$ d'une part, et le modèle XXZ de pseudo-spins-$\frac{1}{2}$ d'autre part. En deux dimensions, la transformation de Jordan-Wigner n'est plus exacte, mais en introduisant des fermions qui portent un flux statistique, une transformation correspondante en deux dimensions est possible, comme nous illustrons plus loin.

Le modèle de Bose-Hubbard en deux dimensions et des phases observables

Afin d'étudier la stabilité de différentes phases en fonction de différents processus d'interaction et de saut de bosons, nous considérons dans ce qui suit un modèle sur réseau de bosons de cœur mou en deux dimensions. Plusieurs bosons sur le même site sont donc permis en prenant en compte une interaction V_0 entre ces bosons. Le modèle est complété par un potentiel chimique μ et un terme de saut t. Ce modèle est en fait un cas particulier du modèle de Bose-Hubbard qui est défini en utilisant des opérateurs de création $a_i^\dagger$ (d'annihilation a_i) bosoniques :

$$\mathcal{H}_{BH} = -t\sum_{\langle i,j\rangle}(a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) - \mu\sum_i n_i + V_0\sum_i n_i^2 + V_1\sum_{\langle i,j\rangle} n_i n_j + V_2\sum_{\ll i,k\gg} n_i n_k. \quad \text{(II.24)}$$

Pour le moment, les interactions entre premiers voisins V_1 et deuxièmes voisins V_2 sont négligées et nous présentons le diagramme de phase correspondant dans la figure II.7. On observe une phase superfluide pour des relativement grands termes de saut tandis que pour des petites valeurs du terme de saut, le système devient instable vers une phase isolante de Mott. La particularité de bosons de cœur mou entraîne plusieurs phases isolantes avec un remplissage commensurable où chaque site est occupé par un nombre entier de bosons. Les phases isolantes sont incompressibles et en plus caractérisées par un gap fini pour les excitations de plus basse énergie, à savoir une excitation particule-trou.

Remarquons que l'on retrouve le modèle de bosons de cœur dur à partir du modèle des bosons de cœur mou de l'équation (II.24) dans la limite $V_0 \to \infty$. En revanche, en utilisant la transformation de Matsubara-Matsuda [109] (que nous discutons plus loin dans l'équation (II.28)), on peut montrer que le modèle de bosons de cœur dur est équivalent au modèle de spin-$\frac{1}{2}$ suivant [131, 132] :

$$\mathcal{H} = -t\sum_{\langle i,j\rangle}(S_i^+S_j^- + S_i^-S_j^+) + V_1\sum_{\langle i,j\rangle} S_i^zS_j^z + V_2\sum_{\ll i,k\gg} S_i^zS_k^z - h_z\sum_i S_i^z, \quad \text{(II.25)}$$

où le champ magnétique $h_z = \mu - 2V_1 - 2V_2$ et nous supposons $t = 1$. Pour $V_2 = 0$, ce modèle est équivalent au modèle XXZ de spin-$\frac{1}{2}$, présenté dans l'équation (II.5). Discutons dans ce qui

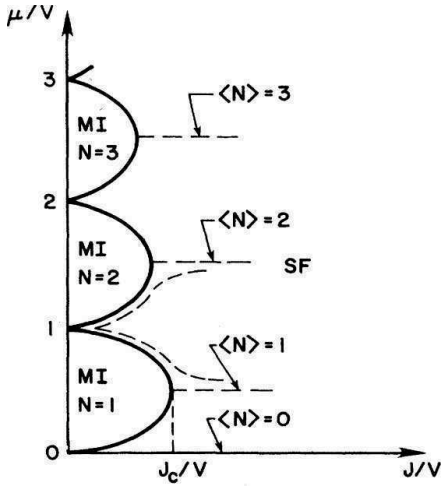


FIG. II.7: Diagramme de phase du modèle de Bose-Hubbard de l'équation (II.24) avec des bosons interagissants à température nulle. Ici, les interaction entre bosons voisins ($V_1 = V_2 = 0$) sont absentes, μ est le potentiel chimique et J le terme de saut, par rapport à l'interaction entre bosons sur le même site V, respectivement. Pour des nombres entiers de bosons par site N et pour un petit terme de saut, la phase superfluide (SF) est instable vers une phase isolante de Mott (MI). D'après Fisher *et al.* [118].

suit, le diagramme de phase du modèle de Bose-Hubbard de bosons de cœur dur, équivalent à l'équation (II.25), en présence d'interactions à plus longue distance V_1 et V_2. L'image physique se présente pour un réseau carré comme suit [132] : au demi-remplissage et pour $V_1 \neq 0$ et $V_2 = 0$, chaque deuxième site est occupé par un boson qui est repoussé du premier voisin par V_1. Pour une faible interaction V_1 et à basse température, les bosons sont mobiles et condensent en une phase superfluide. En revanche, pour une forte interaction V_1, le système gèle et montre des ondes de densité en forme de damier où les sites consécutifs sont vides et occupés. Or, pour une interaction V_1 intermédiaire et exactement au demi-remplissage, les deux scénarios s'excluent. Seulement en ajoutant ou en enlevant un boson du système, le défaut bosonique résultant pourrait montrer une condensation de Bose en sautant entre les bosons gelés dans l'ordre du damier : le résultat serait une phase supersolide. Cette phase porte son nom en raison de la coexistence des paramètres d'ordre de la phase solide et la phase superfluide [120–122]. Si, par contre, l'interaction V_2 est dominante, les bosons sont gelés dans un ordre de rayures et la compétition de l'interaction V_2 avec un terme de saut peut également résulter dans une phase supersolide, cette fois avec un ordre de rayures. Remarquons que cette interprétation est qualitative en raison de la nature quantique et indiscernable des bosons. Plutôt, les bosons participent au deux processus en même temps.
Plus quantitativement, on trouve les diagrammes de phase du modèle de Bose-Hubbard de bosons de cœur dur que nous présentons dans la figure II.8. Dans le diagramme de phase du modèle pour un remplissage ρ légèrement au-dessus du demi-remplissage, illustré dans la figure II.8, à gauche,

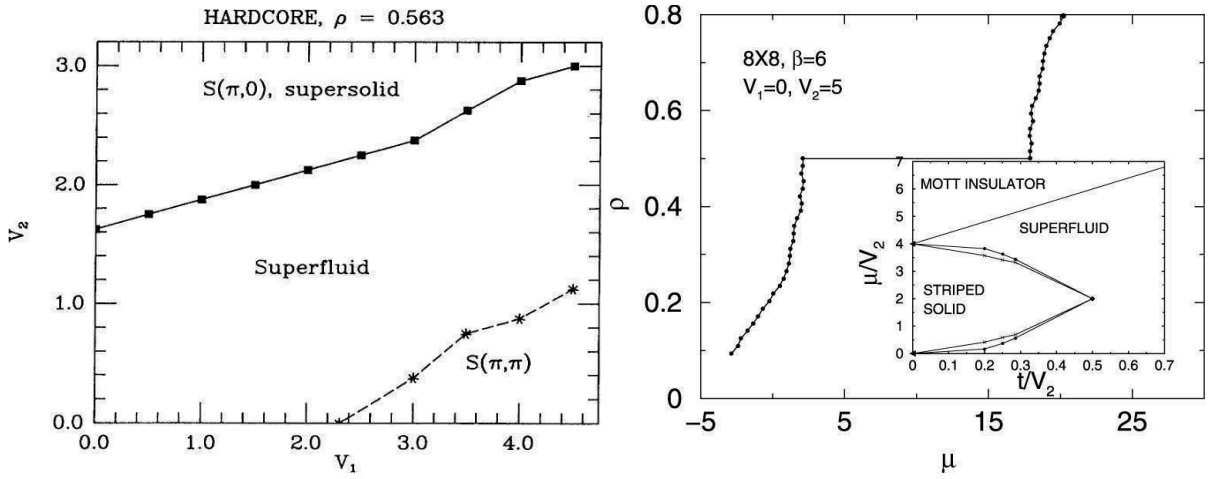


FIG. II.8: À gauche : diagramme de phase du modèle de Bose-Hubbard avec des bosons de cœur dur (cf. l'équation (II.24) avec $V_0 \to \infty$ et l'équation (II.25)), légèrement au-dessus du demi-remplissage ($\rho = 0.563$) et en fonction de l'interaction entre premiers voisins V_1 et deuxièmes voisins V_2. D'après Batrouni *et al.* [131]. À droite : courbe du remplissage ρ en fonction du potentiel chimique μ du modèle de Bose-Hubbard avec des bosons de cœur dur, pour $V_1 = 0$. On voit également le diagramme de phase pour $V_1 = 0$ avec une phase supersolide $\mathbf{k} = (0, \pi)$ entre la phase solide $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ et la phase superfluide. D'après Batrouni et Scalettar [132].

on trouve une phase solide de damier de Bose avec un vecteur d'ordre $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ qui correspond à un état de Néel. En plus, on observe un ordre ferromagnétique dans le plan X-Y qui correspond à une phase superfluide et on remarque la stabilisation d'une phase supersolide par l'interaction à plus longue distance $V_2 \neq 0$, même si l'interaction au premier voisin V_1 est nulle. La physique du modèle de Bose-Hubbard avec des bosons de cœur dur est encore précisée dans la figure II.8, à droite, qui montre pour $V_1 = 0$ le remplissage ρ du système en fonction du potentiel chimique μ. Comme le montre le diagramme de phase pour $V_1 = 0$ dans la même figure, une phase solide $\mathbf{k} = (\pi, 0)$, qui correspond au plateau de demi-remplissage ($\rho(\mu) = 0.5$), est entourée de deux phases supersolides $\mathbf{k} = (0, \pi)$ pour des interactions $V_2 \geq 2t$. Notons que dans un modèle de dimères couplés sous champ magnétique, la courbe $\rho(\mu)$ et le plateau de demi-remplissage du modèle bosonique correspondent à la courbe d'aimantation $m(h)$ avec un plateau d'aimantation pour $m = \frac{1}{2}$.

Ces résultats nous indiquent l'importance de l'interaction au deuxième voisin V_2 pour la stabilité d'une phase supersolide $\mathbf{k} = (0, \pi)$ avec un ordre de densité de bosons de rayures. Comme discuté au-dessus, en absence de V_2 et seulement avec une interaction entre premiers voisins V_1, une phase supersolide pourrait aussi exister avec un ordre de densité de bosons de damier. Mais les calculs de QMC [132, 133] indiquent l'instabilité de cette phase et on observe plutôt une séparation de phases. Par conséquent, un simple modèle $t - V$ (cf. l'équation (II.7)) avec un terme de saut et une interaction entre premiers voisins ne montre pas de phase supersolide [134]. En outre, dans le modèle de Bose-Hubbard avec des bosons de cœur mou, on observe l'absence d'une phase supersolide pour demi-remplissage tandis que pour des remplissages $0.5 < \rho \lesssim 0.675$ une phase supersolide peut exister [131, 135].

Notons l'existence d'un autre processus qui stabilise une phase supersolide dans un modèle bidimensionnel de bosons de cœur dur, à savoir un terme de saut corrélé [123]. Le hamiltonien correspondant est similaire au hamiltonien de Bose-Hubbard de l'équation (II.24) pour des bosons de cœur dur ($V_0 \to \infty$) :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -t \sum_{\langle i,j \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i) - \mu \sum_i n_i + + V_1 \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j - \\ &\quad -t' \sum_i \sum_{\delta = \pm x, \delta' = \pm y} n_i \big(a_{i+\delta}^\dagger a_{i+\delta'} + a_{i+\delta} a_{i+\delta'}^\dagger \big). \end{aligned} \tag{II.26}$$

On note que l'interaction au deuxième voisin V_2 n'est pas incluse. Afin de visualiser le saut corrélé t', considérons une plaquette de quatre sites dont au moins deux sont occupés : un boson effectue un saut diagonal d'un site à son deuxième voisin en présence d'un autre boson voire deux bosons. Comme le montrent Schmidt *et al.* [123], une phase supersolide est stable pour des amplitudes finies de saut corrélé, même en l'absence de l'interaction V_2.

Enfin, on observe encore deux autres modèles qui peuvent montrer une phase supersolide et dans ce but, nous considérons la bicouche de Heisenberg. Nous présentons des résultats expérimentaux dans la figure I.9 dans la section 2.2 du chapitre I et des résultats numériques obtenus avec la

méthode CORE dans le chapitre V. Des études théoriques révèlent la stabilité d'une phase supersolide dans un modèle avec des interactions anisotropes [68, 69, 71, 124] et également dans un modèle avec des interactions frustrantes et isotropes [70].

Correspondance entre le problème de spin-$\frac{1}{2}$ et le modèle de bosons de cœur dur

Dans les sections 1 et 3 de ce chapitre, nous avons vu que grâce à une transformation de Jordan-Wigner [100] (cf. l'équation (II.22)), le modèle de bosons de cœur dur et le modèle de fermions sans spin interagissants sont équivalents en une dimension. En deux dimensions, cette équivalence n'est plus valable car la transformation n'est plus exacte, mais dans ce qui suit, nous discutons une méthode qui nous permet d'établir une relation entre les deux modèles.

Dans ce but, nous considérons un modèle de Heisenberg antiferromagnétique, à savoir le réseau de Shastry-Sutherland pour des dimères couplés sous champ magnétique h. Le hamiltonien correspondant est défini comme suit :

$$\mathcal{H} = \sum_{<i,j>} J_{ij}\ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - h \sum_i S_i^z, \tag{II.27}$$

où les $\mathbf{S}_i$ sont des opérateurs de spin-$\frac{1}{2}$ tandis que l'interaction intra-dimère est décrite par $J_{ij} = J$ et l'interaction entre dimères par $J_{ij} = J'$. Nous rappelons que le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ est une réalisation de ce modèle avec un rapport des couplages $J'/J \approx 0.65$ [136, 137] et montre plusieurs plateaux d'aimantation sous champ magnétique [78, 79], comme nous discutons dans la section 2.2 du chapitre I (cf. les figures I.11 et I.12).

Comme le montrent Misguich *et al.* [107], les opérateurs $\mathbf{S}_i$ de spin-$\frac{1}{2}$ peuvent être transformés en opérateurs de boson de cœur dur selon la transformation de Matsubara-Matsuda [109] :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_{xy} + \mathcal{H}_z, \qquad \text{avec} \\
\mathcal{H}_{xy} &= \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \big(a_i^\dagger a_j + a_j^\dagger a_i \big), \\
\mathcal{H}_z &= \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^z \left(n_i - \frac{1}{2} \right) \left(n_j - \frac{1}{2} \right) - h_{\text{fict}} \sum_i \left(n_i - \frac{1}{2} \right),
\end{aligned} \tag{II.28}$$

où $n_i = S_i^z + \frac{1}{2}$ est le nombre d'occupation du site i. Les bosons de cœur dur peuvent être interprétés comme des fermions auxquels sont attachés une tube de flux quantique d'un champ magnétique *fictif* h_{fict} [107, 108]. Il s'agit d'une transformation *exacte* entre un problème de spin (cf. l'équation (II.27)) et des fermions sans spin qui interagissent avec un champ de jauge statistique de Chern-Simons [138–140]. Avec une approche de champ moyen, on remplace ces tubes de flux par une distribution homogène du champ magnétique fictif. Le flux ϕ par plaquette carrée est relié à la densité de fermions et par conséquent, à l'aimantation (réelle) m du système de spins initial :

$$\frac{\phi}{2\pi} = \langle n \rangle = \left(\langle S_z \rangle + \frac{1}{2} \right) = m + \frac{1}{2}. \tag{II.29}$$

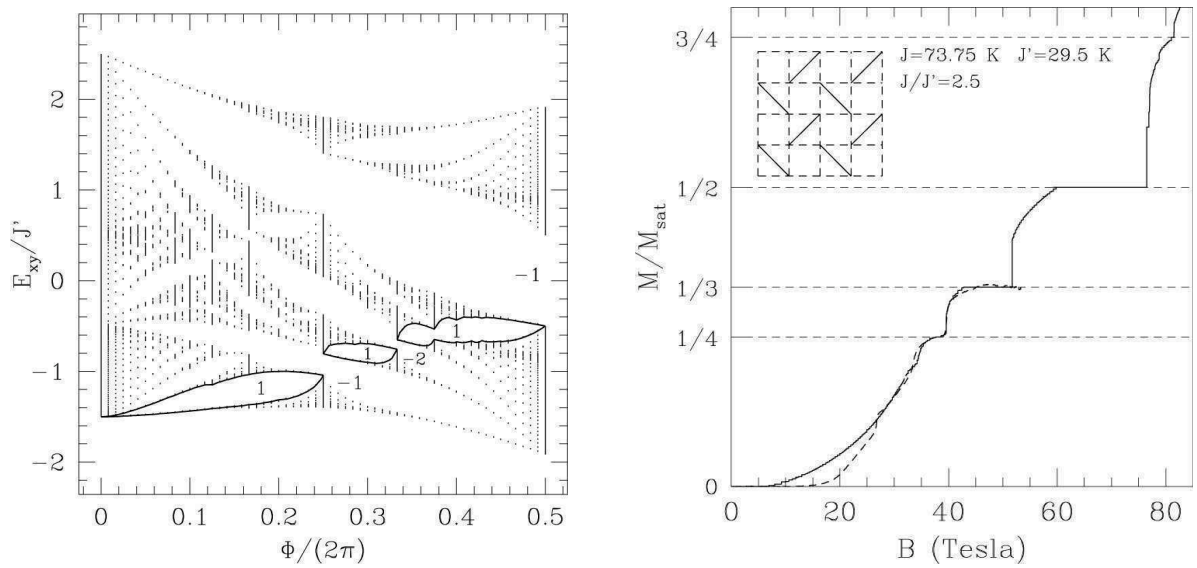


FIG. II.9: Pour le réseau de Shastry-Sutherland : spectre de $\mathcal{H}_{xy}$ (cf. l'équation (II.28)) qui est un spectre de Hofstadter en fonction du flux ϕ pour $J'/J = 1$ (à gauche). Les lignes épaisses inférieures (supérieures) indiquent le niveau de Fermi (l'état vide avec la plus basse énergie). Des saut du niveau de Fermi en fonction de l'aimantation correspondent directement aux plateaux d'aimantation et entraînent une discontinuité de la pente de l'énergie en fonction de l'aimantation. À droite : courbe d'aimantation correspondante, calculée avec l'approche de champ moyen (ligne continue) avec $J'/J = 0.4$ et mesurée pour le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ par Onizuka *et al.* [79] avec $J'/J \simeq 0.65$ (ligne tiretée). D'après Misguich *et al.* [107].

Comme le soulignent Misguich *et al.* [107], l'expression pour $\mathcal{H}_z$ dans l'équation (II.28) montre que le champ magnétique (réel) h correspond à un potentiel chimique pour les fermions auxquels sont joints des tubes de flux. Pourtant, le champ magnétique h n'affecte pas le flux *statistique*.
En choisissant une aimantation m du réseau de Shastry-Sutherland, l'équation (II.29) permet donc de calculer le flux ϕ et le nombre de fermions pour lesquels Misguich *et al.* calculent le spectre $E_{xy}(m)$ du hamiltonien H_{xy} de l'équation (II.28). Comme illustré dans la figure II.9, à gauche, $E_{xy}(m)$ montre un spectre de Hofstadter [141] où les sauts de l'énergie de Fermi en fonction de l'aimantation m correspondent aux plateaux d'aimantation. En conséquence, le spectre de Hofstadter pour le hamiltonien H_{xy} reflète les plateaux dans la courbe d'aimantation du système. Cette courbe peut enfin être calculée en ajoutant au spectre $E_{xy}(m)$ la contribution du hamiltonien $\mathcal{H}_z$, qui est calculée avec une deuxième approche de champ moyen. On obtient l'énergie totale $E(m)$, et la minimisation du terme $E(m) - hm$ par rapport à l'aimantation m (cf. l'équation (II.14)) nous donne enfin la courbe d'aimantation que nous présentons dans la figure II.9, à droite.
On voit que la courbe théorique est en bon accord avec la courbe expérimentale [79], même si le

résultat théorique se fonde sur un rapport des couplages $J'/J = 0.4$ qui ne correspond pas exactement à la valeur expérimentale $J'/J \simeq 0.65$ du composé $SrCu_2(BO_3)_2$. Le plateau $m = \frac{1}{4}$ est bien reproduit et le début du plateau $m = \frac{1}{3}$ est calculé correctement. En revanche, on remarque des différences quant au gap de spin et pour faible aimantation où des expériences montrent un plateau pour $m = \frac{1}{8}$ [78, 83] voire plusieurs plateaux : comme le discutent Sebastian *et al.* [82], une série de plateaux pour $m = \frac{1}{q}$ avec $4 \leq q \leq 9$ ainsi que pour $m = \frac{2}{9}$ (comme illustré dans la figure I.12), pourrait correspondre à un spectre de Hofstadter que l'on observe dans le composé $SrCu_2(BO_3)_2$. Pourtant, la série de plateaux est contestée [83] et demande plus d'études. Nous discutons ce composé ainsi que le réseau de Shastry-Sutherland en profondeur dans le chapitre VII.
Outre la comparaison aux résultats expérimentaux, Misguich *et al.* [107] prédisent également un large plateau pour $m = \frac{1}{2}$ qui n'est pas encore accessible aux expériences en raison des champs magnétiques trop élevés.

5 Conclusion partielle

Dans ce chapitre, nous avons discuté le comportement de dimères sous champ magnétique et présenté la correspondance entre ce modèle et le modèle de bosons de cœur dur. En plus, nous montrons la correspondance de ces deux modèles avec les fermions sans spin interagissants qui est exacte en une dimension. Ceci constitue un outil pratique et maniable afin d'interpréter la physique des aimants quantiques et en particulier des systèmes de dimères couplés. Nous exploitons cette correspondance pour l'analyse de dimères sous champ magnétique, plus précisément l'étude de gaps de spin et de plateaux d'aimantation, d'une part, et l'étude de modèles de bosons de cœur dur qui ont souvent des diagrammes de phase riches, d'autre part.
Les notions théoriques présentées vont nous aider à mieux comprendre et interpréter les résultats de nos approches aux différents modèles dans les chapitres IV à VII.

Chapitre III

Méthodes numériques

Dans le domaine de la matière condensée, intimement lié au problème à N-corps quantique, il existe très peu d'exemples de systèmes dont on sait calculer analytiquement les propriétés de basse énergie. Néanmoins, la théorie de la matière condensée, et en particulier le domaine des fermions fortement corrélés, a connu beaucoup de succès dans la description et la modélisation de matériaux expérimentaux, notamment grâce à des méthodes numériques qui permettent d'accéder à des grandes tailles de systèmes tout en étant moins biaisées que l'approche purement analytique. Parmi les méthodes les plus célèbres dans ce domaine, on compte la diagonalisation exacte qui vise à diagonaliser le hamiltonien microscopique pour un système considéré. Cela rend toutes les observables directement accessibles, mais en revanche la taille des systèmes est limitée à 40 sites environ puisque l'espace de Hilbert, et en même temps la taille de la matrice à diagonaliser, croît de façon exponentielle avec le nombre de sites. La section 1 de ce chapitre est consacrée à cette méthode et présente deux algorithmes de diagonalisation exacte qui sont largement utilisés, notamment ceux de Lanczos et de Davidson.
Dans la section 2 de ce chapitre, nous abordons une technique de renormalisation dans l'espace réel qui est moins connue et moins utilisée, mais qui est d'une importance cruciale pour cette thèse. Il s'agit de la méthode de « Contractor Renormalization (CORE) » qui a pour but de construire un hamiltonien effectif à partir d'un hamiltonien microscopique. Cette approche cherche à bien décrire la physique de basse énergie en réduisant la complexité, ce qui permet d'accéder à des plus grands systèmes que ceux disponibles en diagonalisation exacte. Contrairement au groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG), CORE n'est pas restreinte à des systèmes unidimensionnels et permet également d'étudier des systèmes frustrés ce qui n'est pas possible avec la méthode de Monte Carlo Quantique (QMC).
Ces deux méthodes brièvement mentionnés, à savoir le DMRG et le QMC, complètent les approches les plus utilisées pour des problèmes de magnétisme quantique et ne sont pas décrites en détail dans cette thèse. Résumons-les en quelques mots : comme la méthode CORE, le DMRG est une technique de renormalisation dans l'espace réel qui diagonalise de façon exacte de petits systèmes. Ensuite, la taille est agrandie itérativement et pendant chaque itération on se concentre sur les états les plus pertinents quant à la description de la physique de basse énergie. Ceci permet

d'augmenter la taille des systèmes accessibles d'un facteur 10 ce qui est considérable. Sans aucun doute, les plus grandes tailles sont abordables avec le QMC qui ne considère pas tous les états de l'espace de Hilbert. Plutôt, pour calculer une quantité, on évalue des valeurs moyennes basées sur un petit ensemble d'états qui sont les plus pertinents dans la statistique du système. Outre des grandes tailles accessibles jusqu'à 10.000 sites, un grand avantage du QMC est la possibilité de calculer des quantités à des températures finies. D'un autre côté, on essaye de remédier au fameux problème de signe qui limite l'application du QMC à des hamiltoniens non frustrés.
Dans ce qui suit, on va donc discuter la diagonalisation exacte ainsi que la méthode CORE. Toutes les deux sont utilisées pour calculer l'état fondamental de différents systèmes afin d'en tirer le comportement sous champ magnétique. Notre intérêt est en particulier dans la courbe d'aimantation et l'existence ou l'absence de plateaux d'aimantation.

1 Diagonalisation exacte

Cette méthode indispensable pour une grande variété de calculs dans des différents domaines de la physique est détaillée dans une revue de Dagotto [142] ainsi que dans d'autres articles [143, 144] et thèses [126, 128, 145]. L'introduction suivante est basée sur ces travaux.
Afin de trouver les énergies et valeurs propres d'un système considéré, la diagonalisation exacte propose de diagonaliser le hamiltonien $\mathcal{H}$ correspondant. Puisque cette méthode est limitée par la taille de l'espace de Hilbert du hamiltonien, il est essentiel d'utiliser les symétries du système, ce qui permet de travailler dans un sous-espace qui est plus petit.
Très généralement, la diagonalisation exacte est fondée sur l'idée d'appliquer le hamiltonien $\mathcal{H}$ sur un état initial $|x\rangle$ qui est choisi de façon aléatoire. L'énergie $E(x)$ de cet état est supérieure ou égale à l'énergie E_0 de l'état fondamental du hamiltonien selon le principe variationel

$$E(x) = \frac{\langle x|\mathcal{H}|x\rangle}{\langle x|x\rangle} \geq E_0. \tag{III.1}$$

Pour se rapprocher de l'énergie fondamentale, on a pour but de construire un sous-espace de l'espace de Hilbert qui contienne des vecteurs qui se rapprochent de plus en plus du fondamental. On suit la direction du gradient

$$\nabla E(x) = \frac{2}{\langle x|x\rangle}\big(\mathcal{H}|x\rangle - E(x)|x\rangle\big) \tag{III.2}$$

et on trouve alors nécessairement des énergies $E(x)$ plus petites dans ce sous-espace pour des hamiltoniens $\mathcal{H}$ hermitiens. En appliquant le hamiltonien $\mathcal{H}$ n fois, on construit le sous-espace $\{|x\rangle, \mathcal{H}|x\rangle, \mathcal{H}^2|x\rangle, \ldots, \mathcal{H}^n|x\rangle\}$ dont la méthode des puissances ne considère que le dernier état, notamment $(\mathcal{H} - \mathrm{cste})^n|x\rangle$, décalé vers le bas par une constante pour que le poids de l'état fondamental domine. On trouve que la méthode converge exponentiellement vite avec le nombre n

d'itérations à condition que le vecteur initial $|x\rangle$ soit non orthogonal à l'état fondamental.
Dans ce qui suit, deux algorithmes avec une convergence plus rapide sont présentés, notamment ceux de Lanczos et de Davidson.

1.1 Algorithme de Lanczos

La convergence de l'algorithme de Lanczos [146] vers l'état fondamental est exponentielle avec le nombre d'itérations n et plus rapide que celle de la méthode des puissances. Cet algorithme construit itérativement une base orthonormée dans laquelle le hamiltonien a une représentation tridiagonale. Le principe de l'algorithme se présente comme suit :
On part d'un vecteur aléatoire normé $|\psi_1\rangle$ et on lui applique le hamiltonien $\mathcal{H}$ pour calculer $\mathcal{H}|\psi_1\rangle$. On obtient $|\psi_2'\rangle = \mathcal{H}|\psi_1\rangle - a_1|\psi_1\rangle$ qui est orthogonal à $|\psi_1\rangle$ si on choisit $a_1 = \langle\psi_1|\mathcal{H}|\psi_1\rangle$. La normalisation de $|\psi_2'\rangle$ avec $b_1^2 = \langle\psi_2|\psi_2\rangle$ résulte en $|\psi_2\rangle = \frac{1}{b_1}|\psi_2'\rangle$. Ainsi, on trouve :

$$\mathcal{H}|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle + b_1|\psi_2\rangle. \tag{III.3}$$

Ensuite, on réitère afin de construire $|\psi_3'\rangle = \mathcal{H}|\psi_2\rangle - b_1|\psi_1\rangle - a_2|\psi_2\rangle$ qui est orthogonal à $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ avec $a_2 = \langle\psi_2|\mathcal{H}|\psi_2\rangle$. Après normalisation du vecteur $|\psi_3'\rangle$, on a :

$$\mathcal{H}|\psi_2\rangle = b_1|\psi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle + b_2|\psi_3\rangle. \tag{III.4}$$

Maintenant, on peut généraliser pour trouver une suite de coefficients a_i et b_i :

$$\mathcal{H}|\psi_i\rangle = b_{i-1}|\psi_{i-1}\rangle + a_i|\psi_i\rangle + b_i|\psi_{i+1}\rangle. \tag{III.5}$$

où $|\psi_{i+1}\rangle$ est normé et orthogonal à tous les vecteurs précédents $|\psi_j\rangle$ avec $j = 0, \ldots, i$. On peut donc exprimer le hamiltonien dans le sous-espace qui est engendré par les n itérations. Dans cette base tronquée, les (a_i) constituent les éléments diagonaux et les (b_i) constituent les éléments co-diagonaux tel que le hamiltonien s'écrit sous la forme tridiagonale suivante :

$$\mathcal{H}_n = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \ldots & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & b_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & \ldots & 0 & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix}. \tag{III.6}$$

Comme la dimension du hamiltonien dans la représentation initiale $N_{\mathcal{H}}$ peut atteindre des ordres de grandeur de 10^9 et plus, la représentation du hamiltonien dans cette base tronquée est bien sûr plus facile à traiter. En particulier, pour un nombre d'itérations $n \simeq 100$ on observe que l'énergie de l'état fondamental E_0^n est déjà convergée vers l'énergie exacte E_0 à la précision de la machine

(10^{-15}). En outre, pour chaque itération on a besoin de seulement trois vecteurs de dimension $N_{\mathcal{H}}$ afin de calculer les (a_i, b_i).

L'algorithme de Lanczos permet non seulement de calculer de manière très efficace les valeurs propres d'une matrice, c'est-à-dire les énergies propres d'un système physique, mais aussi les vecteurs propres et donc les fonctions d'onde correspondantes. Toutefois, pendant l'exécution de l'algorithme, seuls les (a_i, b_i) et le vecteur propre du dernier pas d'itération $|\psi_0^n\rangle = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i |i\rangle$, exprimé dans la base tronquée, sont stockés afin de minimiser le besoin de mémoire. Pour calculer l'état fondamental exprimé dans la bonne base, il est donc nécessaire de recalculer les états intermédiaires $|i\rangle = \sum_{c=1}^{N_{\mathcal{H}}} \gamma_c^i |c\rangle$, où $\{|c\rangle\}_{N_{\mathcal{H}}}$ est la base de l'espace de Hilbert. Repartant du même vecteur initial $|\psi_1\rangle$, on a :

$$|\psi_0\rangle = \sum_{c=1}^{N_{\mathcal{H}}} \left(\sum_{i=1}^{i} \alpha_i \gamma_c^i \right) |c\rangle. \tag{III.7}$$

La fonction d'onde de l'état fondamental rend accessible les corrélations statiques (cf. section 1.3 de ce chapitre) et dynamiques et constitue par conséquent une quantité de grande importance. Ce procédé permet en principe aussi de calculer les fonctions d'onde des états excités de basse énergie dont on a besoin pour la méthode de « Contractor Renormalization » qui est présentée dans la section 2 de ce chapitre. Pourtant, d'autres algorithmes sont favorisés dans ce but, car notamment l'algorithme de Lanczos engendre des états fantômes dits « ghosts » et ne résout pas correctement les dégénérescences comme discuté dans la section 1.5 de ce chapitre.

1.2 Algorithme de Davidson

L'algorithme de Davidson [147] permet de calculer de manière fiable les plus basses énergies propres et les vecteurs propres correspondants en évitant des états fantômes de l'algorithme de Lanczos. Puisqu'il est capable de bien résoudre des dégénérescences, l'algorithme de Davidson est particulièrement avantageux si on s'intéresse aux états excités bien que la consommation de mémoire soit plus élevée qu'avec l'algorithme de Lanczos. Dans ce qui suit, quelques différences entre les deux algorithmes sont discutées ce qui permet de plus facilement aborder le procédé de l'algorithme de Davidson.

Dans l'algorithme de Lanczos, après i itérations on obtient une représentation approximative de l'état fondamental $|\psi_0^i\rangle$ ainsi qu'une valeur variationnelle pour l'énergie propre correspondante $E_0^i \geq E_0$. Dans le cas où $|\psi_0^i\rangle$ représente le vrai état fondamental, le vecteur résiduel

$$|R^i\rangle = \mathcal{H}|\psi_0^i\rangle - E_0|\psi_0^i\rangle \tag{III.8}$$

est nul. Généralement ce n'est pas le cas et on peut montrer que l'algorithme de Lanczos va étendre le sous-espace variationnel selon la composante du vecteur $\mathcal{H}|\psi_0^i\rangle - E_0^i|\psi_0^i\rangle \simeq |R^i\rangle$ qui est orthogonal à ce sous-espace.

L'approche de l'algorithme de Davidson vise à améliorer la construction du vecteur résiduel par rapport à l'algorithme de Lanczos. Dans ce but, notons que le vrai vecteur résiduel $|R\rangle$ s'écrit

$$|R\rangle = |\psi_0\rangle - |\psi_0^i\rangle \tag{III.9}$$

où $|\psi_0\rangle$ est l'état fondamental exact. Par conséquent

$$(\mathcal{H} - E_0\mathbb{1})|R\rangle = -|R^i\rangle. \tag{III.10}$$

Or, on ignore l'énergie de l'état fondamental exact ce qui rend impossible l'application de cet équation dans l'algorithme. En outre, cette relation serait très difficile à inverser numériquement afin d'en tirer le vecteur résiduel $|R\rangle$. Par contre, si on approxime $\mathcal{H}$ par sa partie diagonale $\mathcal{D}$ et on remplace l'énergie exacte E_0 par $E_0^i \simeq E_0$, on peut aisément calculer le vecteur

$$|\tilde{R}\rangle = -(\mathcal{D} - E_0^i\mathbb{1})^{-1}|R^i\rangle \tag{III.11}$$

qui s'avère souvent être un meilleur vecteur résiduel que $|R^i\rangle$ pour étendre le sous-espace. On note aussi que l'on retrouve l'algorithme de Lanczos si on choisit $\mathcal{D} = \mathbb{1}$. Enfin, le procédé de l'algorithme de Davison pour calculer un état propre $|\psi_k\rangle$ avec l'énergie propre correspondante E_k se présente comme suit :

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

   $$|\varepsilon^l\rangle = (H - E_k^l B)|\psi_k^l\rangle \tag{III.12}$$

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

   $$|R^l\rangle = (\mathcal{D} - E_k^l\mathbb{1})^{-1}|\psi_k^l\rangle \tag{III.13}$$

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

Précisons enfin qu'en pratique, afin de limiter l'espace mémoire utilisé, on part d'un petit nombre de vecteurs aléatoires $\{|v_1\rangle, \ldots, |v_l\rangle\}$ que l'on orthonormalise et on fait quelques itérations jusqu'à un nombre de vecteurs maximal fixé par avance. Si la convergence n'est pas atteinte, on reprend

alors l'algorithme au début mais en se servant cette fois du résultat de la première série d'itérations. En raison de sa fiabilité quant aux fonctions d'onde des états excités, l'algorithme de Davidson est préféré à l'algorithme de Lanczos pour certains cas. Notamment, le groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG) introduit par White *et.al* [148–150] s'en sert. En outre, dans la méthode de Contractor Renormalization (CORE, cf. section 2 de ce chapitre), l'algorithme de Davidson est avantageux pour des systèmes de tailles moyennes qui ne sont plus accessibles avec les librairies d'algèbre linéaire BLAS/LAPACK.

1.3 Calcul d'observables

Observables dérivées du calcul de l'énergie

L'énergie est directement accessible avec la diagonalisation exacte et peut nous servir à dériver d'autres quantités. Dans ce but, on profite des différents secteurs de symétrie comme les secteurs de spin, charge ou impulsion. Considérons, par exemple, une chaîne de longueur L et analysons les gaps.

La connaissance de l'énergie de l'état fondamental et des excitations nous permettent de calculer les gaps de spin singulet et triplet ainsi que les gaps de charge à une ou plusieurs particules. En outre, une dégénérescence associée à un gap dans un certain secteur de l'impulsion indique une brisure de symétrie de translation. Un outil très pratique qui est aussi fondé sur les énergies sont les tours d'états [114] pour lesquelles on trace les énergies en fonction du spin $S(S+1)$. Cet outil peut aussi être appliqué au modèle de Heisenberg bidimensionnel avec échange cyclique à quatre spins. Également, on peut calculer la courbe de l'énergie en fonction de particules $E(N)$ ou du spin $E(S_z)$. Dans ce cas, on en déduit la courbe d'aimantation qui est probablement la quantité la plus importante de cette thèse. Les deux quantités $E(N)$ et $E(S_z)$ ainsi que leurs dérivées contiennent de l'information sur les gaps et les phases du système considéré. Pour la charge, on trouve pour le potentiel chimique et la compressibilité inverse

$$\mu = \frac{\partial E_0}{\partial N} \quad \text{et} \quad \kappa^{-1} = L\frac{\partial^2 E_0}{\partial N^2}, \tag{III.14}$$

et pour le spin on trouve le champ magnétique et la susceptibilité

$$H = \frac{\partial E_0}{\partial M} \quad \text{et} \quad \chi = \frac{1}{L}\frac{\partial^2 E_0}{\partial M^2}. \tag{III.15}$$

Afin de compléter les analogies, on trace les relations de dispersion $E(k)$ en fonction de l'impulsion. Cela permet d'étudier les modes et branches d'excitations et pour l'exemple d'un mode linéaire avec l'impulsion, sa vitesse est donnée par

$$v = \frac{\partial E_0}{\partial k}. \tag{III.16}$$

La dérivation de nombreuses quantités sont encore envisageable dont l'énergie d'un spinon dans une chaîne dimérisée ou le courant à partir d'un flux ϕ comme démontré dans la thèse de Roux [128].

Observables dérivées du calcul de l'état fondamental

Avec la fonction d'onde du fondamental $|\psi_0\rangle$, calculée avec la diagonalisation exacte, on peut calculer la valeur moyenne d'une observable statique à température nulle. En analysant les différents termes du hamiltonien on peut, par exemple, comparer la contribution de l'énergie cinétique avec celle de l'énergie potentielle d'interaction. Également, on a accès à des paramètres d'ordre locaux ou des fonctions de corrélations à temps égaux, comme nous le discutons dans la section 3 du chapitre VII où nous présentons des corrélations charge-charge pour le réseau de Shastry-Sutherland. Notons que si on obtient une erreur relative ε sur l'énergie après n itérations, l'erreur sur les coefficients du fondamental et donc sur les observables tirées du fondamental est d'ordre $\sqrt{\varepsilon}$. Le calcul des fonctions de corrélations à temps égaux est effectué soit dans l'espace direct, soit dans l'espace réciproque

$$C(i-j) = \langle\psi_0|A_j^\dagger A_i|\psi_0\rangle \quad \text{ou} \quad C(\mathbf{k}) = \langle\psi_0|A_\mathbf{k}^\dagger A_\mathbf{k}|\psi_0\rangle, \tag{III.17}$$

où la procédure dépend de l'espace choisi. Pour calculer les corrélations dans l'espace réel, comme par exemple $S_j^z S_i^z$ ou $c_j^\dagger c_i$, il est avantageux d'appliquer l'opérateur $A_j^\dagger A_i$ directement sur l'état fondamental avant de reprojeter sur $|\psi_0\rangle$. Afin de calculer des corrélations dans l'espace réciproque, comme pour l'exemple de $S_\mathbf{k}^\dagger S_\mathbf{k}$, il faut d'abord construire l'espace de Hilbert du secteur $\mathbf{k}$ si on suppose que le fondamental est dans le secteur $\mathbf{k} = 0$. Après avoir créé le vecteur intermédiare $|\psi_1\rangle = A_\mathbf{k}|\psi_0\rangle$, on calcule $C(\mathbf{k}) = \langle\psi_1|\psi_1\rangle$.

Une quantité de grande importance qui est accessible par ce procédé est notamment la matrice densité réduite qui est définie comme matrice densité d'un petit système ou bloc encadré dans un plus grand « super-bloc ». Elle joue un rôle crucial dans le célèbre groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG) introduit par White *et.al* [148, 149]. Dans la méthode de Contractor Renormalization (CORE) qui est présentée dans la section 2.3 de ce chapitre, le poids de la matrice densité réduite peut servir comme critère alternatif qui permet de mieux sélectionner les états importants d'un petit bloc encadré dans un plus grand système [124, 151].

Afin de définir la matrice densité réduite, considérons un sous-système $\mathcal{A}$ qui est inclus dans un plus grand système $\mathcal{B}$. Si le système complet $\mathcal{B}$ est dans l'état $|\Psi\rangle$, par exemple son état fondamental, la fonction d'onde peut être exprimée comme :

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b} \psi_{a,b}|a\rangle \otimes |b\rangle. \tag{III.18}$$

Ici, l'indice a note la somme sur tous les états du système $\mathcal{A}$ et b note la somme sur tous les états du système $\mathcal{B} \setminus \mathcal{A}$. La matrice densité, qui est de façon générale définie à température nulle comme :

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad , \tag{III.19}$$

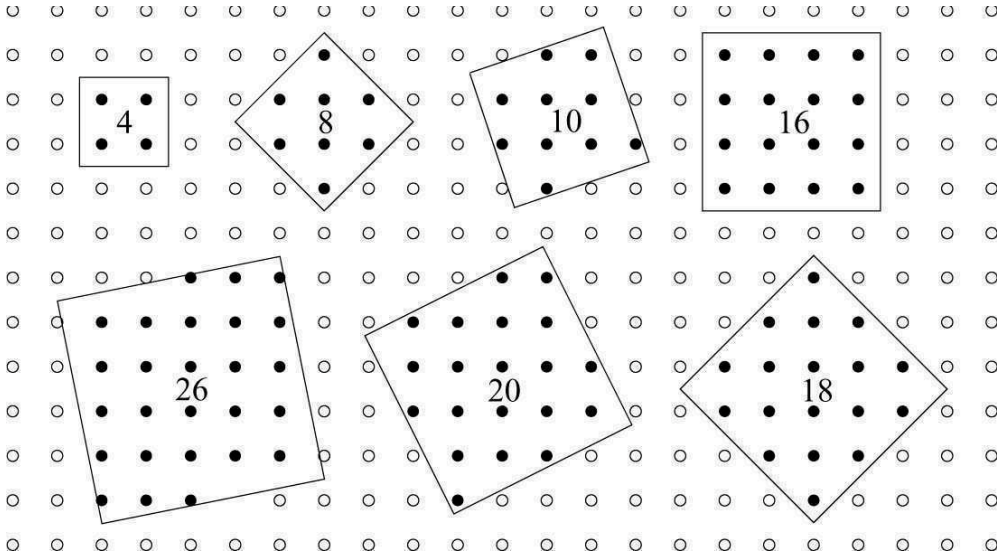


FIG. III.1: Les plus petits réseaux carrés en deux dimensions avec un nombre pair de sites. D'après Dorneich [145].

nous permet ensuite d'évaluer la matrice densité réduite $\rho^{\mathcal{A}}$ du système $\mathcal{A}$:

$$\rho^{\mathcal{A}}_{a,a'} = \mathrm{Tr}_{\mathcal{B}\setminus\mathcal{A}}\ \rho = \sum_b \psi_{a,b}\psi^*_{a',b}. \tag{III.20}$$

L'intérêt pour la méthode CORE consiste dans les valeurs propres de la matrice densité réduite $\rho^{\mathcal{A}}$ qui caractérisent la probabilité de trouver un état $|a\rangle$ dans le système $\mathcal{A}$ en supposant que le système complet soit dans l'état $|\Psi\rangle$. Cela permet de sélectionner les états pertinents ayant beaucoup de poids de la matrice densité réduite. De cette façon, on vise à bien décrire la physique du bloc tout en réduisant la taille de l'espace de Hilbert et donc sa complexité. Comme discuté dans la section 2.3 de ce chapitre, cette méthode peut donc servir à remplacer le critère de l'énergie afin de sélectionner les états sur lesquels CORE est basée.

1.4 Notions sur une implémentation efficace

Réseaux utilisés

Les réseaux des systèmes quasi-unidimensionnels comme les chaînes et les échelles sont faciles à traiter puisque l'on peut aisément réaliser des réseaux d'une certaine taille souhaitée. Avec la connaissance de résultats analytiques, on peut ensuite effectuer le passage à la limite thermodynamique comme discuté dans la section 1.5 de ce chapitre.

Pour les réseaux bidimensionnels, seulement certaines tailles permettent une géometrie carrée avec un nombre de sites pair. Comme illustré dans la figure III.1, on utilise des réseaux penchés avec $n^2 + m^2$ sites, où n, m sont des entiers. En outre la compréhension des effets de taille finie est une

tâche difficile ce qui complique d'effectuer des extrapolations sur le comportement dans la limite thermodynamique.

Codage des états

Dans le langage de la seconde quantification, un état $|\psi\rangle$ de n électrons est construit par l'application de n opérateurs de création $c^\dagger_{i,\sigma}$ sur l'état du vide $|0\rangle$ où pour des spin-$\frac{1}{2}$ du modèle de Heisenberg chaque opérateur crée un électron de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ sur le site i. On exprime la configuration électronique correspondante $|c\rangle$ par des groupements de bits et on associe un nombre entier $\mathcal{N}(|c\rangle)$. Pour des spin-$\frac{1}{2}$ du modèle de Heisenberg, un seul bit est suffisant afin de coder un état électronique d'un site en sorte que pour quatre électrons, on a :

$$|\psi\rangle = c^\dagger_{1,\uparrow} c^\dagger_{2,\downarrow} c^\dagger_{3,\downarrow} c^\dagger_{4,\uparrow} |0\rangle = |\uparrow,\downarrow,\downarrow,\uparrow\rangle \Leftrightarrow \mathcal{N}(|c\rangle) = \mathcal{N}(|1001\rangle) = 9. \tag{III.21}$$

Pour des fermions, les opérateurs anticommutent et il faut définir une convention de l'ordre des opérateurs si les fermions peuvent s'échanger. Chaque permutation de deux opérateurs de création (de annihilation) entraîne donc un facteur de -1 de sorte que l'on obtient enfin un préfacteur de ± 1 dit « signe fermionique ».

Des modèles avec plus de deux états par site, comme par exemple le modèle de Hubbard ou des modèles effectifs dérivés avec la méthode CORE, nous obligent de prévoir plus d'un seul bit afin de coder un état électronique. Les quatre états par site du modèle de Hubbard (cf. l'équation (I.1)), par exemple, peuvent être stockés avec deux bits comme : $|0\rangle = |00\rangle, |\uparrow\rangle = |10\rangle, |\downarrow\rangle = |01\rangle$ et $|\uparrow\downarrow\rangle = |11\rangle$. Par contre, un modèle effectif que l'on peut dériver avec CORE, peut atteindre jusqu'à 10 états par site voire plus et en conséquence, le stockage de ce modèle nécessite quatre bits ou plus. Considérons un exemple de l'équation (IV.8) de la section 2 du chapitre IV où l'on a six états par site, dont deux états singulets ($|S_A\rangle$ et $|S_B\rangle$) avec spin $S = S_z = 0$, trois états triplets polarisés ($|T_A\rangle$, $|T_B\rangle$ et $|T_C\rangle$) avec $S = 1$ et $S_z = +1$ et un état quintet complètement polarisé ($|Q\rangle$) avec $S = 2$ et $S_z = +2$. Afin de stocker ces six états, on les numérote en commençant avec 0 et ensuite on prend le numéro de l'état dans la base binaire ce qui nécessite trois bits. Ainsi, on a pour les deux états singulet $S_A = |000\rangle$ et $S_A = |001\rangle$, les trois triplets sont stockés comme $T_A = |010\rangle$, $T_B = |011\rangle$ et $T_C = |100\rangle$ et enfin le quintet $|Q\rangle = |101\rangle$. Dans ce but, on doit également stocker des informations supplémentaires pour chaque état, comme le spin S ou la composante S_z ou bien la charge.

Utilisation des symétries

Les hamiltoniens que l'on étudie et que l'on aimerait diagonaliser possèdent souvent un grand nombre de symétries qui sont liées à des quantités conservées. En fonction du système considéré, on observe par exemple la symétrie du groupe de translation où pour un secteur de symétrie l'impulsion est conservée. Les autres symétries incluent l'invariance de rotation du système, la symétrie $U(1)$ comme la rotation autour une direction z (S_z^{tot} conservé), l'invariance de jauge globale (nombre de particules conservé) et la symétrie de rotation du spin $SU(2)$ (spin total conservé). Une utilisation astucieuse des symétries permet de diagonaliser le hamiltonien par bloc où chaque

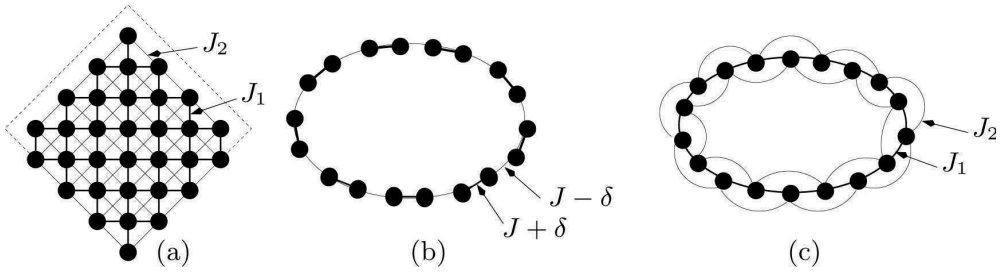


FIG. III.2: Schéma de réseaux différents avec le couplage au premier voisin noté par J_1 (ou seulement J), le couplage au deuxième voisin noté par J_2 et δ comme dimérisation. (a) Le réseau carré de $\sqrt{32} \times \sqrt{32}$ sites, (b) la boucle dimérisée, (c) la boucle frustrée. Cf. figure III.1. D'après Laflorencie et Poilblanc [144].

bloc correspond à une représentation irréductible d'un groupe de symétrie. Comme les tailles de ces blocs sont plus petites que la taille de l'espace de Hilbert complet, la tâche de la diagonalisation est rendue beaucoup plus facile comme le montre le tableau III.1 pour quelques exemples. Pour une implémentation efficace il est donc indispensable de profiter au maximum des symétries car la consommation de mémoire ainsi que de temps de calcul sont diminués considérablement ce qui permet d'accéder à des plus grands systèmes.

Modèle	**Taille du réseau**	**Groupe de symétrie**	**Taille typique de l'espace de Hilbert réduit**
2D Isotrope	6×6	$T_{36} \otimes C_{4v} \otimes I_2$	9 075 135 300/576
1D $J_1 - J_2$	32×1	$T_{32} \otimes C_2 \otimes I_2$	601 080 390/128
1D $J_1 - J_2 - \delta$	32×1	$T_{16} \otimes I_2$	601 080 390/32

TAB. III.1: Groupe de symétrie et taille typique de l'espace de Hilbert réduit, calculée comme taille de l'espace intégral dans le secteur $S_z = 0$ divisée par le nombre de symétries, pour trois modèles antiferromagnétiques de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg (cf. figure III.2). Les symétries notées sont : T_N pour le groupe de translation $\mathcal{T}$, I_2 pour l'inversion de spin $S^Z_{\mathbf{x}} \to -S^Z_{\mathbf{x}}$ et C_N pour le groupe cyclique. D'après Laflorencie et Poilblanc [144].

Afin de minimiser la consommation de mémoire pendant la diagonalisation exacte d'un hamiltonien, différentes techniques sont utilisées en profitant de ces symétries. Notamment, on ne stocke que les états ou configurations dits « représentatifs », c'est-à-dire des configurations qui ne sont pas mutuellement reliées en appliquant les symétries d'espace. Ensuite, parmi un nombre de configurations qui sont liées par des symétries d'espace, on choisit comme configuration représentative pour des raisons pratiques le plus petit nombre entier correspondant, selon l'équation (III.21). Comme expliqué par Laflorencie et Poilblanc [144] ainsi que dans les thèses de Dorneich [145] et

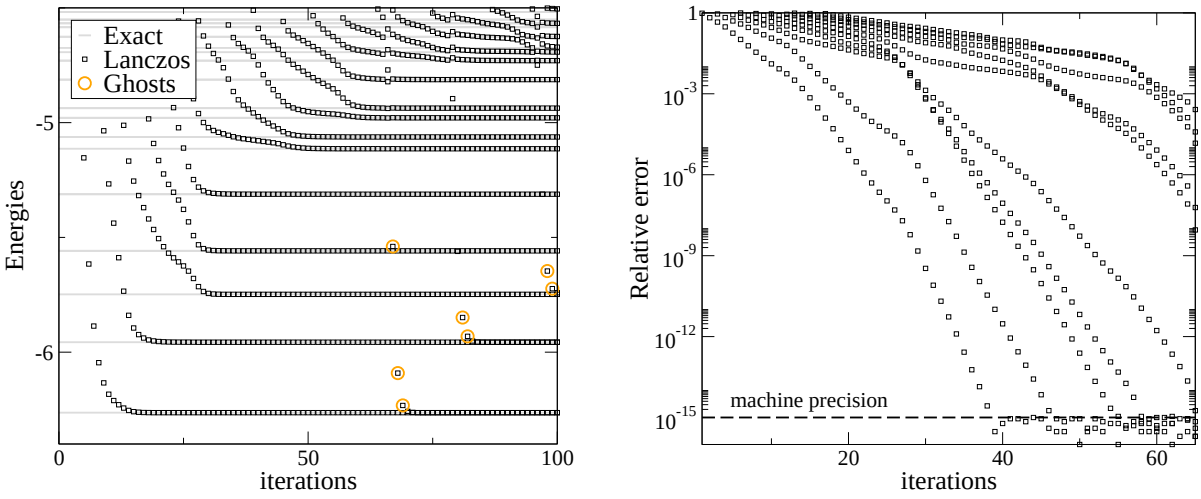


FIG. III.3: Convergence de l'algorithme de Lanczos. À gauche, la convergence du spectre de basse énergie de la matrice tridiagonale vers le spectre exact calculé indépendamment. Les cercles indiquent les énergies douteuses associées à l'apparition de vecteurs fantômes, dits « ghosts ». À droite, l'erreur relative $\left|E^k_{\text{lanczos}}(i) - E^k_{\text{exact}}\right| / \left|E^k_{\text{exact}}\right|$ après i itérations pour les $k = 1, \ldots, 10$ plus petites valeurs propres. La convergence est sensiblement exponentielle jusqu'à la précision de la machine. D'après Roux [128].

Roux [128], il y a encore beaucoup d'autres moyens pour optimiser la performance de l'algorithme de la diagonalisation exacte tout en tenant compte de dégénérescence potentielles [152]. Le lecteur est prié de s'adresser aux références données pour plus de détails car ces points techniques ne sont pas au cœur de cette thèse.

1.5 Convergence et effets de taille finie

L'efficacité de la diagonalisation exacte dépend fortement d'une utilisation des symétries astucieuse, d'une implémentation optimisée du produit $\mathcal{H}|\psi\rangle$ et d'une bonne performance de l'algorithme choisi. Notamment, pour l'algorithme de Lanczos, on observe une convergence exponentielle comme le montre l'exemple dans la figure III.3. On note que la convergence sur un état propre est d'autant plus rapide qu'il est bien séparé en termes d'énergie. L'utilisation des symétries ne sert donc pas seulement à minimiser le besoin de mémoire afin de stocker l'espace de Hilbert, mais aussi à rendre plus rapide la convergence puisque la densité du spectre à basse énergie est diminuée. Comme discuté dans la section 1.3, une erreur relative ε sur l'énergie du fondamental entraîne une erreur relative d'ordre $\sqrt{\varepsilon}$ sur les observables tirées du fondamental. Par conséquent, le nombre d'itérations doit être augmenté pour les calculs d'observables comme les fonctions de corrélations, comme le montre la figure III.4.
À côté de son plus grand avantage, notamment la convergence exponentielle, la figure III.3 révèle

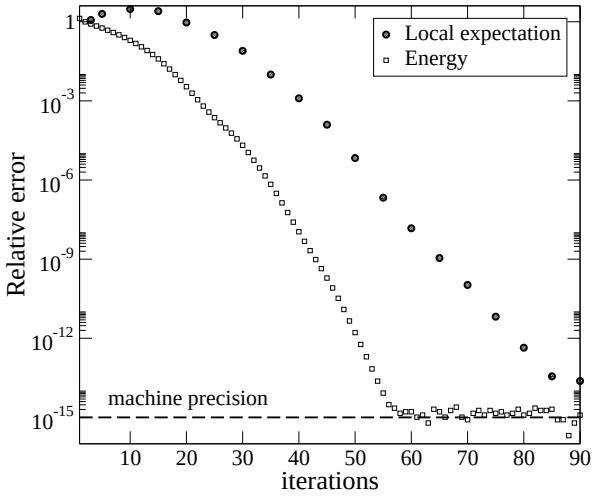


FIG. III.4: Convergence de l'algorithme de Lanczos pour une mesure locale qui traduit la convergence de la représentation du fondamental plus lente que celle de l'énergie. D'après Roux [128].

aussi le plus grand désavantage de l'algorithme de Lanczos. Pendant l'exécution de l'algorithme des erreurs d'arrondis apparaissent après un certain nombre d'itérations ce qui provoque l'apparition de vecteurs fantômes avec des valeurs propres de basse énergie douteuses. Avec un plus grand nombre d'itérations ces vecteurs convergent vers l'état propre d'énergie plus basse le plus proche ce qui engendre des dégénérescences non physiques dans le spectre de basse énergie. Cela ne gêne pas le calcul de l'énergie de l'état fondamental, mais rend évidemment douteux le calcul des états excités comme le montre le tableau III.2. Dans le calcul utilisant l'algorithme de Lanczos on re-

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

TAB. III.2: Gestion des dégénérescences exactes lorsque toutes les symétries ne sont pas utilisées sur les 4 premiers *états excités*. Le Lanczos ne donne pas les dégénérescences exactes (et en donne certaines absurdes dues aux vecteurs fantômes) alors que le Davidson les résout correctement au prix d'un plus grand nombre d'itérations. D'après Roux [128].

connaît la mauvaise gestion des dégénérescences exactes due aux vecteurs fantômes. L'algorithme de Davidson offre des avantages en évitant les vecteurs fantômes ce qui rend cet algorithme fiable

quant aux dégénérescences et aux états excités. En revanche, pour des nombreux systèmes l'algorithme de Davidson converge plus lentement que l'algorithme de Lanczos.
Une autre limitation de la diagonalisation exacte sont les tailles des réseaux accessibles qui, avec 40 sites au maximum, sont relativement petites comparées avec des autres méthodes numériques comme le DMRG ou le Monte Carlo Quantique (QMC). Grâce à des résultats analytiques, on peut dans quelques cas toutefois dériver des quantités dans la limite thermodynamique, en particulier pour des systèmes unidimensionnels.
Par contre, en deux dimensions, la compréhension des effets de taille finie n'est pas facile. En outre, seulement peu de tailles de système avec une géométrie carrée et un nombre de sites pair sont accessibles, comme le montre la figure III.1. Cela rend très difficile d'effectuer des extrapolations sur le comportement dans la limite thermodynamique.

2 La méthode de « Contractor Renormalization (CORE) »

Introduite par Morningstar et Weinstein en 1994 [153, 154], la méthode de « Contractor Renormalization (CORE) » est une technique de renormalisation dans l'espace réel, conçue afin d'étudier la physique de théories de champ quantique sur réseau. Cette approche non perturbative permet d'étudier des systèmes magnétiques [151, 155–159] et dopés [160, 161] en construisant un hamiltonien effectif à partir d'un hamiltonien microscopique sur réseau comme par exemple du modèle d'Ising, Heisenberg ou Hubbard. Le hamiltonien dérivé réduit la complexité du système considéré car il agit dans un espace Hilbert réduit tout en reproduisant la physique de basse énergie. En conséquence, le modèle microscopique initial est remplacé par un modèle effectif avec moins d'états et un hamiltonien plus complexe à condition que les états sur lesquels CORE est basé aient une projection suffisante sur les états propres de plus basse énergie du modèle initial. Le modèle effectif peut ensuite être étudié en déduisant des quantités qui caractérisent sa physique, comme des interactions à différentes distances et des termes de saut de particules. On peut également étudier le modèle effectif avec des méthodes numériques, comme la diagonalisation exacte, le Monte Carlo Quantique, etc.
Afin de mieux comprendre la méthode CORE, nous allons d'abord traiter dans la section 2.1 de ce chapitre le groupe de renormalisation dans l'espace réel dit « naïf » d'après Wilson [162, 163]. Malgré ses succès, cette approche a des limitations dues à une description insuffisante des interactions et les autres techniques de renormalisation dans l'espace réel ont pour but d'améliorer cette défaillance.
Une amélioration prometteuse est l'introduction des interactions effectives qui peuvent être dérivées en se fondant sur la théorie des hamiltoniens effectifs de Bloch [164] ou de desCloizeaux [165], par exemple. Par conséquent, la section 2.2 est consacrée à une formulation efficace de la théorie des hamiltoniens effectifs ainsi qu'à une méthode de renormalisation dans l'espace réel qui y recourt.

L'idée des hamiltoniens effectifs est aussi utilisée dans la méthode CORE de Morningstar et Weinstein [153, 154] dont la section 2.3 de ce chapitre présente le procédé détaillé. Dans le reste de ce chapitre, la méthode CORE est expliquée de façon plus approfondie : dans la section 2.4, quelques commentaires précisent le procédé en discutant quelques points techniques et dans la section 2.5, l'application de CORE est illustrée avec deux exemples simples qui montrent son utilité et qui permettent une meilleure compréhension. Ensuite, la méthode CORE est appliquée à différents modèles dans les chapitres IV à VII, où le chapitre IV, qui traite des échelles de spin, est plutôt pédagogique en détaillant des points techniques de la méthode.
La description détaillée de la méthode CORE est largement fondée sur les articles initiaux de Morningstar et Weinstein [153, 154] et un article pédagogique d'Altman et Auerbach [160]. Il s'agit en conséquence, d'une description de l'idée initiale de la méthode et les développements récents, comme par exemple une approche généralisée dite Extended Contractor Renormalization (ENCORE) d'Albuquerque *et al.* [166, 167] ainsi qu'une approche de CORE légèrement modifiée par Siu et Weinstein [168], ne sont pas pris en compte. Par contre, une approche de Capponi *et al.* [151] qui utilise aussi le poids de la matrice densité réduite et non seulement l'énergie pour justifier le choix d'états va être présentée en profondeur.

2.1 Le groupe de renormalisation dans l'espace réel « naïf »

Une formulation efficace et puissante du groupe de renormalisation dans l'espace réel (RSRG), aussi dit « naïf », fut présentée par Wilson [162, 163]. Cette approche est applicable aux modèles quantiques sur réseau et très utile afin d'étudier des transitions de phase continues et en particulier le problème de Kondo [169]. L'idée de base de ce processus itératif est de considérer un petit système dans l'espace réel et lors de chaque itération d'agrandir la taille du système tout en réduisant les degrés de liberté. Plus précisément, l'approche du groupe de renormalisation naïf dans l'espace réel se présente comme suit :

– Premièrement, le système considéré est subdivisé en des petits blocs de taille L, en notant H_0 le hamiltonien de ce bloc élémentaire et V_0 le hamiltonien du système entre deux blocs élémentaires voisins.
– Ensuite, on diagonalise H_0 et on ne prend en compte que les M états de plus basse énergie parmi tous les N états propres. Ces M états constituent l'espace réduit de basse énergie de l'espace de Hilbert du hamiltonien complet du bloc élémentaire. Puis, on appelle $H_{0,trunc}$ la projection de H_0 sur l'espace réduit d'un bloc élémentaire et, de façon analogue, $V_{0,trunc}$ la projection de V_0 sur l'espace réduit du système entre deux blocs élémentaires.
– Comme le montre la figure III.5, lors de la prochaine itération, les blocs initiaux sont remplacés par des sites, dits « super-sites ». Le hamiltonien tronqué $H_{0,trunc}$ caractérise les degrés de liberté d'un nouveau site dans le nouveau réseau et $V_{0,trunc}$ caractérise le hamiltonien entre deux super-sites.

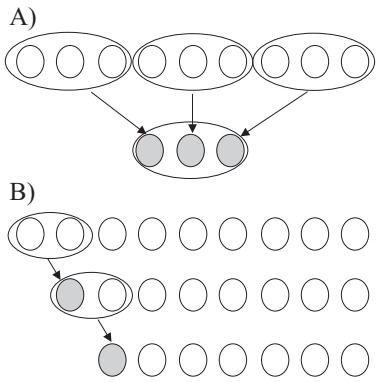


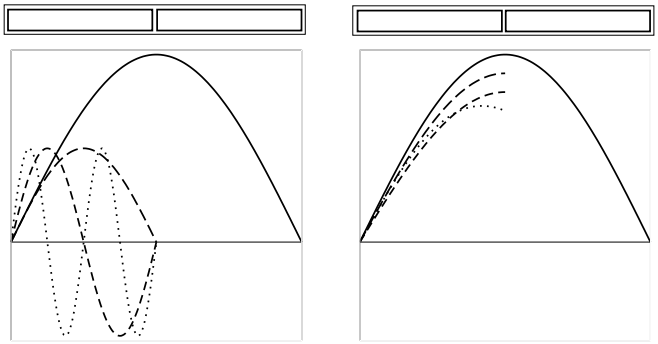
FIG. III.5: Renormalisation d'un système uni-dimensionnel : (A) D'après Wilson [162, 163] la chaîne est subdivisée en blocs de trois sites et chaque bloc renormalisé constitue un nouveau site. (B) Par contre, cet exemple du DMRG n'ajoute qu'un site par itération. D'après Siu et Weinstein [170].

– La procédure continue en identifiant un nouveau bloc élémentaire qui consiste de L super-sites et dont le hamiltonien est H_1.
– Enfin, cette itération est complétée par la troncation du hamiltonien d'un nouveau bloc élémentaire H_1 et du hamiltonien caractérisant le système entre deux nouveaux blocs élémentaires V_1.

De cette manière, pendant chaque itération n on construit H_{n+1} et V_{n+1} à partir de H_n et V_n, respectivement. À partir d'un petit bloc, on agrandit le système peu à peu et on se concentre sur les états de basse énergie pour chaque système intermédiaire. Ainsi les états excités de haute énergie sont tronqués et supprimés et le procédé cible l'état fondamental et quelques états excités de basse énergie du système infini. Enfin, ce processus est convergé quand les hamiltoniens obtenus ne changent que de façon négligeable lors d'une itération.

Malgré ces succès, ce procédé a aussi des limitations. Notamment, il implique que l'état fondamental du système infini est bien décrit par l'état fondamental des petits bloc élémentaires dont consiste le système infini. Cette hypothèse n'est pas toujours bien justifiée car il est possible que des états excités d'un petit bloc contribuent à l'état fondamental du système infini.

L'un des problèmes les plus connus de cette approche est la particule libre sur une chaîne de taille finie. La fonction d'onde a un profil sinusoïdal et s'étend sur toute la chaîne comme illustrée dans la Fig. III.6. Or, le groupe de renormalisation naïf subdivise la chaîne en petits blocs dont fonctions d'onde sont nulles aux bords de chaque bloc ce qui rend impossible de trouver la bonne fonction d'onde. Cette difficulté de l'approche naïve est remédiée dans des méthodes de groupe de renormalisation plus récents comme la méthode de Contractor Renormalisation ainsi que le célèbre groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG) introduit par White *et al.* [148, 149] dont la Fig. III.5 montre un schéma simple. Avant de présenter la méthode CORE, considérons d'abord une approche similaire qui est également capable d'éviter les problèmes de l'approche naïve.



RG DMRG

FIG. III.6: Problème d'une particule libre sur une chaîne : à gauche, les états propres de plus basse énergie d'un bloc élémentaire selon le groupe de renormalisation « naïve » ne sont pas une bonne base afin de décrire la fonction d'onde du système complet. À droite, le DMRG démontre des grands avantages. D'après Roux [128].

2.2 Le groupe de renormalisation dans l'espace réel avec des interactions effectives

Le groupe de renormalisation naïf a un point faible dans la prise en compte des interactions entre les blocs et il y a différentes stratégies pour mieux capturer la physique de basse énergie d'un système quantique sur réseau. Une approche prometteuse est l'introduction d'interactions effectives entre les blocs dans la technique du groupe de renormalisation. Ceci peut être effectué en utilisant la théorie des perturbations quasi-dégénérées, comme le proposent Lepetit et Manousakis [171] ou bien en utilisant la théorie des hamiltoniens effectifs de Bloch [164, 165], comme proposé par Malrieu et Guihéry [172].
Par rapport au RSRG naïf, ces deux idées sont capables d'améliorer considérablement la précision des calculs et notamment les hamiltoniens effectifs ont été appliqués avec succès dans différents domaines [173, 174] comme la physique et la chimie quantique, la physique nucléaire et relativiste. C'est pourquoi, outre la similarité avec la méthode CORE, nous discutons dans ce qui suit le procédé de Malrieu et Guihéry [172, 175] en quelques détails. Revoyons d'abord les idées fondamentales des hamiltoniens effectifs afin de faciliter la compréhension de la discussion suivante.

Les hamiltoniens effectifs

Le but de cette approche est de trouver un hamiltonien effectif $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ qui contienne le spectre de basse énergie du hamiltonien exact H et dont les vecteurs propres soient représentatifs. Les solutions du hamiltonien exact engendrent un espace de Hilbert qui est divisé dans le sous-espace S que nous cherchons et un espace orthogonal $S^{\perp}$. On associe les projecteurs P au sous-espace S et Q au sous-espace $S^{\perp}$ et on a :

$$P^2 = P, \qquad Q^2 = Q, \qquad P + Q = 1. \tag{III.22}$$

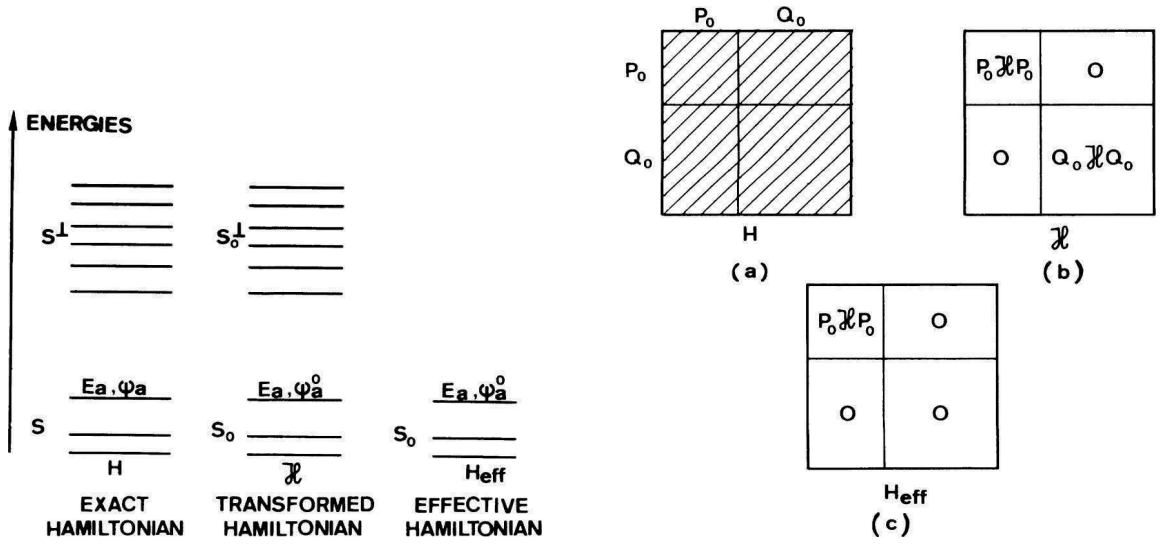


FIG. III.7: À gauche : le hamiltonien exact H, le hamiltonien transformé $\mathcal{H} = U^{-1}HU$ et le hamiltonien effectif $\mathcal{H}_{\text{eff}} = P_0^{-1}HP_0$ ont les mêmes énergies dans les sous-espace S et l'espace modèle S_0, respectivement. À droite : représentation du hamiltonien exact (a), du hamiltonien transformé (b), et du hamiltonien effectif (c) dans l'espace modèle S_0 (avec le projecteur P_0) et le sous-espace orthogonal (avec le projecteur Q_0). D'après Durand [173].

On peut également diviser l'espace de Hilbert dans un sous-espace nommé espace modèle S_0 qui contient les solutions approximatives de basse énergie du hamiltonien exact d'une part et l'espace orthogonale $S^\perp$ d'autre part. De façon analogue, on associe les projecteurs P_0 au sous-espace S_0 et Q_0 au sous-espace $S^\perp$, comme illustré dans la figure III.7 à gauche, et on a :

$$P_0^2 = P_0, \qquad Q_0^2 = Q_0, \qquad P_0 + Q_0 = 1. \tag{III.23}$$

Pour trouver des hamiltonien effectifs à partir du hamiltonien exact H, on considère d'abord la relation d'équivalence suivante qui nous donne le hamiltonien transformé $\mathcal{H}$:

$$\mathcal{H} = U^{-1}HU. \tag{III.24}$$

La transformation U doit être inversible, mais par forcement unitaire et sert à découpler $\mathcal{H}$ dans les deux sous-espaces S_0 et $S^\perp$:

$$\mathcal{H} = P_0\mathcal{H}P_0 + Q_0\mathcal{H}Q_0 \qquad \text{où} \qquad \mathcal{H}_{\text{eff}} = P_0\mathcal{H}P_0. \tag{III.25}$$

La figure III.7 à droite illustre l'effet de la transformation U sur le hamiltonien exact H. On y voit que le hamiltonien effectif $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ correspond à la partie du hamiltonien transformé $\mathcal{H}$ qui est engendré par le projecteur P_0 sur l'espace modèle S_0. Comme le montre Durand [173], on peut

choisir une autre transformation U plus générale qui permet de déduire d'autres transformations connues. Elle est définie comme suit :

$$U = P(P_0PP_0)^{-\nu} + Q(Q_0QQ_0)^{-\nu}. \tag{III.26}$$

Ce choix de transformation s'avère être très adroit et puissant puisque, si les projecteurs sont bien définis, on peut choisir différentes valeurs pour l'exposant $\nu \geq 0$. Ainsi, on trouve les hamiltoniens effectifs d'Ôkubo [176] $\mathcal{H}_{\text{eff,}\hat{\text{O}}}$, de Bloch [164] $\mathcal{H}_{\text{eff,B}}$ et de desCloizeaux [165] $\mathcal{H}_{\text{eff,dC}}$:

$$\begin{aligned}
\nu = 0 : &\quad \mathcal{H}_{\text{eff,}\hat{\text{O}}} = (P_0PP_0)^{-1}PHP_0, \\
\nu = 1 : &\quad \mathcal{H}_{\text{eff,B}} = P_0HP(P_0PP_0)^{-1} \qquad \text{où} \qquad \mathcal{H}_{\text{eff,B}} = \mathcal{H}^{\dagger}_{\text{eff,}\hat{\text{O}}}, \\
\nu = \frac{1}{2} : &\quad \mathcal{H}_{\text{eff,dC}} = (P_0PP_0)^{-\frac{1}{2}}PHP(P_0PP_0)^{-\frac{1}{2}}.
\end{aligned} \tag{III.27}$$

La transformation U permet donc de dériver des hamiltoniens effectifs directement à partir du hamiltonien exact et par conséquent, cette approche constitue une méthode rapide et de grande transparence, comme le souligne Durand [173]. Quand même, on doit vérifier qu'il y ait une correspondance entre l'espace modèle S_0 et le sous-espace exact S ce qui n'est pas le cas, par exemple, lors de l'apparition d'états intrus dans l'espace modèle [173, 174].

Application des hamiltoniens effectifs dans une méthode de renormalisation dans l'espace réel

La théorie des hamiltoniens effectifs de Bloch [164] trouve son application dans une méthode de renormalisation dans l'espace réel qui a été proposée par Malrieu et Guihéry [172]. Cette approche cherche à trouver un hamiltonien effectif dans un sous-espace de l'espace de Hilbert exact et se présente en détail comme suit.

Pour commencer, on divise un super-bloc de N_T sites de spin-$\frac{1}{2}$ en N_B blocs qui contiennent chacun un nombre impair de sites. La taille du super-bloc est limitée puisqu'on calcule un nombre N_m d'états propres $|\Psi^0_m\rangle$ du super-bloc en utilisant des méthodes de diagonalisation exacte (voir les sections 1.1 et 1.2 de ce chapitre) à partir de :

$$\mathcal{H}^{(0)}_{\text{SB}}|\Psi^{(0)}_m\rangle = E^{(0)}_m|\Psi^{(0)}_m\rangle, \tag{III.28}$$

où l'exposant $^{(0)}$ indique le nombre de l'itération. Les N_m états sont choisis selon leur pertinence pour la quantité physique à laquelle on s'intéresse ce qui constitue un pas important du procédé puisqu'ensuite toute autre information est perdue. Ils définissent l'espace cible $S = \{|\Psi^{(0)}_m\rangle\}$ auquel on associe le projecteur :

$$P_S = \sum_{m=1}^{N_m} |\Psi^{(0)}_m\rangle\langle\Psi^{(0)}_m|. \tag{III.29}$$

Avec l'espace cible défini, on cherche l'espace modèle que l'on construit à partir des blocs qui constituent le super-bloc. Pour un seul bloc avec le hamiltonien correspondant $\mathcal{H}^{(0)}_{\text{bloc}}$, on calcule les états propres $|\phi^{(0)}_i\rangle$ de plus basse énergie :

$$\mathcal{H}^{(0)}_{\text{bloc}}|\phi^{(0)}_i\rangle = e^{(0)}_i|\phi^{(0)}_i\rangle. \tag{III.30}$$

Pour chaque bloc, les N_i états de plus basse énergie sont gardés et ensuite l'espace modèle S_0 est construit comme le produit tensoriel des N_i états de chaque bloc. Ainsi, $S_0 = \{|\Phi_k^{(0)}\rangle\} = \{|\phi_1^{(0)}\rangle\}\otimes \cdots \otimes \{|\phi_{N_{bloc}}^{(0)}\rangle\}$ représente un espace de Hilbert réduit pour le super-bloc avec un isomorphisme entre l'espace modèle S_0 et l'espace cible S ce qui implique que

$$\dim(S_0) = N_i^{N_{bloc}} = N_m = \dim(S). \tag{III.31}$$

Comme projecteur associé à l'espace modèle S_0, on a

$$P_0 = \sum_{k=1}^{N_m} |\Phi_k^{(0)}\rangle\langle\Phi_k^{(0)}| \tag{III.32}$$

et on peut ensuite évaluer la projection du vecteur propre $|\Psi_m^{(0)}\rangle$ du super-bloc sur l'espace modèle S_0 selon $|\tilde{\Psi}_m^{(0)}\rangle = P_0|\Psi_m^{(0)}\rangle$.
Il est important de noter que le succès de la méthode dépend du choix des états $|\Psi_m^{(0)}\rangle$ du super-bloc et de leurs projections sur l'espace modèle. Plus les normes des projections $|\tilde{\Psi}_m^{(0)}\rangle$ des états $|\Psi_m^{(0)}\rangle$ sur l'espace modèle sont grandes, plus l'espace modèle S_0 et l'espace cible S sont en correspondance. On a donc fort intérêt à choisir les états $|\Psi_m^{(0)}\rangle$ tels que leurs projections sur l'espace modèle soient importantes.
À partir de ces résultats préparatoires, on construit le hamiltonien de la première itération $\mathcal{H}_{\rm SB}^{(1)}$ de la manière suivante. Comme on prend en compte une interaction effective entre les blocs qui sont les super-sites de la prochaine itération, le hamiltonien $\mathcal{H}_{\rm SB}^{(1)}$ et le hamiltonien effectif $\mathcal{H}^{\text{eff }(1)}$ sont de même forme. Bien que la procédure permette d'inclure des interactions effectives à plusieurs blocs, on se limite à des interactions de couples de blocs :

$$\mathcal{H}^{\text{eff }(1)} = \sum_{i=1}^{N_B} \mathcal{H}_i^{\text{eff }(1)} + \sum_{\langle i,j\rangle} \mathcal{H}_{i,j}^{\text{eff }(1)} + \cdots . \tag{III.33}$$

Dans le premier terme les énergies propres des blocs contribuent au hamiltonien effectif et dans le deuxième terme tous les couples de blocs interagissants y contribuent. Plus précisément, le premier terme du hamiltonien est une matrice diagonale dont les énergies propres sont les N_m énergies propres exactes du hamiltonien exact $\mathcal{H}_{\rm SB}$ et dont les vecteurs propres sont les projections des vecteurs exactes $|\Psi\rangle_m^{(0)}$ sur l'espace modèle S_0 :

$$\mathcal{H}^{\text{eff }(1)}|\tilde{\Psi}_m^{(0)}\rangle = E_m^{(0)}|\tilde{\Psi}_m^{(0)}\rangle. \tag{III.34}$$

Le deuxième terme de l'équation (III.33) contient les interactions effectives entre deux blocs qui s'évaluent dans la base des vecteurs $|\Phi_m^{(0)}\rangle$ qui engendrent l'espace modèle S_0 :

$$\langle\Phi_k^{(0)}|\mathcal{H}^{\text{eff }(1)}|\Phi_l^{(0)}\rangle = \sum_m \langle\Phi_k^{(0)}|\tilde{\Psi}_m^{(0)}\rangle\ E_m^{(0)}\ \langle(\tilde{\Psi}_m^{(0)})^{\perp}|\Phi_l^{(0)}\rangle. \tag{III.35}$$

Ici, $|(\tilde{\Psi}_m^{(0)})^{\perp}\rangle$ indique les vecteurs qui sont biorthogonaux aux vecteurs $|\tilde{\Psi}_m^{(0)}\rangle$ (cf. [172] pour plus de détails).

Après ces manipulations, le réseau consiste de N_T super-sites qui étaient les blocs de l'itération 0 et le hamiltonien est un hamiltonien effectif renormalisé qui inclut des interactions effectives entre les super-sites. Ainsi, on peut continuer l'itération en repartant du premier pas de la procédure à condition que le hamiltonien après une itération soit isomorphe au hamiltonien de départ. Généralement, ce n'est pas le cas puisque lors d'une itération, le hamiltonien initial peut se transformer en hamiltonien de variables différentes ou bien le réseau initial ne se retrouve pas dans le réseau des super-sites et les interactions effectives ne correspondent pas aux interactions initiales. Évidemment, l'absence d'un isomorphisme entre le hamiltonien initial et effectif nous empêche d'itérer facilement.
L'utilité et le potentiel de la méthode sont illustrés à l'aide de quelques calculs de test pour des relativement petits réseaux. Avec très peu d'effort numérique, cette approche nous donne déjà pour le plus petit système, à savoir deux blocs à trois sites chacun, des résultats raisonnables pour des exemples de différentes chaînes de Heisenberg, comme la chaîne isotrope, dimérisée ou la chaîne zigzag. En particulier pour la chaîne de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg, on retrouve les résultats exacts à 0.1% près avec deux blocs de 11 sites chacun. En outre, la valeur critique $\left(J_2/J_1\right)_c \approx 0.2411$ [33–35] de la chaîne zigzag, qui est équivalente à la chaîne J_1-J_2 (cf. la section 2.1 du chapitre I), est calculée avec une erreur relative de seulement 0.3%.
Discutons maintenant la méthode CORE qui partage quelques idées avec la méthode de Malrieu et Guihéry [172], mais se distingue dans la construction du hamiltonien effectif.

2.3 Le procédé de CORE

Comme une méthode de renormalisation dans l'espace réel, la méthode de Contractor Renormalisation (CORE) s'applique aux systèmes sur réseaux. Cette approche est basée sur le groupe de renormalisation « naïf » d'après Wilson [162, 163], mais grâce à des améliorations importantes quant à la description des interactions entre les blocs, elle arrive à éviter certaines difficultés de l'approche naïve. En détail, afin de construire numériquement un hamiltonien effectif, le procédé de CORE se présente comme suit :

1. On choisit un bloc élémentaire et on diagonalise le hamiltonien $\mathcal{H}$ correspondant afin de trouver ses énergies propres et vecteurs propres.
2. Un nombre M d'états de basse énergie $\{|\alpha\rangle\}_1^M$ est gardé en négligeant les états restants de plus haute énergie. Il est aussi imaginable de sélectionner les états non selon leurs énergies, mais plutôt selon leurs poids de la matrice densité réduite présentée dans la section 1.3 de ce chapitre, comme le proposent Capponi *et al.* [151]. En tout cas, l'espace de Hilbert réduit de N blocs élémentaires est ensuite construit comme le produit tensoriel des états gardés du bloc élémentaire $|\alpha_1, \ldots, \alpha_N\rangle$.
3. Le hamiltonien renormalisé $\mathcal{H}^{\text{ren}}$ d'un système de N blocs élémentaires connexes est défini dans l'espace de Hilbert réduit de dimension $\mathcal{M} = M^N$. On diagonalise le hamiltonien

$\mathcal{H}$ de ce système afin de trouver les $\mathcal{M}$ états propres de plus basse énergie $|n\rangle$ et leurs énergies propres ϵ_n avec $n = 1, \ldots, \mathcal{M}$. Les fonctions d'onde ψ_n sont ensuite projetées sur l'espace de Hilbert réduit et on obtient leurs composantes dans la base des états gardés du bloc élémentaire $|\alpha_1, \ldots, \alpha_N\rangle$. Après, les états projetés sont orthonormalisés par le procédé de Gram-Schmidt, en commençant par l'état fondamental :

$$|\tilde{\psi}\rangle = \frac{1}{Z_n}\left(|\psi\rangle - \sum_{m<n} |\tilde{\psi}_m\rangle\langle\tilde{\psi}_m|\psi_n\rangle\right), \tag{III.36}$$

où Z_n est un facteur de normalisation. Dans certains cas, on doit calculer plus de M^N états de basse énergie puisqu'il est possible que certains états aient une petite projection ou une projection nulle sur l'espace de Hilbert réduit ou bien disparaissent après l'orthogonalisation. Le hamiltonien renormalisé d'un système de N blocs élémentaires connexes est défini par :

$$\mathcal{H}^{\text{ren}} = \sum_{n=1}^{\mathcal{M}} \epsilon_n |\tilde{\psi}_n\rangle\langle\tilde{\psi}_n| \tag{III.37}$$

et il est construit de sorte qu'il reproduise les $\mathcal{M}$ états propres de plus basse énergie.

4. On définit le hamiltonien connexe à portée N qui contient les interactions connexes de N points comme suit :

$$\mathcal{H}^{\text{con}}_{i_1,\ldots,i_N} = \mathcal{H}^{\text{ren}}_{\langle i_1,\ldots,i_N\rangle} - \sum_{\langle i_1,\ldots,i_{N'}\rangle} \mathcal{H}^{\text{con}}_{i_1,\ldots,i_{N'}}, \tag{III.38}$$

où $N' \leq N-1$. Ainsi, le hamiltonien connexe d'un seul bloc élémentaire $\mathcal{H}^{\text{con}}_i$ est équivalent au hamiltonien renormalisé d'un bloc élémentaire. Ensuite, $\mathcal{H}^{\text{con}}_{\langle i,j\rangle}$ caractérise l'interaction des plus proches voisins et les corrections aux termes d'un seul bloc élémentaire. L'interaction à trois sites et les corrections aux tailles inférieures sont définies par $\mathcal{H}^{\text{con}}_{\langle i,j,k\rangle}$, etc. Par conséquent, $\mathcal{H}^{\text{con}}_{i_1,\ldots,i_N}$ qualifie une interaction à portée N bien que la distance entre deux sites ne soit pas égale à N, mais à $N-1$.
Par exemple, le hamiltonien connexe à portée 2, qui se dérive avec deux blocs élémentaires voisins B_i et B_{i+1}, est défini comme suit [154] :

$$\mathcal{H}^{\text{con}}_{\langle i,i+1\rangle} \equiv \mathcal{H}^{\text{con}}_2(B_i, B_{i+1}) = \mathcal{H}^{\text{ren}}_2(B_i, B_{i+1}) - \mathcal{H}^{\text{con}}_1(B_i) - \mathcal{H}^{\text{con}}_1(B_{i+1}). \tag{III.39}$$

De manière analogue, on obtient pour le hamiltonien connexe à portée 3 de trois blocs élémentaires voisins B_i, B_{i+1} et B_{i+2} :

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{\text{con}}_{\langle i,i+1,i+2\rangle} &\equiv \mathcal{H}^{\text{con}}_3(B_i, B_{i+1}, B_{i+2}) = \\ &= \mathcal{H}^{\text{ren}}_3(B_i, B_{i+1}, B_{i+2}) - \mathcal{H}^{\text{con}}_2(B_i, B_{i+1}) - \mathcal{H}^{\text{con}}_2(B_{i+1}, B_{i+2}) - \\ &\quad -\mathcal{H}^{\text{con}}_1(B_i) - \mathcal{H}^{\text{con}}_1(B_{i+1}) - \mathcal{H}^{\text{con}}_1(B_{i+2}).\end{aligned} \tag{III.40}$$

5. Enfin le hamiltonien effectif peut être exprimé comme la somme des contributions des interactions connexes :

$$\mathcal{H}^{\text{eff}} = \sum_i \mathcal{H}_i^{\text{con}} + \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{H}_{i,j}^{\text{con}} + \sum_{\langle i,j,k \rangle} \mathcal{H}_{i,j,k}^{\text{con}} + \cdots . \tag{III.41}$$

   Généralement, avec un bon choix du bloc élémentaire et des états gardés, les interactions connexes de N points diminuent suffisamment vite avec la portée N. On peut donc tronquer le développement de l'équation (III.41) parce que la physique de basse énergie est bien décrite par un hamiltonien effectif à relativement courte portée, par exemple portée 3 si on ne prend en compte que trois blocs élémentaires. Toutefois, il est indispensable de vérifier que les interactions connexes soient négligeables à partir d'une portée donnée.

La méthode initiale d'après Morningstar et Weinstein est conçue comme un processus itératif avec un modèle effectif que l'on obtient après la première itération et que l'on utilise comme modèle initial de la deuxième itération. Par conséquent, les blocs de la première itération servent comme super-site dans la deuxième itération. Pour une séquence d'itérations, on observe un flux du hamiltonien renormalisé et des interactions connexes vers un point fixe et le processus peut être arrêté.
Comme déjà discuté pour les autres méthodes de renormalisation dans l'espace réel, des telles itérations ne sont pas toujours faciles : à partir d'un modèle initial qui consiste en un réseau et un hamiltonien initial, CORE dérive un modèle effectif, c'est-à-dire un hamiltonien effectif et un réseau effectif qui peuvent différer du modèle initial de façon importante. Cela rend difficile d'effectuer une itération ultérieure de la même façon parce que la physique du modèle initial ne se retrouve pas dans le modèle effectif ce qui peut impliquer que le bloc élémentaire ou bien le choix d'états à garder changent et doivent être adaptés. Dans cette thèse, on n'effectue qu'une seule itération du procédé de CORE surtout afin de ne pas perdre en précision, mais aussi parce qu'on pense qu'une itération nous donne accès à des nouvelles tailles et qu'elle suffit à bien décrire la physique.

2.4 Quelques précisions sur le procédé

L'idée générale du procédé mérite quelques commentaires plus spécifiques ainsi que des explications à propos de ses points cruciaux et de ses limitations. L'application systématique aux échelles de spin et quelques points techniques sont discutés de manière pédagogique dans le chapitre IV.

– Au début du procédé, on divise le système considéré dans blocs élémentaires. Le but est de préserver un maximum de symétries du réseau initial sachant que la division en blocs élémentaires brise toujours des symétries de translation [177]. Un choix optimal conserve les symétries initiales de rotation, comme des plaquettes dans un réseau de plaquettes, des triangles dans le réseau de Kagomé ou des tétraèdres dans le réseau pyrochlore.
– Il y a deux cas limites pour lesquels CORE converge vers le modèle initial : (i) Tous les états d'un bloc élémentaire sont gardés et aucun n'est négligé. Pour cette opération triviale, le modèle

effectif obtenu avec CORE est identique au modèle initial formulé dans une base différente et il n'y a aucune réduction de la complexité du système. (ii) Si le développement de contributions d'interactions connexes de l'équation (III.41) est effectué jusqu'à l'infini, le système effectif coïncide avec le système initial exactement à basse énergie.

– On effectue la diagonalisation du système initial à N blocs élémentaires afin de trouver le spectre de basse énergie et les vecteurs propres en utilisant les routines de LAPACK pour des tailles d'espaces de Hilbert inférieures à environ 10.000. Ceci est faisable de façon confortable tout en étant raisonnable quant au temps de calcul et à la consommation de mémoire. Par contre, comme l'espace de Hilbert croît de manière exponentielle, on atteint les limites de LAPACK pour des portées de CORE plus élevées et la diagonalisation exacte avec l'algorithme de Davidson (cf. section 1.2 de ce chapitre) est préférable puisqu'elle est moins gourmande en espace de mémoire.
– Avec la méthode CORE, il est non seulement possible de reproduire le spectre de basse énergie d'un système, mais en principe aussi de calculer des fonctions de corrélation d'un opérateur microscopique. Dans ce but, Altman et Auerbach [160] introduisent un opérateur sous forme d'une perturbation linéaire et arrivent à dériver une expression qui permet de calculer des fonctions de corrélation à deux points.
– *A priori*, on ne peut pas estimer l'erreur quantitative due à la troncation. Pourtant, la valeur des interactions connexes de N points donne une indication sur la longueur de cohérence des degrés de liberté locaux qui sont représentés dans le choix des états gardés pour la méthode CORE. Si l'ordre de grandeur des interactions connexes diminue vite avec N, la longueur de cohérence est petite et une troncation après peu de contributions d'interactions connexes est bien justifiée. Pour la fiabilité de la méthode, cela doit être vérifié pour chaque application de CORE.
– Après ou même avant l'orthogonalisation de Gram-Schmidt de l'équation (III.36), certains états d'un système considéré peuvent avoir une petite projection sur l'espace de Hilbert réduit qui est le produit tensoriel des états gardés du bloc élémentaire. Afin de décider si un état est gardé ou négligé lors de la procédure, une norme minimale de la projection doit être définie et dans nos calculs, nous fixons cette norme à 10^{-6}. Ce choix semble bien justifié et raisonnable puisqu'avant l'orthogonalisation de Gram-Schmidt, nous observons que les normes d'états sont soit de l'ordre de la précision de la machine au carré (typiquement 10^{-28} à 10^{-30}), soit supérieures à 10^{-6}. Dans ce cas, les états sont bien séparés et la sélection d'états serait simple. Par contre, nous observons qu'après l'orthogonalisation de Gram-Schmidt, ce n'est plus le cas et les normes peuvent également avoir des valeurs entre 10^{-6} et 10^{-14}. S'il existe beaucoup d'états avec une norme légèrement au-dessus ou au-dessous du seuil fixé, une adaption de la valeur du seuil ou bien du choix du bloc élémentaire et d'états gardés peut s'avérer opportune.

2.5 Exemples simples de l'application de CORE

Quelques exemples de l'application de CORE pour des systèmes physiques simples incluent la chaîne zigzag de Heisenberg et la chaîne de Hubbard ainsi que la chaîne de Hubbard au demi-remplissage. Ces deux systèmes permettent de choisir un bloc élémentaire qui consiste en seulement deux sites et de ne garder qu'un seul état pour ce bloc élémentaire. Par conséquent, les hamiltoniens connexes, renormalisés et effectifs ne sont que de nombres scalaires et le procédé de CORE est très facile à effectuer.
Avant de discuter les deux exemples en détail, notons que parmi d'autres exemples plutôt pédagogiques afin d'étudier la méthode CORE, on peut aussi compter le modèle d'Ising dans une dimension avec un champ magnétique transverse [178]. Et enfin, le chapitre IV est consacrée à l'échelle de spin qui permet également de faciliter la compréhension de la méthode CORE, surtout la discussion de l'approche à portée 2 discutée dans la section 1 de ce chapitre.

La chaîne zigzag de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg
Considérons d'abord la chaîne zigzag de Heisenberg qui est équivalente à la chaîne J_1-J_2, comme discuté dans la section 2.1 du chapitre I. Cette géométrie se retrouve dans les composés $XCuCl_3$, où X=(K, Tl, NH_4) et nous rappelons que la courbe d'aimantation du composé NH_4CuCl_3 présente des plateaux pour $m = \frac{1}{4}$ et $\frac{3}{4}$.
Le hamiltonien de la chaîne zigzag de Heisenberg est décrit avec des opérateurs $\mathbf{S}_i$ de spin-$\frac{1}{2}$ sur les site i. Si on suppose que l'interaction au premier voisin est égale à 1 et l'interaction au deuxième voisin est égale à J, le hamiltonien de la chaîne zigzag de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg est donné par :

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+i} + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}. \tag{III.42}$$

Afin de calculer l'énergie de l'état fondamental avec CORE, on choisit un bloc élémentaire qui consiste en seulement deux spins et on ne garde qu'un état, à savoir le singulet fondamental, donc $M = 1$. Si on effectue une seule itération de CORE, on obtient les contributions connexes en fonction de la portée r [179] :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_1^{con} &= \mathcal{H}_1^{ren} \\
\mathcal{H}_2^{con} &= \mathcal{H}_2^{ren} - 2\mathcal{H}_1^{con} \\
\mathcal{H}_3^{con} &= \mathcal{H}_3^{ren} - 2\mathcal{H}_2^{con} - 3\mathcal{H}_1^{con} \\
\mathcal{H}_4^{con} &= \mathcal{H}_4^{ren} - 2\mathcal{H}_3^{con} - 3\mathcal{H}_2^{con} - 4\mathcal{H}_1^{con}.
\end{aligned} \tag{III.43}$$

Généralement, les $\mathcal{H}_r^{ren}$ et $\mathcal{H}_r^{con}$ sont des matrices de dimension $\mathcal{M} = M^r$, mais pour cet exemple avec $M = 1$, ce sont des nombres scalaires ce qui rend ce calcul très facile. Enfin, l'énergie par spin de l'état fondamental est calculée avec le hamiltonien effectif à portée r qui est la somme des premiers r termes de $\mathcal{H}_r^{con}$.
Les résultats sont illustrés dans la figure III.8 et montrent une convergence rapide de CORE pour

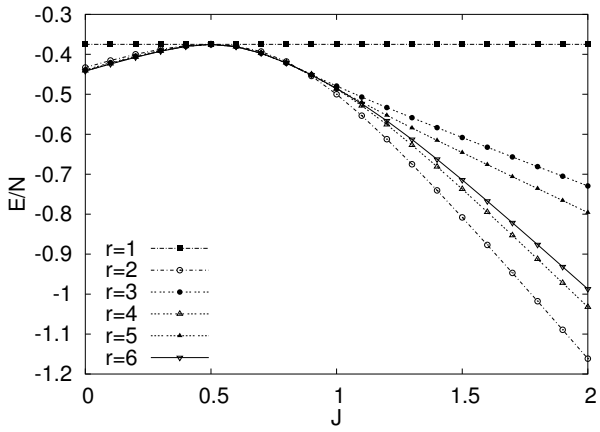


FIG. III.8: Énergie par spin de l'état fondamental E/N en fonction de la portée r de l'approche de CORE et de l'interaction au deuxième voisin J pour la chaîne zigzag de Heisenberg. D'après Cichy *et al.* [179].

$0 \leq J \lesssim 1$. Les énergies calculées à portée 1 ne dépendent pas de l'interaction J avec le deuxième voisin puisqu'on ne considère qu'un seul bloc. À portée 2, on observe déjà une bonne convergence puisque les portées plus élevées n'améliorent le calcul que de façon négligeable. Par exemple, pour le point Majumdar-Gosh [31, 32] où $J = 0.5$, les calculs à portée 1 nous donnent déjà le bon résultat parce qu'il s'agit d'un état fondamental exactement égal au produit des singulets. Cela explique pourquoi les contributions des portées plus élevées sont nulles et le résultat ne change pas avec la portée.

Si on considère un autre cas spécial, notamment la limite de la chaîne de Heisenberg où $J = 0$, on note que les résultats de CORE à portée 6 (cf. [179]), $E_0^{r=6}/N = -0.442028$ sont seulement 0.25% trop élevés et donc en bon accord avec le résultat exact de Bethe [129] et Hulthén [180] $E_0^{exact}/N = \frac{1}{4} - \ln 2 = -0.443147$. La méthode de renormalisation à l'aide d'interactions effectives de Malrieu et Guihéry [172] (cf. la section 2.2 de ce chapitre) donne des résultats qui sont aussi en très bon accord avec les résultats exacts, à savoir, leur déduction pour le système infini avec une erreur relative de seulement 0.01%. En outre, leurs calculs basés sur des très petits systèmes permettent déjà une bonne estimation du résultat exact. Enfin, aussi en appliquant la méthode CORE à portée 6, Weinstein [156] dérive un résultat avec une erreur relative de seulement 10^{-5} en utilisant les approximants de Padé. La précision de ce calcul est remarquable puisque d'autres approches de renormalisation ou d'ondes de spin n'arrivent pas à ce degré de précision.

Néanmoins on doit constater que les énergies des différentes portées de CORE divergent pour $J \gtrsim 1$ et que cette approche de CORE est donc limitée à des valeurs $J \lesssim 1$. Cela s'explique avec le choix du bloc élémentaire : la physique du système change parce que l'état fondamental n'est plus un état de dimères formés par des spins qui sont premiers voisins. Par conséquent, le bloc élémentaire ainsi que le choix d'états gardés dans le procédé de CORE doivent être adaptés.

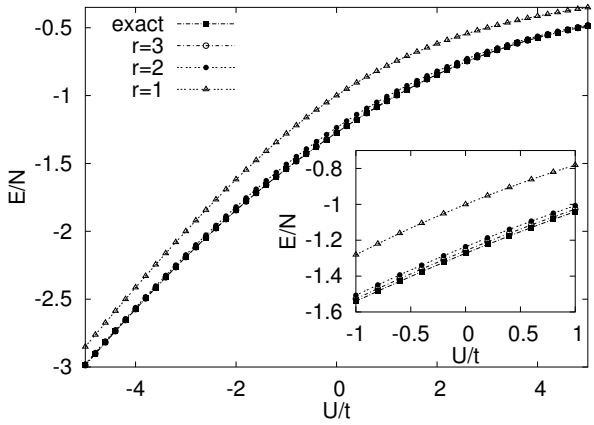


FIG. III.9: Énergie par spin de l'état fondamental E/N en fonction de l'interaction U/t pour la chaîne de Hubbard. Comparaison du résultat exact de Lieb et Wu [12] avec le résultat de CORE pour des différentes portées r. D'après Cichy *et al.* [179].

La chaîne de spin-$\frac{1}{2}$ de Hubbard à demi-remplissage

Considérons maintenant la chaîne de Hubbard à demi-remplissage comme deuxième exemple simple de l'application de la méthode CORE. Le hamiltonien, qui contient un terme de saut t et une interaction U d'électrons sur le même site i, s'écrit de façon suivante :

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \left(c^{\dagger}_{i,\sigma} c_{j,\sigma} + h.c. \right) + U \sum_{i} n_{i,\uparrow}, n_{i,\downarrow} \tag{III.44}$$

Ici, $c^{\dagger}_{i,\sigma}$ ($c_{j,\sigma}$) indique l'opérateur de création (d'annihilation) d'un électron de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ sur le site i. L'opérateur de densité électronique dans l'état σ est donné par $n_{i,\sigma} = c^{\dagger}_{i,\sigma}\, c_{i,\sigma}$ et la notation$\langle i, j \rangle$ indique des premiers voisins.

On choisit un bloc élémentaire de l'approche de CORE de seulement deux sites et on ne garde qu'un seul état comme pour l'exemple précédent de la chaîne zigzag de Heisenberg. En conséquence, les hamiltoniens renormalisés et connexes sont des nombres scalaires et se calculent de même façon, donnée dans l'Eq. (III.43). La Fig. III.9 montre l'énergie par spin de l'état fondamental, calculée avec la méthode CORE à des différentes portées r ainsi que les résultats exacts de Lieb et Wu [12]. On note qu'une approche très simple de portée 2 ou 3 nous donne déjà de bons résultats. Notamment, CORE à portée 3 est à 1% du résultat exact dans la région $-5 \leq U/t \leq 5$ et en plus, cette approche est à 0.5% du résultat exact pour une forte attraction de Hubbard ($U \leq -2$) pour laquelle on observe la formation de paires d'électrons. Dans ce cas, un petit bloc élémentaire et un petit système connexe sont déjà suffisants pour bien décrire la physique tandis que pour le cas de compétition entre localisation et délocalisation des électrons ($U \approx t$), on a besoin d'un plus grand système connexe afin de diminuer les erreurs relatives.

3 Conclusion partielle

Dans les chapitres qui suivent nous allons appliquer les méthodes numériques présentées dans ce chapitre aux différents modèles et réseaux sous champ magnétique. En réduisant la complexité d'un modèle, la méthode CORE vise à trouver un hamiltonien effectif capable de reproduire la physique de basse énergie d'un système. La diagonalisation exacte nous permet d'analyser des modèles indépendamment de la méthode CORE et nous aide à contrôler sa convergence et sa fiabilité. En plus, en étudiant les modèles effectifs CORE avec la diagonalisation exacte, nous sommes capables de comparer quantitativement et précisément les quantités que nous calculons à partir du modèle effectif ou du modèle microscopique. Enfin, nous utilisons la diagonalisation exacte pour calculer la matrice densité réduite qui est un critère alternatif afin de sélectionner les états formant la base de l'approche CORE.
L'intérêt de la méthode CORE est qu'avec la réduction de la taille de l'espace de Hilbert, des plus grands systèmes peuvent être abordés. Ceci constitue une amélioration importante par rapport à la diagonalisation exacte qui a sa limitation la plus sévère dans la taille restreinte de systèmes accessibles. En plus, l'interprétation des modèles effectifs dérivés nous donne la possibilité d'étudier un problème à partir d'un nouveau point de vue.
Nous remarquons, par contre, que le hamiltonien effectif est obtenu sous une forme purement numérique, ce qui interdit l'utilisation de certaines méthodes analytiques de résolution, comme le champ moyen pour des spins, par exemple.

Chapitre IV

L'échelle de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg sous champ magnétique

Comme mentionné dans la section 2.1 du chapitre I, l'échelle de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg modélise un certain nombre de composés (cf. les figures I.4, I.5 et I.6). En plus, dans la section 1 du chapitre II, nous discutons le modèle microscopique qui est présenté dans l'équation (II.1) et illustré dans la figure II.1. Rappelons que les couplages antiferromagnétiques sont définis comme suit : l'interaction $J_\perp = 1$ agit sur les barreaux de l'échelle et ces barreaux constituent des dimères couplés. Le long des deux chaînes qui forment l'échelle, les spins sont couplés par J_x et enfin l'interaction J_d est un couplage frustrant reliant des spins qui sont deuxièmes voisins. Les deux derniers couplages peuvent être échangés en raison d'une symétrie.

Ce chapitre est consacré à l'étude de l'échelle de spin avec la méthode de CORE à différentes portées, également en utilisant différents blocs élémentaires. Cette étude est structurée comme suit : dans la section 1, nous considérons en détail l'approche la plus simple de CORE à l'échelle de spin qui consiste dans l'identification d'un barreau comme bloc élémentaire et dans le choix du singulet $|s\rangle$ et du triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ comme base de CORE. Nous étudions le modèle effectif de CORE à portée 2 analytiquement ainsi que numériquement et discutons les limitations de cette approche simple. Dû à ces limitations, nous modifions notre approche CORE à l'échelle de spin dans la section 2 en choisissant différents états comme base de CORE et en changeant de bloc élémentaire dans notre approche. Enfin, nous discutons les avantages de ces modifications et nous présentons nos conclusions dans la section 3.

La discussion de l'approche de CORE à l'échelle de spin dans ce chapitre est basée sur notre article : Abendschein et Capponi [124].

Avant de commencer l'étude de l'échelle de spin avec la méthode CORE, notons qu'afin de juger la qualité de notre approche, nous comparons avec des résultats exacts que nous calculons avec la diagonalisation exacte (cf. la section 1 du chapitre III) du modèle microscopique pour des tailles finies. Dans la figure IV.1, nous présentons une courbe d'aimantation pour $J_x = 0.7$ et

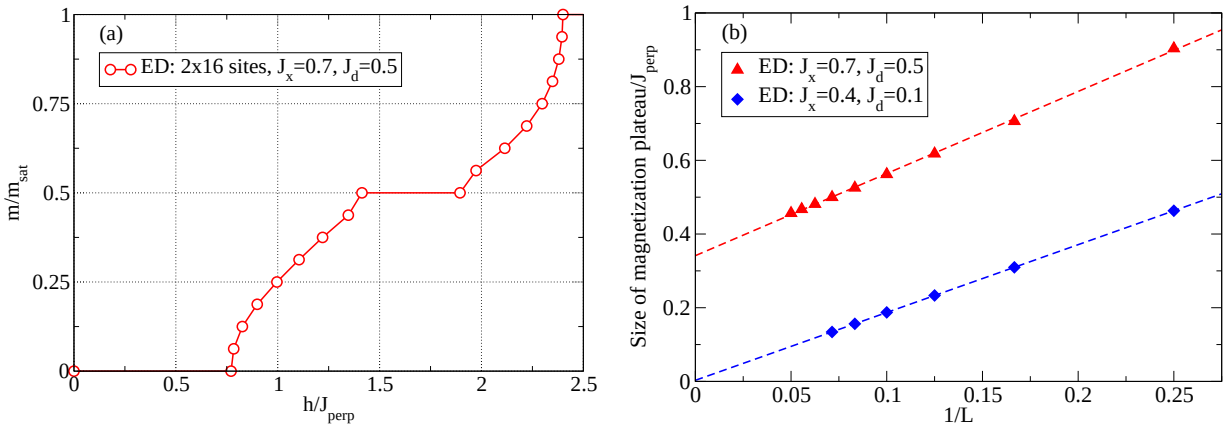


FIG. IV.1: (a) Courbe d'aimantation d'une échelle de 2×16 sites pour $J_x = 0.7$ et $J_d = 0.5$, calculée avec la diagonalisation exacte du modèle microscopique. (b) Extrapolation de la taille du plateau $m = \frac{1}{2}$ vers la limite thermodynamique pour deux exemples, calculés avec la diagonalisation exacte du modèle microscopique. La figure IV.2 (b) montre une récapitulation et un diagramme de phase résultant.

$J_d = 0.5$ d'une échelle avec 16 barreaux[1] qui montre un gap de spin ainsi qu'un plateau $m = \frac{1}{2}$. Pour l'exemple d'une échelle frustrée avec $J_\perp = 1$, $J_x = 0.55$ et $J_d = 0.7$, on peut également observer un saut d'aimantation en dessous de la saturation [181] qui est dû à la modification de l'état fondamental : d'abord, les dimères sont occupés par des singulets $|s\rangle$ et des triplets polarisés $|t_{+1}\rangle$, ensuite, on observe un mélange de triplets $|t_0\rangle$ et $|t_{+1}\rangle$. En outre, la figure IV.1 montre l'extrapolation de la taille du plateau $m = \frac{1}{2}$ vers la limite thermodynamique que nous effectuons en calculant sa taille pour des différentes tailles finies d'échelles. Les résultats correspondants pour une multitude de couplages J_x et J_d sont montrés plus loin, dans la figure IV.2 (b).

1 L'approche CORE la plus simple

Dans ce qui suit, nous concrétisons le procédé de CORE en dérivant un hamiltonien effectif à portée 2 pour l'exemple de l'échelle Heisenberg de spin-$\frac{1}{2}$. Nous supposons que le couplage sur les barreaux de l'échelle $J_\perp = 1$ soit le plus important avec $J_\perp \geq J_d, J_x$ et en conséquence, nous choisissons un dimère sur un barreau comme bloc élémentaire. Comme montré dans l'équation (II.2) et la figure II.2, le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ sont les deux états qui caractérisent la physique de basse énergie sous champ magnétique h. Remarquons dans ce contexte la parité différente

[1]Remarquons que la diagonalisation exacte d'un système de taille finie de N dimères nous ne donne pas de courbe d'aimantation avec une pente continue, mais plutôt une courbe d'incréments finis $m = 0, \frac{1}{N}, \frac{2}{N}, \cdots, 1$ par rapport à la valeur saturée. La pente continue dans la courbe de la figure IV.1 se forme en connectant les milieux de chaque plateau sauf les plateaux $m = 0, \frac{1}{2}$ et 1.

des deux états : le singulet $|s\rangle$ a une parité impaire tandis que le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ a une parité paire. Comme la théorie des perturbations [101] que nous présentons dans la section II.1, nous fondons donc notre approche sur ces deux états ce qui constitue l'approche de CORE la plus simple à l'échelle de spin. Nous remarquons que nous nous attondons à des difficultés dès que d'autres états, comme le triplet non polarisé $|t_0\rangle$, deviennent pertinents afin de décrire la physique du système.
Le procédé de CORE, décrit dans la séction III.2.3, se présente donc pour cet exemple de façon suivante :

1. Comme premier pas du procédé, on choisit le barreau de l'échelle comme bloc élémentaire avec les états propres donnés dans l'équation (II.2).

2. On garde deux états de basse énergie, donc $M = 2$, à savoir le singulet $|s\rangle$ ainsi que le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ et on néglige les deux états du triplet $|t_0\rangle$ et $|t_{-1}\rangle$ qui ont une énergie plus élevée sous champ magnétique. Par conséquent, l'espace de Hilbert est réduit par un facteur 2.

3. Pour dériver le hamiltonien renormalisé à portée $N = 2$, on diagonalise ensuite deux barreaux avec les conditions aux bords ouvertes et on trouve les 16 états propres avec les énergies correspondantes. Ensuite, en débutant avec l'état fondamental et ensuite les états aux énergies plus élevées, on calcule la projection des états propres de deux barreaux sur le produit tensoriel de la base réduite du bloc élémentaire qui consiste du singulet $|s\rangle$ et du triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$. On garde un état si sa projection sur la base tensorielle est suffisante, soit en pratique supérieure à 10^{-6}. Après, en commençant par les états de plus basse énergie, les états gardés sont orthonormalisés par le procédé de Gram-Schmidt et enfin acceptés si la projection reste toujours suffisante afin de construire le hamiltonien renormalisé de dimension $M^N = 4$. Cela veut dire que l'on cherche quatre états sur 16 qui aient une projection suffisante sur la base tensorielle après avoir été orthonormalisés. Avec les quatre états orthonormalisés $|\tilde{\psi}_n\rangle$ et les énergies propres correspondantes ϵ_n, on calcule le hamiltonien renormalisé $\mathcal{H}^{\text{ren}} = \sum_{n=1}^{4} \epsilon_n |\tilde{\psi}_n\rangle\langle\tilde{\psi}_n|$ selon l'équation (III.37).

4. Le hamiltonien connexe et les interactions connexes sont calculés en utilisant l'équation (III.38). Notons que le hamiltonien connexe à un bloc ne consiste que de deux éléments pour le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ ainsi que les énergies correspondantes. Pour notre exemple d'une échelle de spin avec un barreau comme bloc élémentaire, l'interaction connexe de deux blocs élémentaires se calcule avec le hamiltonien renormalisé $\mathcal{H}^{\text{ren}}$ que l'on connaît, corrigé en soustrayant les deux contributions d'un bloc élémentaire.

5. Les interactions connexes sont déterminées avec l'exemple trivial du hamiltonien connexe à un bloc qui ne consiste que de deux éléments pour le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ ainsi que les énergies correspondantes. Selon l'équation (III.39), l'interaction connexe de deux blocs élémentaires est égale au hamiltonien renormalisé $\mathcal{H}^{\text{ren}}$ calculé dans le pas précédent, mais corrigé par la soustraction des deux contributions à un bloc élémentaire.

6. Enfin, on calcule le hamiltonien effectif selon l'équation (III.41) en sommant toutes les contributions connexes jusqu'à la portée souhaitée. En fin de compte, avec des conditions de bords ouvertes pour le système connexe, on obtient pour les échelles de spin à portée 2 :

$$\begin{aligned}\mathcal{H}^{\text{eff}} &= \sum_i \mathcal{H}_i^{\text{con}} + \sum_{\langle i,j\rangle} \mathcal{H}_{i,j}^{\text{con}} = \mathcal{H}_1^{\text{ren}} \otimes \mathbb{1} + \mathcal{H}_{1,2}^{\text{ren}} - \mathcal{H}_1^{\text{ren}} \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \mathcal{H}_2^{\text{ren}} = \\ &= \mathcal{H}_{1,2}^{\text{ren}} - \mathcal{H}_1^{\text{ren}} \otimes \mathbb{1}. \end{aligned} \tag{IV.1}$$

Le calcul du hamiltonien effectif et du hamiltonien connexe dépendent fortement de la géométrie, par exemple du choix du bloc élémentaire ou, bien sûr, de la dimension du système. Nous montrons différents exemples qui diffèrent non seulement dans la géométrie, mais aussi dans le choix de la base de CORE.

Avec le choix d'un barreau d'une échelle comme bloc élémentaire, le réseau effectif est une chaîne et nous nous limitons à effectuer une seule itération de la méthode CORE afin de dériver un modèle effectif. Ce modèle effectif utilise la même base que la théorie des perturbations [101] et par conséquent, le hamiltonien effectif à portée 2 peut être exprimé avec un modèle $t-V$ (cf. l'équation (II.7)). En utilisant la correspondance entre le modèle microscopique avec la notation $|ss\rangle$ pour indiquer deux singulets sur les deux dimères d'une part et le langage de bosons de cœur dur avec la notation (•) pour un site occupé et (○) pour un site vide (cf. le tableau II.1) d'autre part, nous trouvons à portée 2 :

$$\left(\begin{array}{c|cccc} & |ss\rangle & |st_{+1}\rangle & |t_{+1}s\rangle & |t_{+1}t_{+1}\rangle \\ \hline |ss\rangle & E_{|ss\rangle} & 0 & 0 & 0 \\ |st_{+1}\rangle & 0 & -\frac{J_\perp}{2} - h & \frac{J_x - J_d}{2} & 0 \\ |t_{+1}s\rangle & 0 & \frac{J_x - J_d}{2} & -\frac{J_\perp}{2} - h & 0 \\ |t_{+1}t_{+1}\rangle & 0 & 0 & 0 & \frac{J_\perp + J_x + J_d}{2} - 2h \end{array}\right) \Longleftrightarrow$$

$$\Longleftrightarrow \left(\begin{array}{c|cccc} & (\circ\circ) & (\circ\bullet) & (\bullet\circ) & (\bullet\bullet) \\ \hline (\circ\circ) & C & 0 & 0 & 0 \\ (\circ\bullet) & 0 & C+\mu & t & 0 \\ (\bullet\circ) & 0 & t & C+\mu & 0 \\ (\bullet\bullet) & 0 & 0 & 0 & C+2\mu+V \end{array}\right). \tag{IV.2}$$

Ceci nous permet de calculer les paramètres t, V et μ qui diffèrent des résultats perturbatifs de l'équation (II.9) :

$$\begin{aligned} t &= \frac{J_x - J_d}{2}, \\ V &= E_{|ss\rangle} + \frac{3}{2} J_\perp + \frac{J_x + J_d}{2}, \\ \mu &= -E_{|ss\rangle} - \frac{J_\perp}{2} - h, \end{aligned} \tag{IV.3}$$

où $E_{|ss\rangle}$ est l'énergie exacte de l'état fondamental d'une plaquette qui consiste de deux dimères :

$$E_{|ss\rangle} = -\frac{J_\perp}{2} - \frac{J_x + J_d}{2} - \sqrt{J_\perp^2 + J_x^2 + J_d^2 - J_x J_d - J_\perp(J_x + J_d)}. \tag{IV.4}$$

Pour être complet, notons que les champs critiques h_c^1 et h_c^2, entre lesquels l'aimantation du système prend des valeurs finies $0 < m < 1$, se calculent avec l'approche CORE à portée 2 comme suit [182] :

$$h_c^1 = -E_{|ss\rangle} - \frac{J_\perp}{2} - J_x + J_d \qquad \text{et} \qquad h_c^2 = -E_{|ss\rangle} - \frac{J_\perp}{2} + 2J_x. \tag{IV.5}$$

Comme pour les résultats perturbatifs de l'équation (II.10), on considère un boson dans un système vide pour h_c^1 afin d'obtenir $2|t| = \mu$ et un trou dans un système complètement rempli pour h_c^2 afin d'obtenir $2|t| = \mu_h$.
Nous notons également que le critère $V/|t| > 2$ de l'équation (II.12) pour l'existence d'un plateau d'aimantation $m = \frac{1}{2}$ se traduit pour l'approche de CORE à portée 2 en

$$\frac{1}{3 - J_x/J_\perp} < \frac{J_d}{J_x} < \frac{3}{1 + J_x/J_\perp}. \tag{IV.6}$$

Dans la figure IV.2 (a) nous illustrons ce critère en montrant les bords de la région où l'on s'attend à un plateau $m = \frac{1}{2}$ en fonction des couplages J_x et J_d. En plus, nous montrons le résultat perturbatif $3J_x > J_d > J_x/3$ de l'équation (II.11). Nous comparons ces résultats théoriques avec des données numériques que nous avons calculées avec la diagonalisation exacte (cf. la section 1 du chapitre III) du modèle microscopique, présentées dans la figure IV.2 (b). Il s'agit de l'extrapolation du plateau $m = \frac{1}{2}$ vers la limite thermodynamique dont la figure IV.1 montre deux exemples. Nous voyons que l'approche perturbative et l'approche CORE à portée 2 sont en bon accord avec les résultats exacts pour des couplages $J_x, J_d \leq 0.3$. En revanche, pour des couplages J_x et J_d plus forts, on constate que CORE décrit mieux le bord de la région d'un plateau $m = \frac{1}{2}$. La théorie des perturbations manque de précision pour des couplages qui sont trop importants pour être traités comme une perturbation du système dominé par le couplage sur les barreaux $J_\perp = 1$. Remarquons aussi que notre approche CORE à portée 2 est très simple et peut être effectué analytiquement en résolvant une plaquette de 2×2 sites. Pourtant cette approche augmente la précision par rapport à la théorie des perturbations.
Le procédé de CORE, décrit dans la section 2.3 du chapitre III, définit le hamiltonien à une certaine portée r comme la somme des contributions des interactions connexes (cf. l'équation (III.41)). *A priori*, cette somme est infinie avec des contributions à une portée qui est de plus en plus élevée. Néanmoins, on constate que le modèle effectif à une certaine portée r est déjà capable de bien reproduire la physique de basse énergie du système et le développement de l'équation (III.41) peut être tronqué à partir d'une certaine portée r. Ceci nous indique également que les contributions à plus longue portée sont négligeables. Pour notre exemple de l'échelle de spin, nous dérivons le hamiltonien effectif jusqu'à portée 8 et nous illustrons donc, dans la figure IV.3 (a), la norme[2] du

[2]Nous définissons la norme d'un hamiltonien comme la valeur absolue du plus grand élément de matrice.

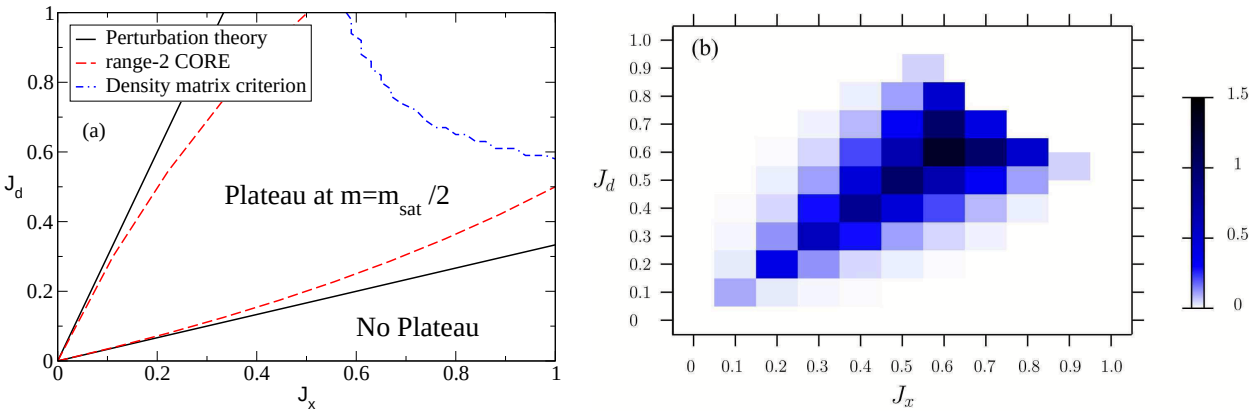


FIG. IV.2: (a) Diagramme de phase, calculé avec la théorie des perturbations (cf. l'équation (II.11)) et CORE à portée 2 (cf. l'équation (IV.6)). La ligne bleue indique un critère de poids de matrice densité réduite (voir la section 2 de ce chapitre). (b) Taille du plateau $m = \frac{1}{2}$, calculée avec une extrapolation vers la limite thermodynamique. Des échelles de spin avec $2 \times L$ sites ont été analysées avec la diagonalisation exacte du modèle microscopique, où $L \leq 20$. Voir aussi la figure II.3.

hamiltonien connexe $\mathcal{H}^{\text{con}}$ en fonction de la portée r pour deux exemples de couplages. On remarque que la norme de $\mathcal{H}^{\text{con}}$ décroît très vite avec la portée r pour $J_x = 0.4$ et $J_d = 0.2$ ce qui nous permet de tronquer et de limiter le développement à une relativement courte portée. Ceci est illustré par la comparaison entre la courbe d'aimantation exacte du modèle microscopique et les courbes obtenues par la diagonalisation exacte de notre modèle effectif à portée $r = 2$ et $r = 5$ dans la figure IV.3 (b) : pour $r = 2$ on observe un très bon accord à l'exception du gap de spin et pour $r = 5$, la courbe de notre modèle effectif et la courbe exacte coïncident.

En revanche, la figure IV.3 (a) démontre également l'échec de notre approche CORE pour les couplages $J_x = 0.8$ et $J_d = 0.7$ puisque la norme du hamiltonien connexe correspondant reste très grande, même si la portée est augmentée jusqu'à portée 8. Pour des couplages $J_x \sim J_d \geq 0.7$, on observe non seulement que les normes du hamiltonien connexe ne décroissent pas en augmentant la portée de notre approche, mais aussi que notre approche CORE, qui est l'approche la plus simple, n'arrive pas à reproduire l'absence du plateau $m = \frac{1}{2}$. Ceci s'explique avec des considérations de symétrie : pour le cas spécial où $J_x = J_d$, le hamiltonien possède des symétries supplémentaires, parmi lesquelles on compte l'échange de deux spins sur un barreau *quelconque* de l'échelle. En conséquence, tous les termes de sauts effectifs t sont strictement nuls à toutes les portées de notre approche CORE ce qui implique une phase isolante et gappée au demi-remplissage, c'est-à-dire un plateau pour $m = \frac{1}{2}$.

Pour que l'algorithme de CORE soit fiable, il est nécessaire que l'état fondamental ait une projection suffisante sur la base tensorielle de CORE et pour $J_x = J_d \geq 0.8$, on observe que cette projection est nulle. Cet argument n'est plus strictement applicable pour des couplages $J_x \sim J_d \geq 0.7$

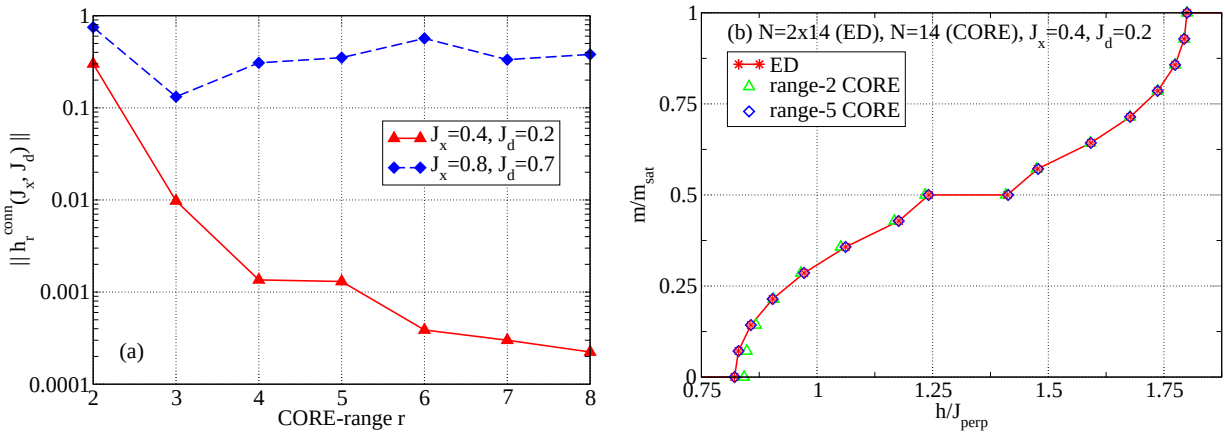


FIG. IV.3: (a) Norme du hamiltonien connexe $\mathcal{H}^{\text{con}}$ en fonction de la portée r pour les couplages $(J_x = 0.4, J_d = 0.2)$ et $(J_x = 0.8, J_d = 0.7)$. (b) Pour $(J_x = 0.4, J_d = 0.2)$: en augmentant la portée de CORE, les courbes d'aimantation correspondantes convergent vers la courbe exacte. Calculée avec une échelle de spin de 2×14 sites pour le modèle microscopique et avec une chaîne de 14 sites pour le modèle effectif CORE à différentes portées.

où $J_x \neq J_d$, mais nous constatons pourtant que beaucoup de projections sur la base tensorielle de CORE sont très petites. Ceci implique que les résultats de notre approche ne sont pas très précis, même si on inclut des interactions à une portée de plus en plus longue. Avec le mauvais choix de la base de CORE, on remarque par conséquent que le développement de contributions d'interactions connexes de l'équation (III.41) ne donne pas le résultat exact même s'il est effectué jusqu'à l'infini ! Dans ce cas, l'approche CORE perd son utilité ce qui souligne l'importance du choix de la base de CORE.
La section suivante est donc consacrée à une discussion approfondie du choix de la base de CORE.

2 Le choix de la base de CORE

Dans la section 2.3 du chapitre III, nous avons présenté le procédé de la méthode CORE avec le critère de l'énergie afin de sélectionner les états sur lesquels l'algorithme est fondé. Par contre, comme le montre la figure IV.3 (a), une convergence du développement de CORE (cf. l'équation (III.41)) en augmentant la portée n'est pas toujours atteinte et une implémentation efficace de l'algorithme n'est pas possible. Dans ce cas, le choix initial de la base de CORE est problématique et doit être adapté. Il y a trois approches principales afin de changer la base :
– On peut construire la base de CORE en gardant d'autres états pour le même bloc élémentaire.
– Pour le même bloc élémentaire, on peut augmenter le nombre d'états gardés afin de construire la base de CORE.

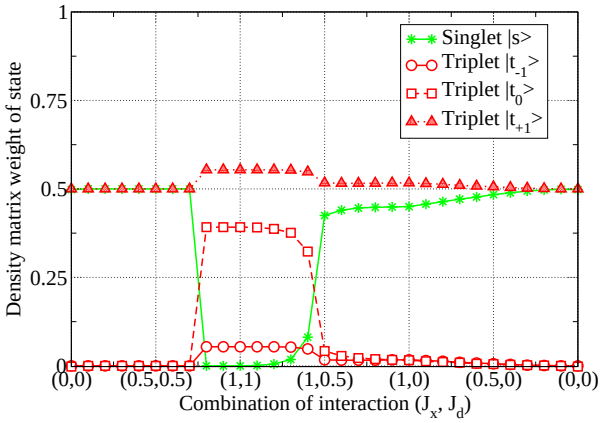


FIG. IV.4: Poids de la matrice densité réduite des quatre états d'un barreau d'une échelle de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg. Pour aimantation demi-saturée, les calculs sont effectués avec la diagonalisation exacte d'une échelle de 2×12 sites en fonction des couplages (J_x, J_d) qui forment un chemin dans le diagramme de phase.

– On peut changer le bloc élémentaire.

Afin de sélectionner les états de la base de CORE, nous proposons de remplacer le critère de l'énergie par le critère du poids de la matrice densité réduite [124, 151, 183]. Puisque des relativement petits systèmes suffisent afin d'obtenir des résultats fiables, ce calcul est facile à effectuer et en plus, il est indépendant de la méthode CORE. Notons en outre la similarité de cette approche avec le groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG) [148–150] qui nous permet de choisir le bon nombre d'états et qui nous indique si le choix d'un bloc élémentaire est problématique. Le poids de la matrice densité réduite peut être calculé avec la diagonalisation exacte selon l'équation (III.20) et nous effectuons ce calcul pour une échelle de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg à demi aimantation ($m = \frac{1}{2}$). Pour une échelle de 2×12 sites, la figure IV.4 illustre les poids correspondants des quatre états d'un barreau, définis dans l'équation (II.2).
Les poids sont présentés le long du chemin suivant dans le diagramme de phase de figure IV.2 : on commence avec $J_x = J_d = 0$ et suit la diagonale jusqu'aux couplages $J_x = J_d = 1$ (premier tiers). Ensuite J_d est diminué de $J_d = 1$ à $J_d = 0$ pendant que J_x reste fixé à $J_x = 1$ (deuxième tiers) et enfin J_x est diminué de $J_x = 1$ à $J_x = 0$ pendant que J_d reste fixé à $J_d = 0$ (troisième tiers). Nous remarquons que le poids du singulet $|s\rangle$ est très petit pour des couplages $J_x \sim J_d \geq 0.7$, c'est-à-dire la région où CORE n'arrive pas à reproduire l'absence du plateau $m = \frac{1}{2}$ de la phase de Haldane. On observe pour des tels couplages que l'état fondamental a une très petite projection sur la base tensorielle de CORE si cette base est constituée du singulet $|s\rangle$ et du triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$. Nous avons noté la région où le poids du singulet $|s\rangle$ devient plus petit que celui du triplet non polarisé $|t_0\rangle$ comme ligne bleue dans la figure IV.2. Dans cette région, notre approche échoue à cause d'un mauvais choix de la base de CORE qui ne représente que 55% du poids total.

CORE basée sur les deux triplets $|\mathbf{t_0}\rangle$ et $|\mathbf{t_{+1}}\rangle$ d'un barreau de l'échelle

Comme le montre la figure IV.4, pour des couplages $J_x \sim J_d \geq 0.7$, les deux triplets $|t_0\rangle$ et $|t_{+1}\rangle$ réunissent une large fraction du poids de la matrice densité réduite pour un barreau comme bloc élémentaire de CORE, à savoir 95% du poids total pour $0.8 \leq (J_x = J_d) \leq 1$. De ce point de vue, il semble raisonnable de fonder notre approche sur ces deux états qui n'ont pas la plus basse énergie. Ce choix est donc en contradiction avec le critère du procédé de CORE comme Morningstar et Weinstein [153, 154] l'ont proposé. Rappelons que la dégénérescence des deux états est levée sous champ magnétique, comme illustré dans la figure II.2 et en négligeant le singulet $|s\rangle$, nous choisissons donc les deux états avec le plus grand poids à demi aimantation comme base de notre approche CORE. Pour cette base et une approche à portée 2, nous pouvons également dériver un modèle $t-V$ pour des fermions sans spin interagissants (cf. l'équation (II.7)) et nous trouvons les paramètres suivants :

$$\begin{aligned} t &= \frac{J_x + J_d}{2}, \\ V &= \begin{cases} E_{|ss\rangle} + \frac{-J_\perp + J_x + J_d}{2} & \text{si } J_x \neq J_d \\ -t & \text{si } J_x = J_d \end{cases}. \end{aligned} \tag{IV.7}$$

Comparé avec les paramètres perturbatifs de l'équation (II.9) et ceux de l'approche de CORE avec la base du singulet $|s\rangle$ et du triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ de l'équation (IV.3), nous notons une différence cruciale : pour la base de deux triplets d'un barreau, le terme de saut effectif t de triplets polarisés n'est pas nul pour $J_x = J_d$, mais a plutôt des valeurs finies. Ceci implique directement que $V/t < 2$ et par conséquent, pour cette approche, le plateau $m = \frac{1}{2}$ est absent, comme indiqué par des résultats de diagonalisation exacte du modèle microscopique (cf. la figure IV.2). Ainsi, pour des couplages $J_x \sim J_d \geq 0.7$, cette base constitue une amélioration par rapport à l'approche la plus simple de CORE, basée sur le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$.

Nous effectuons cette approche de CORE jusqu'à la portée $r = 5$ et dans la figure IV.5 (a), nous illustrons nos résultats en comparant des courbes de l'énergie en fonction de l'aimantation. Les résultats exacts indiquent l'énergie d'une échelle de 2×14 sites et les courbes CORE ont été dérivées pour une chaîne effective de 14 sites. Dans cette figure, nous considérons le cas $J_x = J_d = 1 (= J_\perp)$ qui est très loin des couplages que l'on peut traiter comme des perturbations. On remarque une convergences des résultats de CORE vers la courbe exacte en augmentant la portée de l'approche. Pourtant, surtout à faible aimantation, on est obligé de prendre en compte des interactions à plus longue portée. On constate que l'accord entre la courbe de CORE à portée 5 et la courbe exacte n'est pas satisfaisant.

CORE basée sur le singulet $|\mathbf{s}\rangle$ et les deux triplets $|\mathbf{t_0}\rangle$ et $|\mathbf{t_{+1}}\rangle$ d'un barreau de l'échelle

L'approche de CORE à l'échelle de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg marche bien pour des faibles couplages J_x et J_d si CORE est basée sur le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ d'un barreau comme bloc élémentaire. En plus, nous avons vu que pour des couplages $J_x \sim J_d \sim J_\perp$ non perturbatifs et

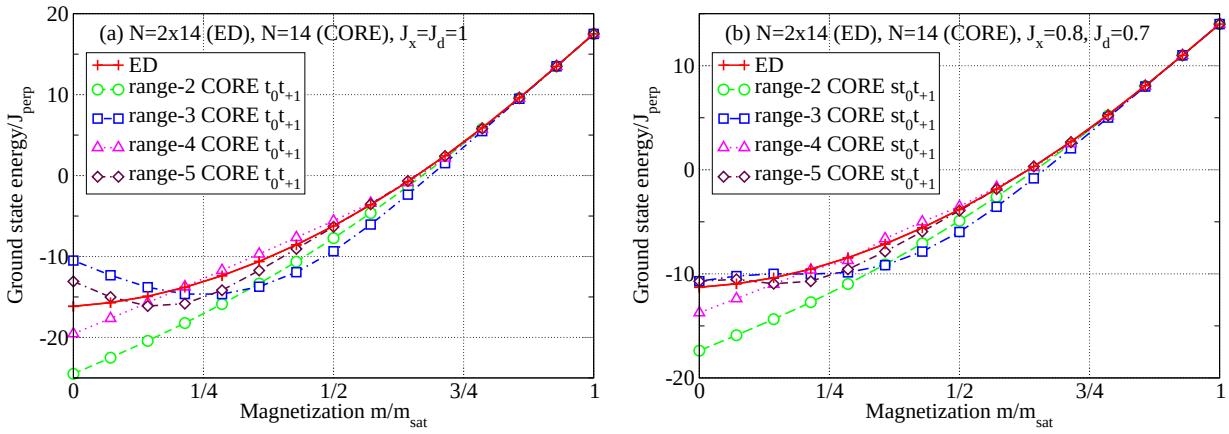


FIG. IV.5: Comparaison de l'énergie en fonction de l'aimantation, calculée avec une échelle de spin de 2×14 sites pour le modèle microscopique et avec une chaîne de 14 sites pour le modèle effectif de CORE à différentes portées. (a) Pour $J_x = J_d = 1$: CORE est basée sur les deux triplets $|t_0\rangle$ et $|t_{+1}\rangle$ d'un barreau. (b) Pour $J_x = 0.8$ et $J_d = 0.7$: CORE est basée sur le singulet $|s\rangle$ et les deux triplets $|t_0\rangle$ et $|t_{+1}\rangle$ d'un barreau.

du même ordre, les deux triplets $|t_0\rangle$ et $|t_{+1}\rangle$ représentent une très grande fraction du poids total de la matrice densité réduite. Par contre, les deux approches ont des difficultés qui sont dues au faible poids de matrice densité réduite des états gardés pour la première approche et au fait de garder des états qui n'ont pas la plus basse énergie pour la deuxième approche. Nous essayons par conséquent de combiner ces deux bases en fondant une nouvelle approche de CORE avec les trois états suivants d'un barreau de l'échelle : le singulet $|s\rangle$ et les deux triplets $|t_0\rangle$ et $|t_{+1}\rangle$. Ceci implique que nous gardons tous les états d'un barreau sauf le triplet $|t_{-1}\rangle$ en espérant améliorer l'accord avec les résultats exacts. En revanche, l'espace réduit de notre modèle effectif est plus grand ce qui nous limite à des réseaux effectifs de moins grandes tailles par rapport à l'approche basée sur deux états d'un barreau. Notons aussi que le modèle effectif correspondant n'est plus de type XXZ ou $t - V$ puisque nous gardons trois états par site.

Dans la figure IV.5 (b), nous montrons les résultats de cette approche en illustrant l'énergie en fonction de l'aimantation pour une chaîne de 14 sites effectifs avec l'approche CORE, comparée avec le calcul du modèle microscopique d'une échelle de 2×14 sites. Nous remarquons que CORE prédit l'absence de plateaux pour $J_x = 0.8$ et $J_d = 0.7$ ce qui est en accord le résultat exact, mais nous constatons également une lente convergence des courbes de CORE pour des plus grandes portées vers la courbe exacte. Pour des faibles aimantations, cette approche de CORE nous donne toujours des résultats insatisfaisants. Ceci s'explique en partie avec le poids du singulet $|s\rangle$ qui est nul dans la région $J_x = J_d \geq 0.8$ ce qui implique que les résultats de CORE sont identiques si on base l'approche sur deux triplets ($|t_0\rangle$ et $|t_{+1}\rangle$) ou le singulet $|s\rangle$ et ces deux triplets.

En conclusion pour l'approche basée sur un barreau de l'échelle, nous proposons qu'une implémentation efficace de CORE doit garder les M états de plus basse énergie de ce bloc tel que le poids de la matrice densité réduite de ces états soit « grand ». Dans ce but, nous avons gardé une large fraction de l'espace de Hilbert pour quelques exemples, ce qui limite les simulations sur des réseaux effectifs et ce qui complique l'étude analytique du modèle effectif. Pour ces raisons, nous proposons de changer le bloc élémentaire pour l'approche de CORE à l'échelle de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg sous champ magnétique.

CORE basée sur le singulet $|\mathbf{s}\rangle$ et le triplet $|\mathbf{t_{+1}}\rangle$ d'un dimère horizontal de l'échelle

Dans le régime fortement frustré, l'approche basée sur les barreaux de l'échelle n'est pas satisfaisante et nous choisissons donc un bloc élémentaire différent, à savoir les dimère horizontaux (d'une échelle horizontale) qui sont constitués par deux sites, liés avec le couplage J_x. Puisque nous gardons le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ de ce nouveau bloc élémentaire, le modèle effectif peut également être interprété en termes de pseudo-spins σ, ainsi qu'en termes de fermions sans spin interagissants ou bien en termes de bosons de cœur dur. Notons également que le modèle effectif pour ce modèle a par conséquent la géométrie d'une échelle de spin qui décrit des interactions effectives et nous dérivons les hamiltoniens connexes et effectifs en négligeant les contributions d'une silhouette « L ». En principe, on doit sommer toutes les interactions, avec les contributions de silhouette « L » incluses. Mais puisqu'une de ces contributions n'apparaît que dans un seul bloc rectangulaire, toutes les contributions d'une silhouette « L » dans le développement de l'équation (III.41) s'annulent exactement [184].

Nous illustrons le poids de matrice densité réduite des quatre états d'un dimère horizontal dans la figure IV.6 (a). Nous notons que la base de CORE (le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ d'un dimère horizontal) représente une grande fraction du poids total de la matrice densité réduite, surtout dans le régime fortement frustré avec $J_x \sim J_d \sim 1$ où l'approche basée sur les barreaux a des difficultés. Nous calculons les interactions effectives en considérant jusqu'à 6 dimères horizontaux et nous comparons les résultats de notre approche à portée 4 et 6 pour $J_x = J_d = 1 (= J_\perp)$ avec des données exactes dans la figure IV.6 (b). Les courbes de l'énergie en fonction de l'aimantation de l'approche de CORE basée sur les dimères horizontaux sont en bon accord avec les courbes exactes, en particulier, on observe une bonne convergence vers les données exactes si des interactions à plus longue portées sont incluses. Pour cette approche, nous obtenons des courbes d'aimantation avec une pente continue qui nous indique l'absence d'un plateau $m = \frac{1}{2}$ comme observé dans les courbes exactes. Dans la figure IV.6 (b), nous montrons également la courbe de l'approche basé sur le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ d'un barreau de l'échelle qui indique une courbe d'aimantation qui consiste de trois plateaux pour $m = 0, \frac{1}{2}$ et 1. Comme discuté audessus, cette approche échoue à *toutes* les portées, même si on incluait des interactions à portée infinie.

En conclusion pour les approches CORE qui sont basées sur des dimères de deux sites (soit les barreaux d'une échelle, soit des dimères horizontaux comme discuté), nous sommes capables de

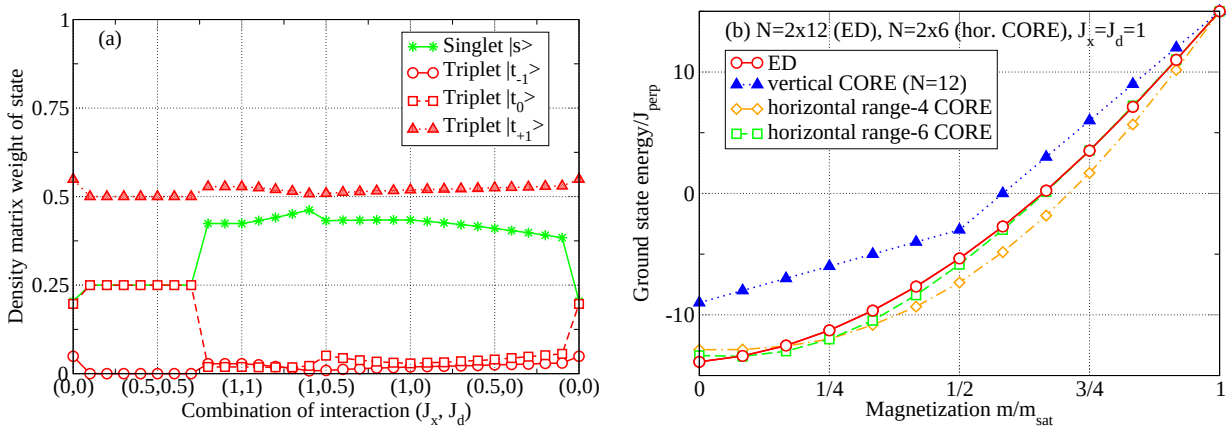


FIG. IV.6: (a) Poids de la matrice densité réduite des quatre états d'un dimère horizontal d'une échelle. Pour aimantation demi-saturée, les calculs sont effectués avec la diagonalisation exacte d'une échelle de 2×12 sites en fonction des couplages (J_x, J_d) qui forment un chemin dans le diagramme de phase. (b) Comparaison de l'énergie en fonction de l'aimantation pour $J_x = J_d = 1$, calculée avec une échelle de spin de 2×12 sites pour le modèle microscopique et avec une échelle de 2×6 sites pour le modèle effectif de CORE basée sur un dimère horizontal. Pour comparaison : la courbe correspondante de l'approche de CORE basée sur un barreau (« vertical CORE ») à portée r *quelconque*, c'est-à-dire $r = 2, 3, \cdots, \infty$.

reproduire de manière qualitative le diagramme de phase complet pour des couplages J_x et J_d entre 0 et $J_\perp = 1$. Ceci confirme notre conception de l'approche de CORE, à savoir que CORE peut être utilisée afin de réduire la complexité d'un modèle microscopique quelconque et nous donner une description correcte des propriétés physiques en présence d'un champ magnétique. Rappelons que nos modèles effectifs peuvent être calculés avec la diagonalisation exacte pour des réseaux avec une taille *doublée* par rapport à la diagonalisation exacte du modèle microscopique. Profitons dans ce qui suit, de la liberté du choix du bloc élémentaire de CORE et considérons une approche basée sur une plaquette qui consiste de deux barreaux, soit quatre sites d'une échelle.

CORE basée sur une plaquette comme bloc élémentaire

Une autre possibilité de diviser l'échelle dans des petits blocs afin de définir le bloc élémentaire de l'approche de CORE consiste dans des plaquettes de deux barreaux. Les quatre spins peuvent donc se trouver dans 16 états : deux singulets, trois triplets et un quintuplet. Sous champ magnétique suffisamment fort, seuls les états polarisés sont pertinents et nous fondons donc notre approche sur les quatre états suivants : le quintuplet complètement polarisé $|Q\rangle$ et les trois triplets polarisés $|T_A\rangle, |T_B\rangle$ et $|T_C\rangle$. Outre ces quatre états polarisés, nous prenons en compte les deux singulets $|S_A\rangle$ et $|S_B\rangle$ qui peuvent tous les deux jouer un rôle important dans la description de la physique de basse énergie. Nous définissons ces six états en termes d'états d'un barreau (cf. l'équation (II.2)), où la notation $|st_{+1}\rangle$ indique un singulet $|s\rangle$ sur le premier barreau et un triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ sur le deuxième. Pour notre nouvelle approche de CORE, nous considérons donc les six états suivants.
Le quintuplet polarisé $|S = 2, S_z = 2\rangle$:

$$|Q\rangle = |t_{+1}t_{+1}\rangle \qquad E_{|Q\rangle} = \frac{1}{2}\big(J_\perp + J_x + J_d\big),$$

les triplets polarisés $|S = 1, S_z = 1\rangle$:

$$\begin{aligned}
|T_A\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|t_0 t_{+1}\rangle - |t_{+1}t_0\rangle\big) & E_{|T_A\rangle} &= \frac{1}{2}\big(J_\perp - J_x - J_d\big),\\
|T_B\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|st_{+1}\rangle - |t_{+1}s\rangle\big) & E_{|T_B\rangle} &= \frac{1}{2}\big(J_\perp - J_x + J_d\big),\\
|T_C\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|st_{+1}\rangle + |t_{+1}s\rangle\big) & E_{|T_C\rangle} &= \frac{1}{2}\big(J_\perp + J_x - J_d\big),
\end{aligned} \tag{IV.8}$$

et les singulets $|S = 0, S_z = 0\rangle$:

$$\begin{aligned}
|S_A\rangle &= |ss\rangle & E_{|S_A\rangle} &= -\frac{1}{2}\big(J_\perp + J_x + J_d\big) - \gamma,\\
|S_B\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\big(|t_{+1}t_{-1}\rangle + |t_{-1}t_{+1}\rangle - |t_0 t_0\rangle\big) & E_{|S_B\rangle} &= -\frac{1}{2}\big(J_\perp + J_x + J_d\big) + \gamma,
\end{aligned}$$

$$\text{avec} \qquad \gamma = \sqrt{J_\perp^2 + J_x^2 + J_d^2 - J_\perp J_x - J_\perp J_d - J_x J_d}.$$

Remarquons que le champ magnétique est négligé dans le calcul des énergies des six états qui sont aussi illustrées dans la figure IV.7 (a) pour un chemin dans le diagramme de phase.

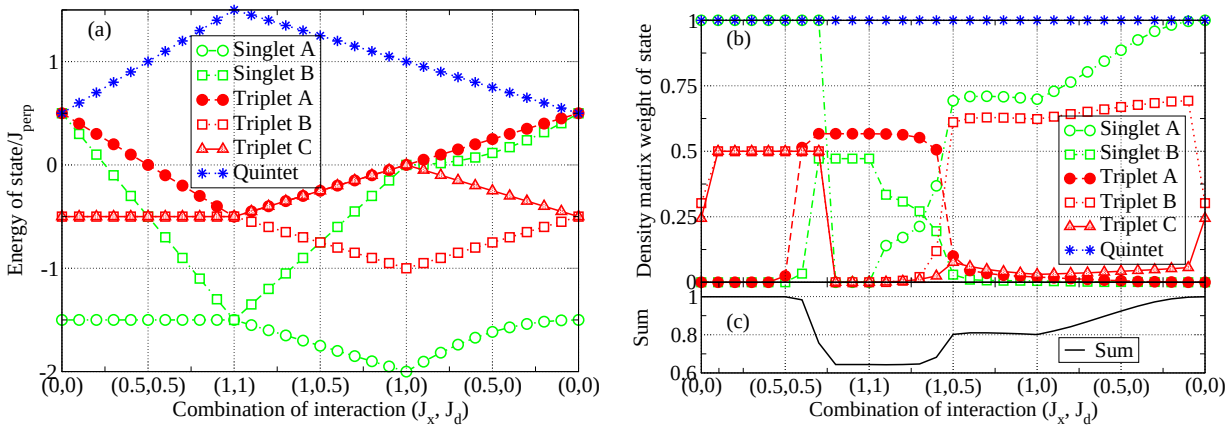


FIG. IV.7: (a) Énergie des six états d'une plaquette sur une échelle de spin, définis dans l'équation (IV.8), en fonction des couplages (J_x, J_d) pour $h = 0$. (b) Poids de la matrice densité réduite des mêmes six états d'une plaquette. Les calculs sont effectués avec la diagonalisation exacte d'une échelle de 2×12 sites en fonction des couplages (J_x, J_d) qui forment un chemin dans le diagramme de phase. Voir texte pour plus de détails sur (b) et (c).

Comme nous avons discuté au-dessus, le poids de la matrice densité réduite est de grande importance afin de juger la pertinence d'un état pour l'état fondamental et afin de décider combien d'états nous devons considérer pour la construction d'une base de CORE. En appliquant la diagonalisation exacte à une échelle de 2×12 sites nous avons donc calculé le poids de la matrice densité réduite pour les six états de l'équation (IV.8) à partir du modèle microscopique. La figure IV.7 (b) montre les résultats de manière suivante : pour chaque état et pour toutes les aimantations m, nous calculons le poids et nous montrons seule la plus grande valeur du poids pour toutes les aimantations. Une petite valeur pour un état nous indique par conséquent, que cet état n'est pas pertinent afin de décrire l'état fondamental pendant *tout* le processus d'aimantation, c'est-à-dire pour tous les champs magnétiques. Ces donnés nous indiquent que pour quelques valeurs des couplages J_x et J_d, il y a des états avec un poids maximal de moins de 5% du poids total et nous pouvons donc négliger ces états. Ainsi, pour des valeurs des couplages J_x et J_d précises, nous sommes capables de tronquer la base de CORE de six états à trois (un état dans chaque secteur de S_z) tout en conservant une large fraction du poids total. Notons que la troncation de la base et par conséquent la réduction de l'espace de Hilbert de façon importante, nous permettent d'accéder à des plus grands systèmes lors de la diagonalisation exacte de notre modèle effectif comme nous discutons en-dessous.

La figure IV.7 (c) nous permet de vérifier si notre approche représente assez de poids de la matrice densité réduite puisqu'elle montre les poids des six états de l'équation (IV.8) unis comme suit : pour toutes les valeurs d'aimantation, nous avons calculé et sommé les poids des six états et nous

montrons le minimum de cette somme par rapport à l'aimantation. Comme le poids représenté par les six états est supérieur à 60% du poids total dans le diagramme de phase complet, nous nous attendons à un succès d'une approche basé sur ces états. En conséquence, les contributions connexes devraient diminuer vite si la portée de l'approche est augmentée.
Nous pouvons ensuite résoudre les modèles effectifs sur des réseaux effectifs et nous montrons dans les figures IV.8 (a) - (d) les résultats de la diagonalisation exacte d'une échelle de 2×14 pour le modèle microscopique et d'une chaîne de 7 sites pour le modèle effectif de CORE. On observe un bon accord entre les courbes exactes et les courbes obtenues avec le modèle effectif de CORE. On constate également que les courbes de CORE convergent vers les courbes exactes si la portée est augmentée de sorte que l'approche à portée 4 donne des résultats très précis. Pour les exemples (a), (b) et (c) de la figure IV.8, nous ne gardons que trois états sur 16, notamment ceux avec le plus grand poids de la matrice densité réduite. Nous remarquons que ces trois états ne sont pas forcément les états de plus basse énergie, comme dans l'exemple (b) $J_x = 0.8$ et $J_d = 0.7$: l'approche qui est basée sur les états du plus grand poids (à savoir $|S_B\rangle$, $|T_A\rangle$ et $|Q\rangle$) résulte dans une plus grande précision que l'approche qui est basée sur les états de plus basse énergie dans chaque secteur de S_z, à savoir $|S_A\rangle$, $|T_B\rangle$ ou/et $|T_C\rangle$ (qui sont dégénérés) et $|Q\rangle$. C'est-à-dire, si les deux critères afin de sélectionner les états de la base de CORE, à savoir le critère de l'énergie (comme proposé par Morningstar et Weinstein [153, 154]) et le critère du poids de la matrice densité réduite, sont en désaccord, le critère du poids des états donne le meilleur résultat. Cette observation est importante et constitue une amélioration considérable de l'approche de CORE. Outre l'importance pour l'algorithme de CORE, nous notons l'aspect pratique du fait de ne garder que trois états afin de construire la base de CORE d'une plaquette : pour la diagonalisation exacte d'une échelle de 2×14 sites, la dimension du plus grand espace de Hilbert par rapport à la composante du spin total S_z^{total} est 40×10^6 pour le modèle microscopique comparé avec seulement 393 états dans le sous-espace de CORE qui est basé sur trois états d'une plaquette. Ceci nous permet d'étudier des réseaux effectifs jusqu'à 18 sites effectifs pour une base de trois états d'une plaquette ce qui correspond à 72 sites du modèle microscopique. Pour une base de six états d'une plaquette on atteint des réseaux effectifs jusqu'à 11 sites effectifs, soit 44 sites du modèle microscopique.
Afin d'illustrer la précision de notre approche CORE ainsi que les plus grandes tailles accessibles, nous montrons la courbe d'aimantation pour deux exemples. Pour $J_x = 1$ et $J_d = 0$ le plateau $m = \frac{1}{2}$ est absent comme le montre la figure IV.9 (a) en illustrant les résultats exacts d'une échelle de spin de 2×14 sites, comparés avec l'approche de CORE à portée 4 qui est basée sur trois états d'une plaquette et appliquée à une chaîne de 18 sites effectifs. La figure IV.9 (b) montre des courbes avec un plateau $m = \frac{1}{2}$ pour $J_x = 0.7$ et $J_d = 0.5$: le modèle microscopique est résolu sur une échelle de spin de 2×14 sites, le modèle effectif de CORE à portée 4, basée sur six états d'une plaquette sur une chaîne de 11 sites effectifs.
Notons le très bon accord entre la courbe exacte et les courbes de l'approche CORE qui nous donnent une résolution plus détaillé du processus d'aimantation en raison d'une incrémentation

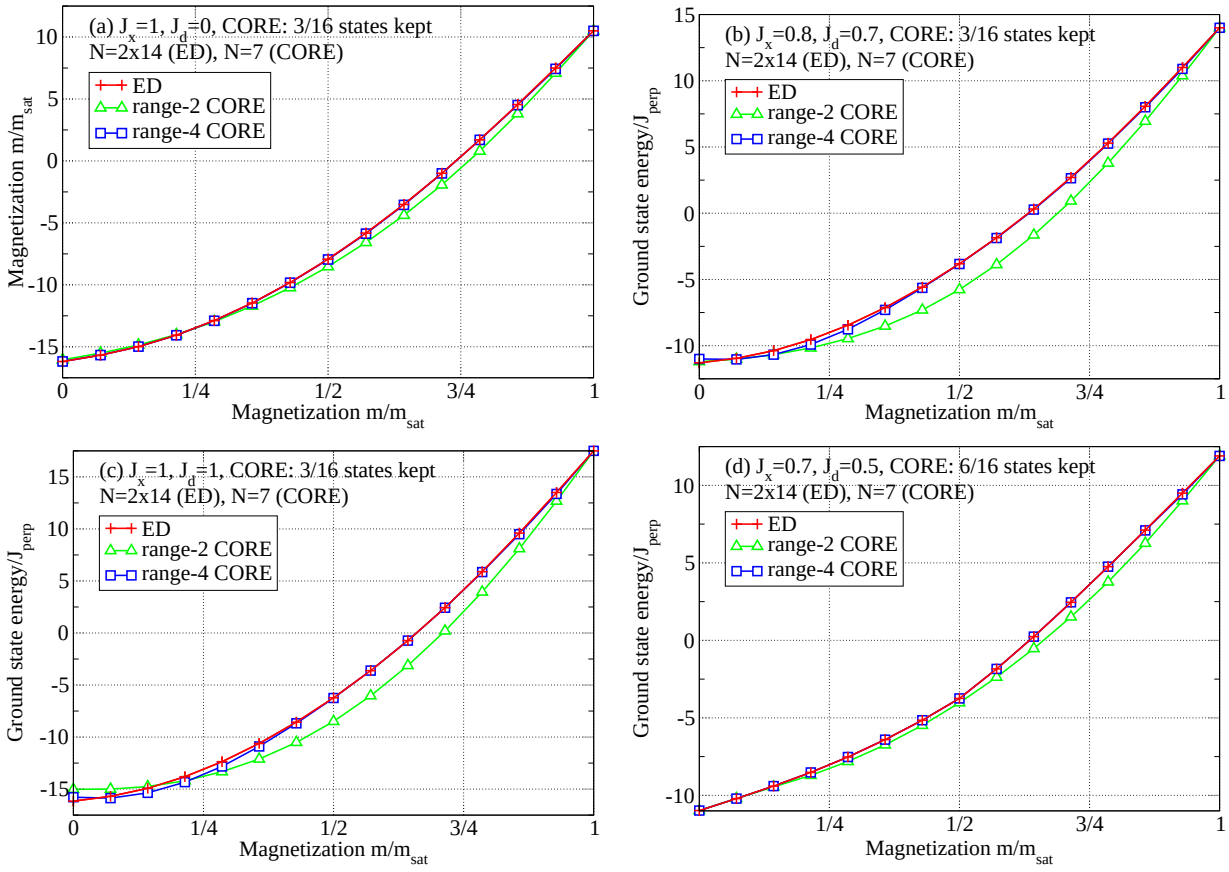


FIG. IV.8: Comparaison de l'énergie en fonction de l'aimantation, calculée avec une échelle de spin de 2×14 sites pour le modèle microscopique et avec une chaîne de 7 sites pour le modèle effectif de CORE à différentes portées sur une chaîne de 14 sites. Pour (a) avec $J_x = 1$ et $J_d = 0$, (b) avec $J_x = 0.8$ et $J_d = 0.7$ et (c) avec $J_x = J_d = 1$, nous ne gardons que les trois états de plus grands poids de la matrice densité réduite (cf. la figure IV.7 (b)), pour (d) avec $J_x = 0.7$ et $J_d = 0.5$ nous gardons six états, définis dans l'équation (IV.8).

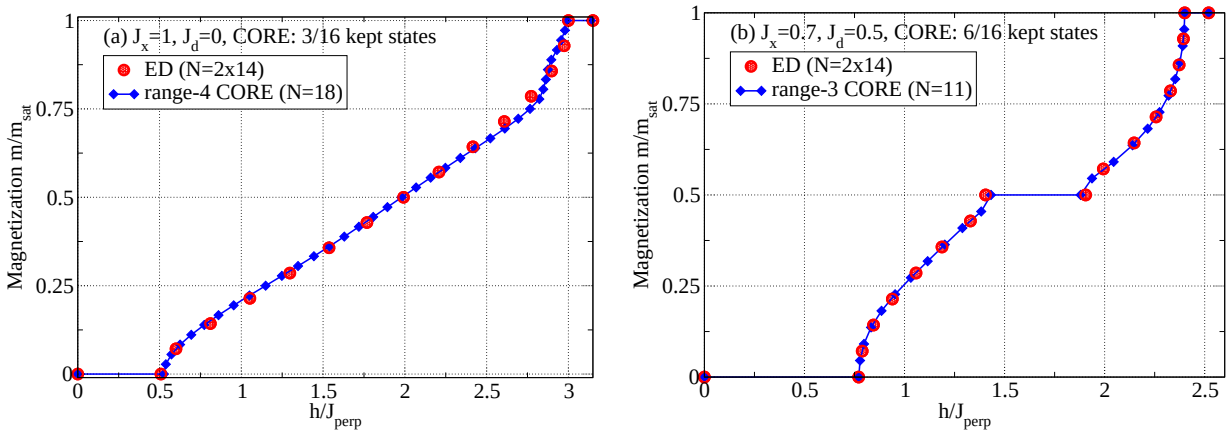


FIG. IV.9: Courbes d'aimantation pour (a) $J_x = 1$ et $J_d = 0$ et (b) $J_x = 0.7$ et $J_d = 0.5$. La courbe exacte est calculée avec une échelle de spin de 2×14 sites, les courbes de l'approche de CORE avec une chaîne de (a) 18 ou (b) 11 sites effectifs ce qui correspond à 72 ou 44 sites du modèle microscopique, respectivement. Le modèle effectif de (a) est calculé à portée 3, de (b) à portée 4.

plus fine.

3 Conclusion partielle

Avec l'exemple de l'échelle de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg, nous avons vu que la méthode CORE peut être utilisée afin de réduire la complexité d'un modèle microscopique quelconque et nous donner une description correcte des propriétés physiques en présence d'un champ magnétique. Si l'interaction $J_\perp$ sur le barreau est dominante, nous notons que l'approche simpliste de CORE, qui se base sur les deux états de basse énergie d'un barreau sous champ magnétique, est satisfaisante. Pour le cas où les trois interactions $J_\perp$, J_x et J_d de l'échelle de spin sont du même ordre de grandeur, cette approche a des difficultés qui sont indiquées par un faible poids de matrice densité réduite de la base de CORE. Ainsi, le poids de matrice densité réduite s'avère un outil efficace et fiable afin de juger la pertinence des états et de mieux choisir la base de l'approche CORE. Néanmoins, avec l'approche CORE basée sur des dimères, nous sommes capables de reproduire de manière qualitative le diagramme de phase complet pour des couplages J_x et J_d entre 0 et $J_\perp = 1$.
Nous remarquons que généralement, les états de basse énergie sont également ceux considérés pertinents par le poids de matrice densité réduite, mais lorsque ces deux critères sont contradictoires, le critère de matrice densité réduite donne des meilleurs résultats. Cette observation est confirmée par l'approche basée sur des plaquettes où nous sommes capables, grâce à ce nouveau critère, de réduire considérablement la taille de l'espace de Hilbert lors de l'approche CORE. Ceci nous

permet de résoudre des grands réseaux effectifs qui restent inaccessibles avec la diagonalisation exacte du modèle microscopique. En outre, nous notons la grande précision de cette approche.

Chapitre V

La bicouche de Heisenberg

Comme le montre la figure I.9, à gauche, la bicouche de Heisenberg est un système bidimensionnel de dimères couplés antiferromagnétiquement. Dans la section 2.2 du chapitre I, nous discutons des expériences avec le composé $BaCuSi_2O_6$ [67], qui est une réalisation de la bicouche de Heisenberg et qui est connu depuis longtemps comme « pourpre de Han » (« Han purple » en anglais). Différentes approches théoriques de la bicouche de Heisenberg anisotrope ont révélé qu'elle possède un diagramme de phase très riche avec une phase supersolide [68, 69, 71].

Dans ce chapitre, nous considérons dans la section 1 la bicouche anisotrope en dérivant un modèle effectif avec la méthode CORE. Notre approche de CORE est très simple puisqu'elle est basée sur le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ d'un dimère et nous comparons l'approche à portée 2 avec la théorie des perturbations. Nous dérivons également un modèle effectif plus complexe en augmentant la portée et nous discutons ce modèle dans le contexte d'une potentielle phase solide et supersolide. La section 2 est consacrée au modèle isotrope, mais frustré et donc une extension de l'échelle de spin. Pour ce modèle, nous dérivons également un modèle effectif à portée 2 et 4 en utilisant la même approche de CORE comme dans le cas anisotrope.

La discussion de l'approche de CORE à la bicouche de Heisenberg dans ce chapitre est basée sur notre article : Abendschein et Capponi [124].

1 La bicouche de Heisenberg anisotrope

Dans ce qui suit, nous étudions la bicouche de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg anisotrope dont le hamiltonien est de forme d'un modèle de spin XXZ. Il est défini comme suit :

$$\mathcal{H}_{XXZ} = J \sum_i \mathbf{S}_{1,i} \cdot \mathbf{S}_{2,i} + J' \sum_{\alpha,\langle i,j\rangle} \left(S^x_{\alpha,i} S^x_{\alpha,j} + S^y_{\alpha,i} S^y_{\alpha,j} + \Delta S^z_{\alpha,i} S^z_{\alpha,j} \right) - h \sum_{\alpha,i} S^z_{\alpha,i}. \qquad \text{(V.1)}$$

L'interaction dominante $J = 1$ couple deux spins-$\frac{1}{2}$, $\mathbf{S}_{1,i}$ et $\mathbf{S}_{2,i}$, en formant un dimère dont un spin fait partie de l'une des deux couches $\alpha = 1, 2$ et l'autre spin de l'autre couche. Ces dimères sont

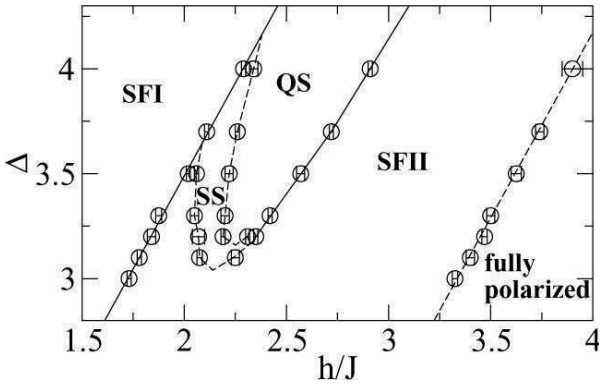


FIG. V.1: Diagramme de phase de la bicouche de Heisenberg en fonction de l'anisotropie Δ et du champ magnétique h pour $J'/J = 0.29$: on voit des phases superfluides (SFI et SFII), une phase supersolide (SS), une phase solide (QS) et une phase complètement polarisée. D'après Ng et Lee [68].

couplés avec une interaction J' qui agit dans le plan des couches et on note une anisotropie Δ dans la composante S_z du spin pour ce couplage. Pour $\Delta = 1$, on retrouve la bicouche de Heisenberg isotrope et la symétrie SU(2) est conservée. Cette symétrie est, bien sûr, brisée pour des valeurs $\Delta \neq 1$. Enfin, le dernier terme du hamiltonien décrit le couplage du système au champ magnétique h qui lui aussi brise la symétrie SU(2).

Des études numériques [68, 69] de la bicouche de Heisenberg sous champ magnétique ont révélé la stabilité d'une phase supersolide, comme illustré dans le diagramme de phase de l'état fondamental, présenté dans la figure V.1. En fonction du champ magnétique h, on trouve cette phase pour des anisotropies $3.1 \leq \Delta/J \leq 4$ et en plus, on trouve des phases superfluides et solides. Nous rappelons l'introduction de ces phases dans les sections 1 et 2 du chapitre II, et en particulier dans le tableau II.1.

De manière analogue à l'application de la théorie des perturbations à l'échelle de spin dans la section II.1 (cf. l'équation (II.7)), nous effectuons d'abord une approche perturbative. Dans ce but, nous considérons le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ d'un dimère afin de décrire la bicouche de Heisenberg sous champ magnétique. Par conséquent, nous obtenons un modèle effectif qui est un modèle $t - V$ bidimensionnel de bosons de cœur dur :

$$\mathcal{H}_{\mathrm{t-V}} = t \sum_{\langle i,j \rangle} \left(b_i^\dagger b_j + b_i b_j^\dagger \right) + V \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j + \mu \sum_i n_i. \tag{V.2}$$

La notation $\langle i, j \rangle$ indique des premiers voisins et l'opérateur $b_i^\dagger$ (b_i) crée (annihile) un boson de cœur dur sur le site i. Avec la théorie des perturbations on trouve les expressions suivantes pour le terme de saut t, l'interaction entre deux particules voisines V et le potentiel chimique μ :

$$t = \frac{J'}{2}, \qquad V = \frac{J'\Delta}{2}, \qquad \mu = J - h. \tag{V.3}$$

Ceci nous indique avec le critère de l'équation (II.12) que la transition entre la phase superfluide et la phase solide a lieu pour

$$\frac{V}{|t|} = \Delta > \Delta_c = 2, \tag{V.4}$$

ce qui est équivalent à l'apparition d'un plateau $m = \frac{1}{2}$ pour $\Delta > 2$, indépendamment des couplages J'/J. Comme nous le discutons plus loin, ce résultat n'est pas en bon accord avec les résultats du QMC de Ng et Lee [68].

Dans notre approche la plus simple de la méthode CORE, nous utilisons le même bloc élémentaire, à savoir un dimère de la bicouche, et nous basons notre approche sur les mêmes deux états : le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$. Avec l'approche à portée 2, qui est identique à l'approche de CORE la plus simple pour l'échelle de spin de la section 1 du chapitre IV, nous dérivons le même modèle effectif $t - V$ que la théorie des perturbations dans l'équation (V.2). Avec un calcul similaire à l'équation (IV.2) pour l'échelle de spin, nous trouvons pour les paramètres :

$$t = \frac{J'}{2}, \qquad V = \frac{J'\Delta}{2} + E_{GS} + \frac{3J}{2}, \qquad \mu = -\frac{J}{2} - E_{GS} - h, \tag{V.5}$$

où E_{GS} est l'énergie exacte de l'état fondamental de deux dimères. Afin de vérifier que notre approche soit bien justifiée, nous calculons le poids de la matrice densité réduite des quatre états d'un dimère pour un système de 4×4 dimères. Ce calcul est effectué pour le système à demi saturation de l'aimantation ($m = \frac{1}{2}$) en utilisant la diagonalisation exacte selon l'équation (III.20). Les résultats indiquent que la base de notre approche de CORE représente plus de 90% du poids total dans la région $0 \leq J'/J \leq 0.5$ et $0 \leq \Delta \leq 4$ et comme le montre la figure V.2 (a) pour $J'/J = 0.3$, les poids des états sont presque indépendants de l'anisotropie Δ. Sans montrer les résultats correspondants, nous observons en plus que les poids restent assez stables lorsque le couplage J'/J change.

Notre approche CORE nous permet également de dériver le critère de la transition entre la phase superfluide et la phase solide et nous trouvons :

$$\frac{V}{|t|} = 2 = \Delta_c + \frac{2E_{GS} + 3J}{J'}. \tag{V.6}$$

Pour CORE à portée 2, la position de la transition dépend donc des couplages J'/J, contrairement au résultat perturbatif de l'équation (V.4) que nous ne retrouvons que pour le cas $J'/J = 0$. Nous illustrons ce résultat dans la figure V.2 (b) et nous remarquons que l'anisotropie critique Δ_c, qui indique la transition entre une phase superfluide (pour $\Delta < \Delta_c$) et une phase solide (pour $\Delta > \Delta_c$), augmente strictement avec le rapport des couplages J'/J. Nous comparons le résultat perturbatif et notre résultat avec le diagramme de phase de Ng et Lee [68] de la figure V.1 qui indique une phase solide (QS), c'est-à-dire un plateau $m = \frac{1}{2}$, pour $J'/J = 0.29$ et $\Delta > 3.2$. Comme le montre la figure V.3 (a), notre approche indique la transition à $\Delta_c = 2.8$ pour $J'/J = 0.3$ ce qui est déjà en bon accord avec les calculs de QMC de Ng et Lee, contrairement à la théorie des perturbations qui trouve $\Delta_c = 2$ pour toutes les valeurs de J'/J. Remarquons dans ce contexte que notre approche,

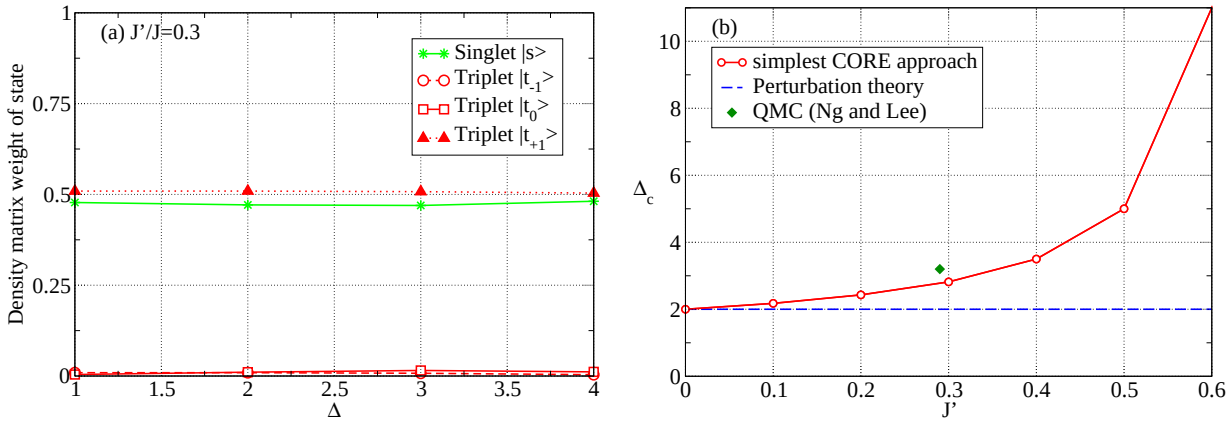


FIG. V.2: Pour la bicouche de Heisenberg anisotrope : (a) Poids de la matrice densité réduite des quatre états d'un dimère, calculé avec la diagonalisation exacte d'un système de 4×4 dimères à demi-aimantation pour $J'/J = 0.3$. (b) Anisotropie critique Δ_c en fonction du couplage J' (avec $J = 1$) à partir laquelle un plateau d'aimantation $m = \frac{1}{2}$ apparaît dans les différentes approches : la théorie des perturbations de l'équation (V.4), CORE à portée 2 de l'équation (V.6), et enfin le point $J'/J = 0.29$ et $\Delta_c = 3.2$ du QMC de Ng et Lee [68].

basée sur seulement deux dimères, est très simple à effectuer et s'avère un bon outil afin de détecter la transition de phase entre une phase solide et superfluide.

Outre une phase solide, Ng et Lee [68] trouvent une phase supersolide qui est située près de la phase solide. Par contre, nous notons que le modèle effectif $t - V$ de l'équation (V.2) ne possède pas de phase supersolide. Plutôt, ce modèle montre une séparation de phase [132], comme brièvement mentionné dans la section 4 du chapitre II. Il serait quand-même très intéressant d'étudier des modèles effectifs de bosons de cœur dur qui aient un diagramme de phase de grande richesse et qui incluent éventuellement une phase solide. Il est connu que des termes de saut corrélé favorisent une phase supersolide [123, 185] et afin de dériver un modèle effectif de CORE qui soit capable d'inclure de tels processus, nous sommes donc obligés d'augmenter la portée de notre approche de CORE à portée 4. Dans ce but, nous considérons un système de 2×2 dimères dans ce qui suit. Comme expliqué dans la section 2 du chapitre IV, nous pouvons négliger les contributions d'une silhouette « L » dans le calcul du hamiltonien connexe et effectif [160]. Nous obtenons ensuite un modèle effectif de bosons de cœur dur qui décrit tous les processus permis par des considérations

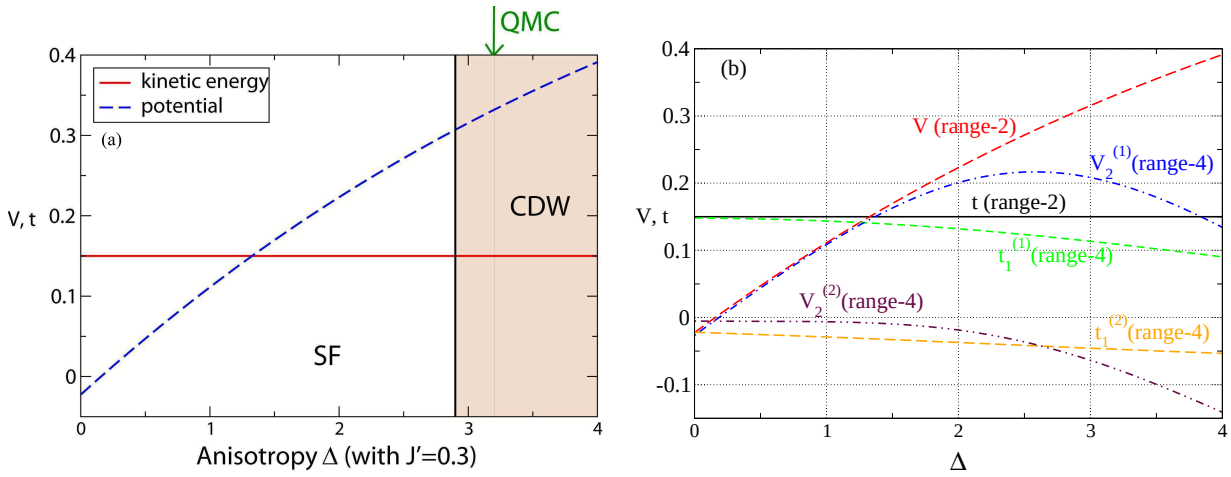


FIG. V.3: (a) Énergie cinétique (équivalente au terme de saut t) et interaction V en fonction de l'anisotropie Δ pour $J'/J = 0.3$, calculées avec l'approche de CORE à portée 2 (cf. les équations (V.2) et (V.5)). Pour $\Delta < 2.8$, une phase superfluide est observée, pour $\Delta > 2.8$ une phase solide (onde de densité de charge, CDW). Pour comparaison : le point de transition $\Delta_c = 3.2$ selon le QMC de Ng et Lee [68]. (b) Pour CORE à portée 2 et 4 (cf. l'équation (V.7)), les termes de saut et les interactions dominants sont illustrés en fonction de l'anisotropie Δ pour $J'/J = 0.3$.

de symétrie, comme la conservation du nombre de particules, par exemple :

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = \sum_{\substack{l \\ i \square j \\ k}} \Bigg[& \frac{C}{N} + \frac{\mu}{4}\Big(\sum_i n_i\Big) + \frac{t_1^{(1)}}{2}(b_i^\dagger b_j + \circlearrowleft + h.c.) + t_1^{(2)}(b_i^\dagger b_k + b_l^\dagger b_j + h.c.) \\ & + t_2^{(1)}(b_l^\dagger b_k^\dagger b_i b_j + h.c.) + t_2^{(2)}(b_l^\dagger b_j^\dagger b_i b_k + \circlearrowleft + h.c.) \\ & + t_1^{(3)}\Big(b_i^\dagger b_l^\dagger (n_j + n_k - 2n_j n_k) + \circlearrowleft + h.c.\Big) + t_1^{(4)}\Big(b_i^\dagger b_k^\dagger (n_j + n_l - 2n_j n_l) + \circlearrowleft + h.c.\Big) \\ & + \frac{V_2^{(1)}}{2}(n_i n_j + \circlearrowleft) + V_2^{(2)}(n_i n_k + n_j n_l) + V_3^{(1)}\Big(n_i n_j (n_k + n_l - 2n_k n_l) + \circlearrowleft\Big) \\ & + t_1^{(5)}(b_i^\dagger b_j n_k n_l + \circlearrowleft) + t_1^{(6)}(b_i^\dagger b_k n_j n_l + \circlearrowleft) + V_4 n_i n_j n_k n_l \Bigg]. \end{aligned} \tag{V.7}$$

Nous utilisons la notation suivante : la somme $\sum_{\substack{l \\ i \square j \\ k}}$ concerne les quatre sites d'une plaquette et le cercle $\circlearrowleft$ indique que toutes les contributions d'un type doivent être incluses en effectuant des rotations et des permutations, comme par exemple : $\sum_{\substack{l \\ i \square j \\ k}} \big(\frac{t_1^{(1)}}{2}(b_i^\dagger b_j + \circlearrowleft)\big) = \frac{t_1^{(1)}}{2}(b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_k + b_k^\dagger b_l + b_l^\dagger b_i)$.

Dans la région que nous considérons, à savoir $0 \leq \Delta \leq 4$ et $J'/J = 0.3$, nous observons que tous les termes de l'équation (V.7) sont non nuls, mais nous constatons que les termes suivants sont dominants : les termes de saut au premier et deuxième voisin $t_1^{(1)}$ et $t_1^{(2)} = -t_1^{(6)}$ ainsi que les interactions entre deux particules qui sont premiers et deuxièmes voisins $V_2^{(1)}$ et $V_2^{(2)}$. Nous illustrons

ces termes dans la figure V.3 (b), ensemble avec les termes t et V de l'approche de CORE à portée 2 (cf. l'équation (V.2)), en fonction de l'anisotropie Δ.
La présence d'un grand nombre de termes rend difficile une interprétation directe de ce modèle effectif. Par exemple, il n'y a pas de critère simple pour l'existence d'une phase d'un plateau, comme l'équation (V.2) pour le modèle effectif $t - V$. Néanmoins, uniquement basé sur nos résultats, un plateau $m = \frac{1}{2}$ pour des grandes valeurs d'anisotropie Δ semble probable : premièrement, la phase solide est gappée et plutôt robuste envers de petites interactions supplémentaires. Et deuxièmement, les interactions dominantes à plus longue distance, comme l'interaction attractive $V_2^{(2)}$ (cf. la figure V.3 (b)), par exemple, ont tendance à stabiliser la phase solide.
En outre, une phase supersolide pourrait exister en raison de l'apparition de termes de saut diagonal [135] et des termes de saut corrélé [123, 185]. En particulier, si on *enlève* une particule du système demi rempli et gappé, on crée un trou qui peut se propager grâce au terme de saut diagonal. Ce scénario résulte dans un paramètre d'ordre superfluide qui coexiste avec celui de la phase solide ce qui est la définition de la phase supersolide. En revanche, si on *ajoute* une particule au système demi rempli et gappé, le hamiltonien à portée 4 (cf. l'équation (V.7)) ne permet pas de saut diagonal en raison de l'annulation des termes $t_1^{(2)}$ et $t_1^{(6)} = -t_1^{(2)}$. Nous nous attendons donc, à une phase supersolide qui est stable (instable) pour des remplissages inférieurs (supérieurs) à $\frac{1}{2}$ ce qui est en accord avec les résultats de Ng et Lee [68].

Dans une étude récente, Picon *et al.* [71] ont vérifié nos idées sur les termes de saut et de saut corrélé quant à une phases solide et une phases supersolide. Afin d'étudier la bicouche de Heisenberg anisotrope en grand détail, ils dérivent un modèle effectif en utilisant la méthode CORE ainsi qu'une méthode de transformations perturbatives, continues et unitaires (PCUTs) que nous discutons dans le contexte du réseau de Shastry-Sutherland (cf. le chapitre VII). Les modèles effectifs sont ensuite analysés avec une approche de champ moyen ou bien du QMC.
Comme nous, ils ont dérivé un modèle effectif avec une approche de CORE, basée sur le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ d'un dimère. Ils ont considéré un bloc de 2×2 dimères (notre portée 4), mais aussi un bloc de trois dimères alignés. Comme illustré dans les figures V.4 (a) et (b), ceci leur permet d'étudier le terme de saut corrélé diagonal d'un trou avec le bloc (a) et un terme de saut corrélé d'un trou au troisième voisin en présence d'une particule au milieu avec le bloc (b). Également un processus appelé « leapfrog » (voir la figure V.4 (c)) est possible et nous notons que Picon *et al.* expliquent que ce processus favorise une phase supersolide en permettant la délocalisation de trous (singulets) supplémentaires. Le modèle effectif est ensuite traité avec une approche de champ moyen afin de dériver des différentes quantités, comme des paramètres d'ordre et la courbe d'aimantation, pour des blocs de taille finie. En fonction du champ magnétique h, ils trouvent une phase superfluide (SF), ensuite une phase supersolide (SS) qui se trouve juste en dessous d'une large phase solide (CBS) et enfin de nouveau une phase superfluide (SF), comme le montre la figure V.4 (b).

En conclusion, une phase supersolide est bien établie pour la bicouche de Heisenberg anisotrope.

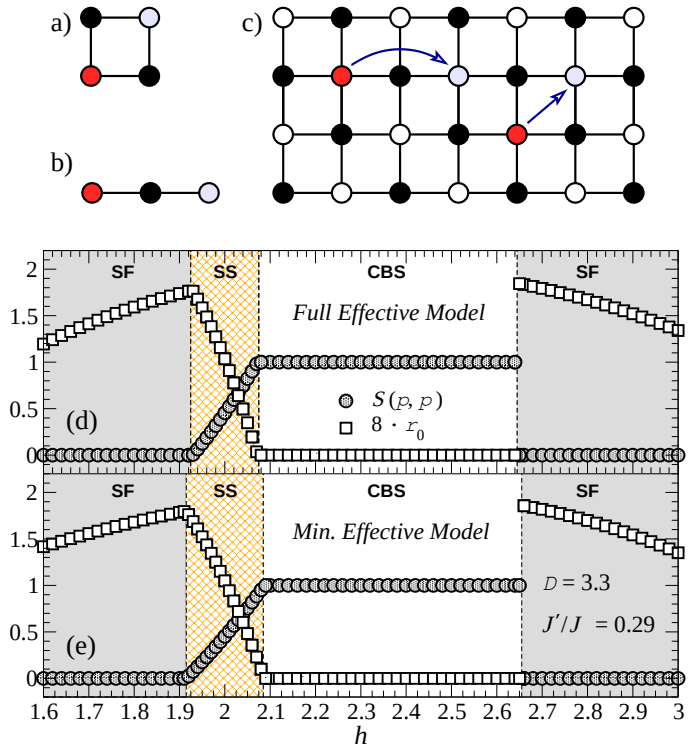


FIG. V.4: Termes de saut corrélé de trous (singulets), dérivés sur un bloc de (a) 2×2 dimères et (b) 3 dimères alignés. (c) Le processus « leapfrog » favorise une phase supersolide. (d) et (e) pour $\Delta = 3.3$ et $J'/J = 0.29$: les paramètres d'ordre en fonction du champ magnétique h indiquant une séquence de phases. Dans la phase supersolide (SS), les paramètres d'ordre de la phase superfluide (SF) et solide (CBS) coexistent. Les résultats sont calculés avec une méthode de champ moyen appliqué au modèle effectif de CORE. D'après Picon *et al.* [71].

Par contre, quant à des expériences avec des composés réels, la grande amplitude de l'anisotropie $\Delta > 3$ de la composante du spin S_z du couplage J' entre les dimères pourrait poser problème. Une anisotropie d'une telle grandeur pourrait être difficile à réaliser dans des composés réels. Ceci motive notre étude de la bicouche de Heisenberg frustrée dans la section suivante.

2 La bicouche de Heisenberg frustrée

Nous considérons la bicouche de spin-$\frac{1}{2}$ de Heisenberg sans anisotropie ($\Delta = 1$), mais avec une interaction frustrante J_d qui agit entre les deux couches. Ce modèle conserve la symétrie SU(2) et constitue une généralisation de l'échelle de spin frustrée en deux dimensions. Par conséquent, nous adoptons la notation de l'échelle de spin dans ce qui suit. Nous rappelons que la section 1 du chapitre II présente des considérations théoriques de l'échelle de spin et que nous discutons l'application de la méthode CORE à ce modèle dans le chapitre IV.
Le hamiltonien de la bicouche de Heisenberg frustrée sous champ magnétique est définit comme suit :

$$\mathcal{H} = J_\perp \sum_i \mathbf{S}_{1,i} \cdot \mathbf{S}_{2,i} + J_x \sum_{\langle i,j\rangle,\alpha} \mathbf{S}_{\alpha,i} \cdot \mathbf{S}_{\alpha,j} + J_d \sum_{\langle i,j\rangle} \left(\mathbf{S}_{1,i} \cdot \mathbf{S}_{2,j} + \mathbf{S}_{2,i} \cdot \mathbf{S}_{1,j}\right) - h \sum_{\alpha,i} S^z_{\alpha,i}. \quad \text{(V.8)}$$

Notre approche de CORE se base comme dans les exemples pour la bicouche de Heisenberg anisotrope et l'échelle de spin sur le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ d'un dimère. Dans la figure V.5 nous présentons le poids de la matrice densité réduite pour les quatre états d'un dimère de la bicouche de Heisenberg frustrée, calculés avec la diagonalisation exacte d'un système de 4×4 dimères à demi-aimantation. Nous notons que la base de CORE réunit une très grande fraction du poids total pour des faibles interactions J_x et J_d[1] : pour $J_x, J_d < 0.4$, le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ représentent plus de 95% du poids total.
Avec notre approche de CORE à portée 2, nous dérivons le même modèle effectif que pour le cas anisotrope, à savoir le modèle $t-V$ bidimensionnel de bosons de dœur dur, donné dans l'équation (V.2). Les paramètres t, V et μ se calculent selon l'équation (IV.3) que nous avons dérivées lors de l'approche de CORE à l'échelle de spin. Nous illustrons le terme de saut et l'interaction entre deux particules voisines dans la figure V.6 (a) en fonction du couplage J_d avec $J_x = 0.3$. Le critère de l'équation (II.12) pour la transition entre une phase superfluide (SF) et une phase solide (CDW) indique la transition pour $J_d = 0.11$ si $J_x = 0.3$ reste fixé. Nous nous attendons donc, à une phase avec un plateau $m = \frac{1}{2}$ comparable à celle de l'échelle de spin, montrée dans la figure IV.2 (a).
Nous dérivons également un modèle effectif à portée 4, qui est basé sur un bloc de 2×2 dimères. Le hamiltonien effectif est défini dans l'équation (V.7) et contrairement au cas anisotrope, nous trouvons seulement deux termes dominants. Ce sont des termes à courte distance : le terme de saut

[1]Nous utilisons toujours $J_\perp = 1$.

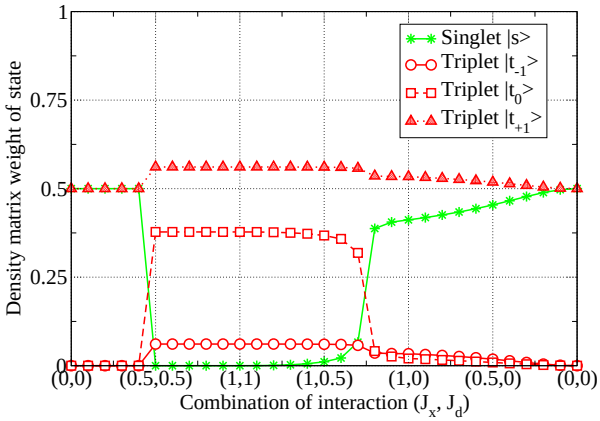


FIG. V.5: Poids de la matrice densité réduite des quatre états d'un dimère de la bicouche de Heisenberg frustrée, calculé avec la diagonalisation exacte d'un système de 4×4 dimères à demi-aimantation le long d'un chemin dans le diagramme de phase.

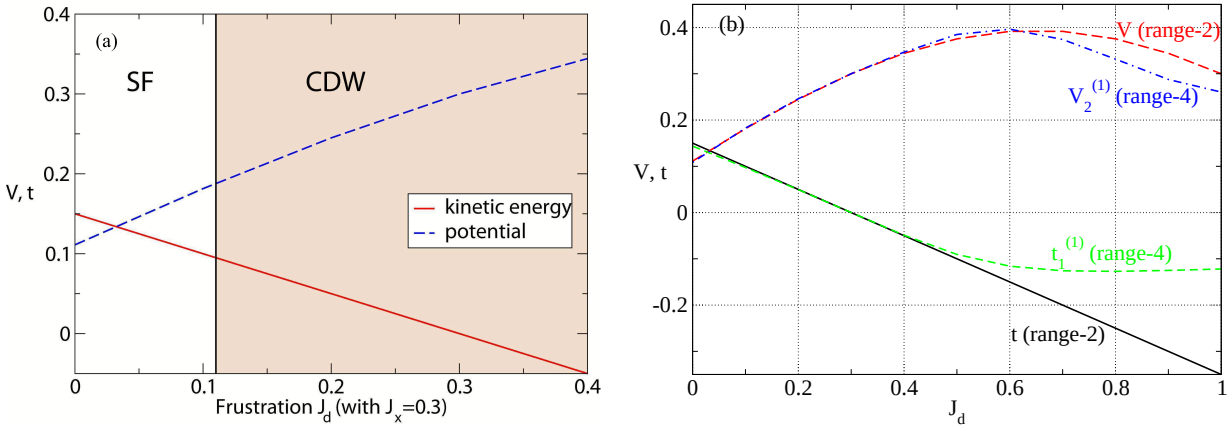


FIG. V.6: (a) Énergie cinétique (équivalente au terme de saut t) et interaction V en fonction du couplage J_d pour $J_x = 0.3$, calculées avec l'approche de CORE à portée 2 (cf. les équations (V.2) et (IV.3)). Avec $J_x = 0.3$, une phase superfluide est observée pour $J_d < 0.11$ et une phase solide (onde de densité de charge, CDW) pour $J_d > 0.11$. (b) Pour CORE à portée 2 et 4 (cf. l'équation (V.7)), les termes de saut et les interactions dominants sont illustrés en fonction du couplage J_d pour $J_x = 0.3$.

au premier voisin $t_1^{(1)}$ et l'interaction entre deux particules qui sont premières voisines $V_2^{(1)}$ sont un ordre de grandeur plus grand que les autres termes du hamiltonien. Nous illustrons ces deux termes dans la figure V.6 (b), ensemble avec le résultat de la portée 2 et nous remarquons que les termes à portée 2 et 4 sont pratiquement identiques pour $J_d \leq 0.4$ avec $J_x = 0.3$. Ce résultat nous montre que notre approche de CORE est déjà bien convergée à portée 2 ce qui n'est pas étonnant vu le très grand poids de matrice densité réduite de la base de CORE.
En fonction des couplages J_x et J_d, nous trouvons que des termes d'ordre plus élevé émergent. De manière analogue à la bicouche anisotrope de la section précédente, ces termes vont probablement aider à stabiliser une phase supersolide près d'une phase solide dans une bicouche de Heisenberg frustrée. Une étude approfondie de ce modèle effectif à portée 4 ou à portée plus élevée avec la méthode du QMC ou une méthode comparable serait souhaitable afin de confirmer notre prédiction. Puisque des composés frustrés sont plus faciles à synthétiser que des composés avec des interactions fortement anisotropes, une telle étude pourrait nous donner des informations intéressantes. Dans ce contexte, l'étude théorique de la bicouche de Heisenberg frustrée et isotrope de spin-1 sous champ magnétique de Sengupta et Batista [70] est très intéressante : ils trouvent une phase supersolide et évoquent qu'une phase supersolide pourrait être observée dans un composé frustré correspondant.

3 Conclusion partielle

Avec un effort modeste, nous dérivons des modèles effectifs pour la bicouche de Heisenberg anisotrope ainsi que pour le modèle isotrope, mais frustré. Le modèle effectif à portée 2 montre une transition entre une phase superfluide (qui correspond à une courbe d'aimantation avec une pente non nulle pour le modèle initial) et une phase solide (correspondant à un plateau d'aimantation). Ce calcul qui est très simple à effectuer, est pourtant une amélioration par rapport au résultat correspondant de la théorie des perturbations, surtout pour le modèle anisotrope.
En augmentant la portée de notre approche, nous pouvons également dériver des termes plus complexes qui sont connus pour leur tendance à favoriser des phases exotiques, comme une phase supersolide. Dans ce contexte, nous proposons des expériences avec une bicouche de Heisenberg frustrée, ce qui correspond à des interactions plus réalistes.

Chapitre VI

La chaîne de dimères orthogonaux sous champ magnétique

Dans ce chapitre, nous présentons la chaîne de dimères orthogonaux qui est la réalisation unidimensionnelle du réseau de Shastry-Sutherland. Les considérations de ce chapitre ont donc pour but de faciliter la compréhension et de préparer la discussion de ce modèle bidimensionnel que nous discutons dans le chapitre VII. Nous remarquons que la chaîne de dimères orthogonaux n'a pas encore de réalisation expérimentale, mais la géométrie est similaire à des chaînes de diamant déformées que nous illustrons dans la section 2.1 du chapitre I, plus précisément pour l'exemple d'azurite ($Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$) dans la figure I.3.

Nous présentons dans la section 1 les résultats théoriques pour la chaîne de dimères orthogonaux sous champ magnétique qui possède une série infinie de plateaux [47]. Dans la section 2, nous présentons l'application de CORE à ce modèle et nous choisissons le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ d'un dimère comme base de CORE. Nous discutons les différences importantes entre des dimères verticaux et horizontaux qui permettent de dériver un modèle effectif simple puisqu'il est *classique*. Enfin nous montrons la correspondance entre la portée de notre approche et des interactions à une certaine distance qui rendent accessibles une partie des plateaux d'aimantation de la série infinie. Nous présentons nos conclusions pour ce modèle dans la section 3.

1 Le modèle microscopique

La chaîne de dimères orthogonaux [116, 186, 187] est un système unidimensionnel qui décrit des spins-$\frac{1}{2}$ couplés antiferromagnétiquement. Le hamiltonien du système sous champ magnétique h est défini comme suit :

$$\mathcal{H} = J \sum_{<i,j>} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J' \sum_{\ll i,j \gg} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - h \sum_i S_i^z. \tag{VI.1}$$

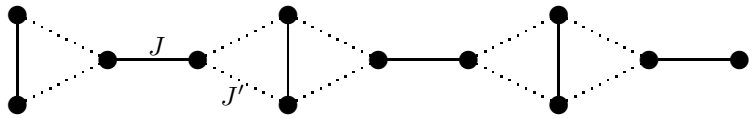


FIG. VI.1: La chaîne de dimères orthogonaux : deux spins, couplés avec une interaction J, forment un dimère. Les dimères sont couplés avec l'interaction J'.

Des dimères sont formés par deux spins $\mathbf{S}_i$ et $\mathbf{S}_j$ qui sont des plus proches voisins et couplés avec une interaction $J = 1$ et les dimères sont couplés par une interaction J'. Comme le montre la figure VI.1, il s'agit de la réalisation unidimensionnelle du réseau de Shastry-Sutherland que nous abordons et étudions en détail dans le chapitre VII.
Il est connu que la chaîne de dimères orthogonaux a une transition de phase de premier ordre pour $J'/J = \left(J'/J\right)_c = 0.81900$ [188]. Pour des faibles couplages J'/J, le système a un état fondamental exact de dimères et pour $J'/J > \left(J'/J\right)_c$ l'état fondamental est décrit par des plaquettes de quatre spins. En outre, sous champ magnétique, ce système possède un comportement intéressant, à savoir des plateaux d'aimantation pour $m = \frac{1}{2}$ et $m = \frac{1}{4}$ [188, 189]. Schulenburg et Richter [47], montrent en plus l'existence de plateaux supplémentaires en dérivant une série infinie de plateaux au-dessous du plateau $m = \frac{1}{2}$. Ces plateaux sont stables pour des aimantations

$$\frac{m_{sat}}{4} \leq m = \frac{k}{2k+2} < \frac{m_{sat}}{2}, \qquad k \in \mathbb{Z} \tag{VI.2}$$

et la figure VI.2 illustre le début de cette série. Outre un gap de spin et un large plateau $m = \frac{1}{2}$, le calcul de DMRG pour une chaîne de 48 dimères montre les plateaux $m = \frac{1}{4}$ pour $k = 1$, $m = \frac{1}{3}$ ($k = 2$) et $m = \frac{3}{8}$ ($k = 3$) tandis que le calcul de diagonalisation exacte d'une chaîne de 12 dimères ne montre que les plateaux $m = \frac{1}{4}$ et $m = \frac{1}{3}$ en raison de la taille finie plus petite par rapport au système considéré avec le DMRG. Qualitativement, ces plateaux sont caractérisés par des groupes de k dimères verticaux consécutifs (pour une chaîne horizontale, comme illustrée dans la figure VI.1) qui sont tous occupés par des triplets polarisés $|t_{+1}\rangle$. Remarquons que les dimères horizontaux sont occupés par des singulets et par conséquent ces dimères ne sont pas considérés plus en détails. Les groupes de k triplets polarisés sur des dimères verticaux (que l'on appelle fragments) couvrent la chaîne de façon périodique et sont séparés l'un de l'autre par un dimère vertical qui est occupé par un singulet $|s\rangle$. Nous notons qu'un singulet $|s\rangle$ sur un dimère vertical coupe exactement la chaîne en formant des fragments de dimères verticaux consécutifs qui sont tous occupés par des triplets polarisés $|t_{+1}\rangle$. On vérifie facilement que cette périodicité obéit le critère d'Oshikawa, Yamanaka et Affleck [26] de l'équation (I.3) pour l'existence de plateaux d'aimantation.
Précisons la physique des plateaux qui forment cette série en suivant la discussion de Schulenburg et Richter [47]. Nous notons que la chaîne est exactement coupée par des singulets $|s\rangle$ sur un dimère vertical qui définissent les fragments. Le premier plateau respectant cette règle est le pla-

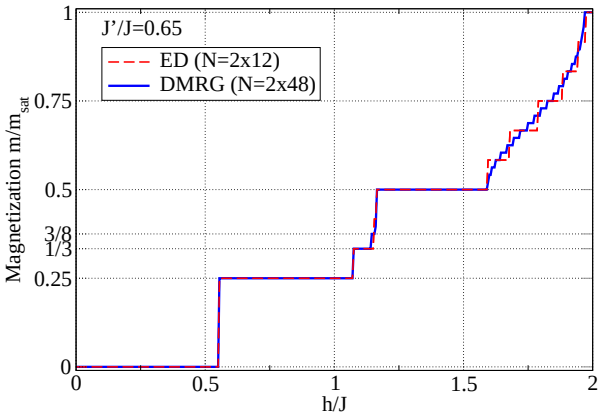


FIG. VI.2: Courbe d'aimantation de la chaîne de dimères orthogonaux pour $J'/J = 0.65$, calculée avec la diagonalisation exacte de 12 dimères et le DMRG de 48 dimères. La résolution du calcul de DMRG est meilleure en raison d'une taille de système plus grande.

teau $m = \frac{1}{4}$ qui est caractérisé par un état fondamental qui est le produit de fragments identiques de longueur $k = 1$, c'est-à-dire une alternance de triplets polarisés $|t_{+1}\rangle$ et de singulets $|s\rangle$ sur les dimères verticaux. Les fragments ont une aimantation $S^z_{k=1} = 1$ et l'aimantation de la chaîne qui consiste de N spins-$\frac{1}{2}$ est donc $S^z_{\text{chaîne}} = S^z_k N/(4k+4) = N/8$. Afin d'augmenter l'aimantation du système, un fragment de $k = 2$ avec $S^z_{k=2} = 2$ est introduit et nous notons que les prochains états propres avec une aimantation plus élevée sont atteints si on remplace successivement les fragments de $k = 1$ par des fragments de $k = 2$. Comme les états fondamentaux sont des produits des fragments, ce processus nécessite une énergie constante pour chaque remplacement. Par conséquent, l'énergie est une fonction linéaire de l'aimantation ce qui correspond à un plateau d'aimantation (cf. la section 2 du chapitre II et la figure II.4).
Le champ critique pour quitter le plateau $m = \frac{1}{4}$ et afin d'atteindre le prochain plateau de la série, $m = \frac{1}{3}$ avec $S^z_{\text{chaîne}} = S_k N/(4k+4) = N/6$, est atteint si tous les fragments de $k = 1$ ont été remplacés par des fragments de $k = 2$. Pour des aimantations plus élevées, on doit donc remplacer des fragments de $k = 2$ par des fragments de $k = 3$ ce qui va coûter plus d'énergie par rapport à l'introduction antérieure des fragments de $k = 2$. La courbe de l'énergie en fonction de l'aimantation a désormais une pente plus inclinée ce qui implique une aimantation plus élevée. Cette pente reste constante lors du remplacement des fragments de $k = 2$ par des fragments de $k = 3$ et définit donc la taille du plateau $m = \frac{1}{3}$.
On remarque que les plateaux ultérieurs avec une aimantation plus élevée s'expliquent de façon suivante : les fragments de $k = 2$ sont remplacés par des fragments de $k = 3$, et ensuite les fragments de $k = 3$ sont remplacés par des fragments de $k = 4$, etc. Enfin, une image qualitative du plateau $m = \frac{1}{2}$, consiste de la configuration où tous les dimères verticaux sont occupés par des triplets polarisés $|t_{+1}\rangle$ et tous les dimères horizontaux par des singulets $|s\rangle$.
Après ces considérations préparatoires, nous discutons dans la section suivante l'application de la

méthode CORE à la chaîne de dimères orthogonaux.

2 L'approche de CORE à différentes portées

Comme discuté au-dessus, pour des aimantations $m \leq \frac{1}{2}$ et des faibles couplages $J'/J < \left(J'/J\right)_c$, la physique de la chaîne de dimères orthogonaux sous champ magnétique est déterminée par les dimères verticaux de la chaîne (qui est horizontale) et les dimères horizontaux peuvent être négligés parce qu'ils sont toujours occupés par des singulets $|s\rangle$. Ce fait est illustré par nos calculs du poids de la matrice densité réduite que nous montrons dans les figures VI.3 (a) - (e). Ces calculs ont été effectués en utilisant la diagonalisation exacte selon l'équation (III.20) pour une chaîne de sept dimères, soit 14 sites.
La figure VI.3 (a) montre le système pour aimantation nulle ($m = 0$) et nous notons que le poids est complètement concentré sur les singulets des deux sortes de dimères jusqu'à $J'/J = 0.8$. Nos calculs sont en bon accord avec le résultat $J'/J = \left(J'/J\right)_c = 0.81900$ de Koga *et al.* [188] parce que nous observons que la physique de l'état fondamental change pour des couplages $J'/J > 0.8$ et tout le poids des dimères verticaux se retrouve désormais dans les triplets qui sont dégénérés. Le singulet du dimère vertical, par contre, ne représente plus aucun poids. Le changement est moins dramatique pour les dimères horizontaux, mais on observe aussi que le poids du singulet tombe pour $J'/J > 0.8$ et que les triplets sont dégénérés. Dans la figure VI.3 (b) nous illustrons les poids des états lorsque le système est à demi aimantation par rapport à la valeur saturée. Nous constatons que l'aimantation du système est dominée par les triplets polarisés $|t_{+1}\rangle$ des dimères verticaux qui représente plus de 90% du poids total d'un dimère vertical pour $J'/J \leq 0.6$ et plus de 84% pour $0.6 < J'/J \leq 0.8$. Les triplet polarisés $|t_{+1}\rangle$ des dimères horizontaux sont plutôt négligeable, surtout pour des faibles valeurs de J'/J : pour $J'/J < 0.6$ cet état représente moins de 10% du poids total d'un dimère horizontal.
Pour être complet, nous présentons également le comportement du système lors du processus d'aimantation que nous illustrons dans les figures VI.3 (c) pour $J'/J = 0.1$, (d) pour $J'/J = 0.8 < \left(J'/J\right)_c$ et (e) pour $J'/J = 0.85 > \left(J'/J\right)_c$. Les figures VI.3 (c) et (d) soulignent l'importance du singulet $|s\rangle$ et du triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ d'un dimère vertical pour des aimantations $m \leq \frac{1}{2}$: les singulets $|s\rangle$ se transforment en triplets polarisés $|t_{+1}\rangle$ si l'aimantation du système augmente. Pour des aimantations $m > \frac{1}{2}$, les dimères horizontaux deviennent importants et des triplets polarisés $|t_{+1}\rangle$ se forment sur ces dimères. Enfin, la figure VI.3 (e) montre la limite de notre approche puisque pour $J'/J = 0.85 > \left(J'/J\right)_c$, c'est-à-dire directement au-dessus de la transition de phase, la physique du processus change de manière importante, surtout pour des faibles aimantations $m \leq \frac{1}{4}$.
Ces résultats, ensemble avec les considérations de Schulenburg et Richter [47], sont une très bonne justification du choix de notre base de CORE, qui est formée par le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ d'un dimère. Cette approche nous permet de calculer un modèle effectif qui a la géométrie d'une chaîne avec des sites inéquivalents alternants où une sorte de sites effectifs correspond à

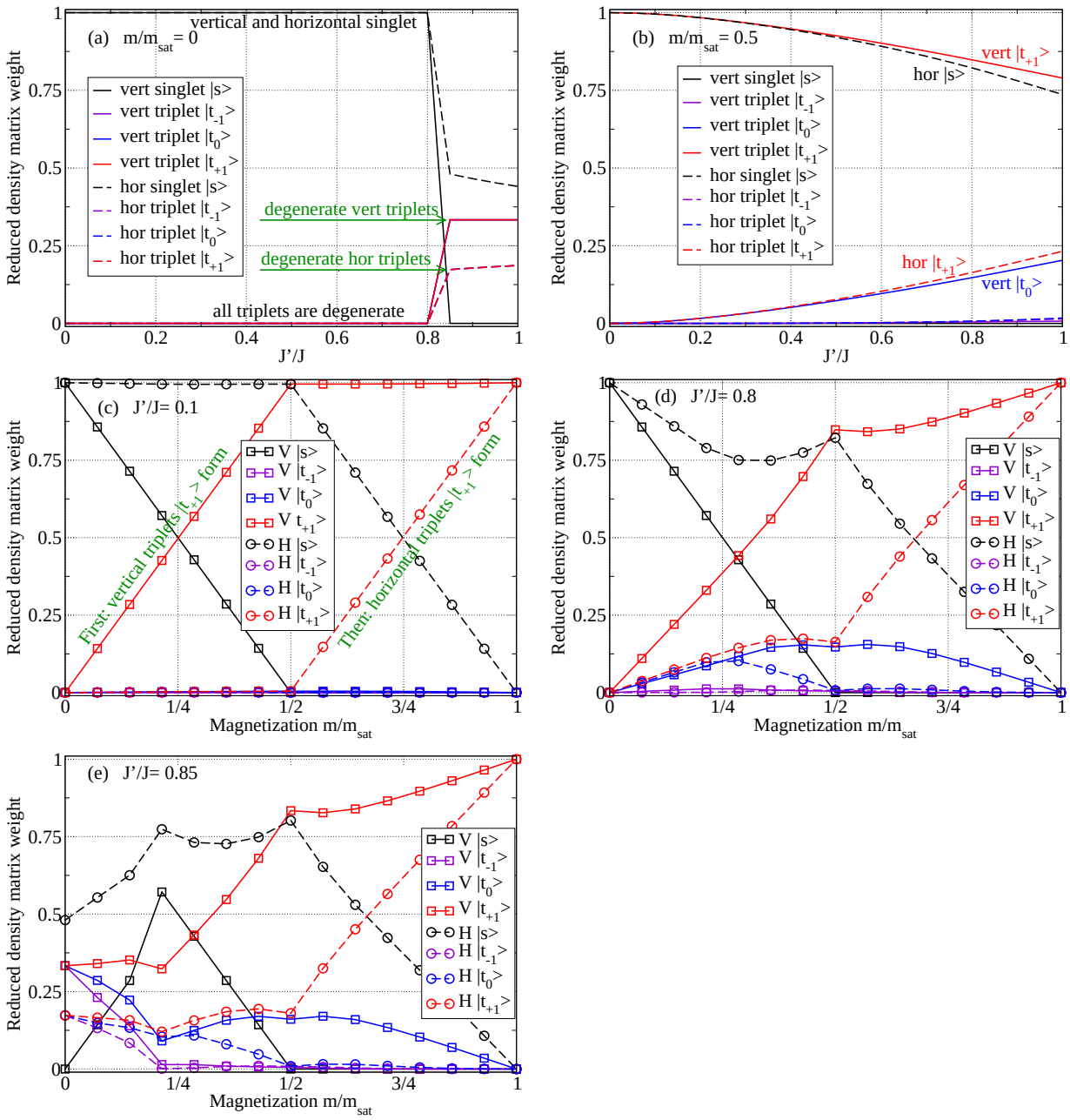


FIG. VI.3: Poids de la matrice densité réduite des états sur les dimères verticaux et horizontaux en fonction des couplages J'/J pour (a) $m = 0$ et (b) $m = \frac{1}{2}$. Les figures (c) - (e) montrent ce poids en fonction de l'aimantation m pour (c) $J'/J = 0.1$, (d) $J'/J = 0.8$ directement en-dessous de la transition de phase et (e) $J'/J = 0.85$ directement au-dessus de la transition de phase qui a lieu pour $\left(J'/J\right)_c = 0.81900$ [188].

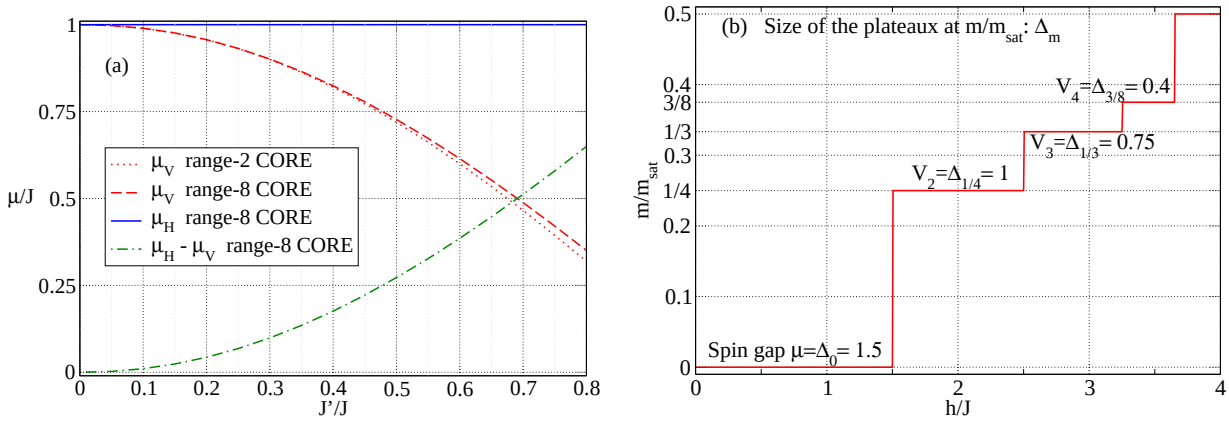


FIG. VI.4: (a) Potentiel chimique des dimères verticaux et horizontaux, calculés avec l'approche de CORE à portée 2 et 8. (b) Courbe d'aimantation du modèle classique de l'équation (VI.3). Δ_m indique la taille du plateau d'aimantation m, exprimée par rapport à la chaîne complète qui inclut les deux sous-réseaux des dimères verticaux et horizontaux.

un dimère vertical et l'autre à un dimère horizontal. On peut ensuite formuler un modèle $t-V$ de bosons de cœur dur en identifiant un singulet $|s\rangle$ sur un dimère comme un site vide et triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ comme un site occupé par une particule (cf. le tableau II.1). Dans la figure VI.4 (a), nous illustrons le potentiel chimique μ pour les dimères verticaux et horizontaux que nous calculons avec notre approche aux portées 2 jusqu'à 8. En accord avec les considérations du poids de la matrice densité réduite et celles de Schulenburg et Richter [47], nous constatons pour des valeurs finies de J'/J que le potentiel chimique μ des dimères horizontaux est plus élevé que celui des dimères verticaux. Par conséquent, lorsque l'aimantation du système augmente de $m=0$ à $m=\frac{1}{2}$, les singulets des dimères verticaux sont remplacés par des triplets polarisés et la configuration des dimères horizontaux ne change pas. Puisque nous nous intéressons au processus d'aimantation jusqu'à demi saturation, ceci nous indique que les dimères horizontaux peuvent être négligés. Afin de construire un modèle effectif simple, *nous ne considérons que le sous-réseau des dimères verticaux en négligeant complètement le sous-réseau des dimères horizontaux*. En outre, nos résultats de CORE indiquent l'existence de termes de saut corrélé comme seuls termes hors-diagonaux. Lors d'un tel processus, une particule saute d'un dimère horizontal à un autre dimère horizontal en présence d'une particule sur un dimère vertical qui se trouve au milieu des deux dimères horizontaux. Pour des aimantations $m \leq \frac{1}{2}$, ces processus ne jouent donc aucun rôle et nous obtenons un modèle effectif de bosons de cœur dur *purement classique*. Il contient le potentiel chimique d'un dimère vertical μ, et des interactions V_n entre n particules qui occupent des dimères verticaux consécutifs :

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_i \mu n_i + V_2(n_i n_{i+1}) + V_3(n_i n_{i+1} n_{i+2}) + V_4(n_i n_{i+1} n_{i+2} n_{i+3}) + \cdots . \qquad \text{(VI.3)}$$

La courbe d'aimantation de ce modèle est montrée dans la figure VI.4 (b) pour des valeurs arbitraires : le potentiel chimique $\mu = 1.5$ détermine la taille du gap de spin, l'interaction entre deux particules voisines $V_2 = 1$ indique la taille du plateau $m = \frac{1}{4}$ par rapport à la chaîne complète qui inclut les deux sous-réseaux des dimères verticaux et horizontaux. Le sous-réseau de dimères verticaux est demi-rempli avec une alternance de sites vides et sites occupés par des particules qui se repoussent avec l'interaction V_2. Ensuite l'interaction entre trois particules consécutives $V_3 = 0.75$ indique la taille du plateau $m = \frac{1}{3}$ avec un sous-réseau de dimères verticaux qui est rempli à deux tiers : des fragments de $k = 2$ particules voisines se forment, séparés par des sites vides. Enfin, le plateau $m = \frac{3}{8}$ apparaît dû à l'interaction entre quatre particules consécutifs $V_4 = 0.4$. Ici, des fragments de $k = 3$ particules consécutifs se forment, etc.
Le modèle effectif de l'équation (VI.3) que nous trouvons avec notre approche de CORE reproduit donc la série infinie de plateaux d'aimantation de Schulenburg et Richter [47]. Afin d'obtenir la série infinie, des interactions avec de plus en plus de particules sont nécessaires : nous notons que les interactions V_n sont équivalentes aux tailles des plateaux $m = \frac{k}{2k+2}$ avec des fragments de $k = n - 1$ particules consécutifs sur les dimères verticaux.

Comparons dans ce qui suit nos résultats numériques de CORE avec la théorie des perturbations au deuxième ordre qui nous permet de calculer le potentiel chimique μ et l'interaction V_2 selon :

$$\mu = \frac{1}{2}\big(3 - \sqrt{1 + 4(J'/J)^2}\big) \qquad \text{et} \qquad V_2 = -1 + \sqrt{1 + (J'/J)^2}. \tag{VI.4}$$

La figure VI.5 (a) montre la comparaison et indique que la théorie des perturbations est en bon accord avec les résultats de CORE pour des couplages $J'/J \leq 0.2$. Pour des plus grandes valeurs de J'/J les résultats s'écartent. Dans la figure VI.5 (b), nous illustrons l'évolution du potentiel chimique μ et des interaction V_2, V_3 et V_4 avec la portée de notre approche que nous calculons pour $J'/J = 0.8$. L'interaction V_n entre n particules sur n dimères verticaux consécutifs est accessible pour des approches de CORE qui est basée sur une chaîne avec au moins $2n-1$ dimères (verticaux et horizontaux). Nous remarquons que la portée la plus petite afin de calculer l'une des interactions donne déjà une bonne estimation de la valeur convergée et que le calcul de l'interaction V_n est exact pour CORE basée sur $2n + 1$ dimères. Enfin, dans la figure VI.5 (c), nous illustrons les interactions en fonction des couplages J'/J et nous utilisons les résultats de l'approche de CORE à plus longue portée, à savoir portée 8. On note que le potentiel chimique et l'interaction à courte distance dominent.
Nous rappelons que les interactions V_n sont équivalentes aux tailles des plateaux $m = \frac{k}{2k+2}$ avec des fragments de $k = n - 1$ particules consécutifs sur les dimères verticaux. En outre, l'approche CORE afin de calculer l'interaction V_n doit être à portée $2n - 1$ ou plus. Ces considérations sont confirmées dans la figure VI.6 qui montre les résultats de la diagonalisation exacte de notre modèle effectif à différentes portées pour une chaîne de 24 sites effectifs, comparés avec les résultats du DMRG pour 48 dimères. Nous notons que CORE à portée 2 donne déjà une bonne estimation du gap de spin, mais puisque cette approche ne peut pas accéder à l'interaction V_2, le plateau $m = \frac{1}{4}$

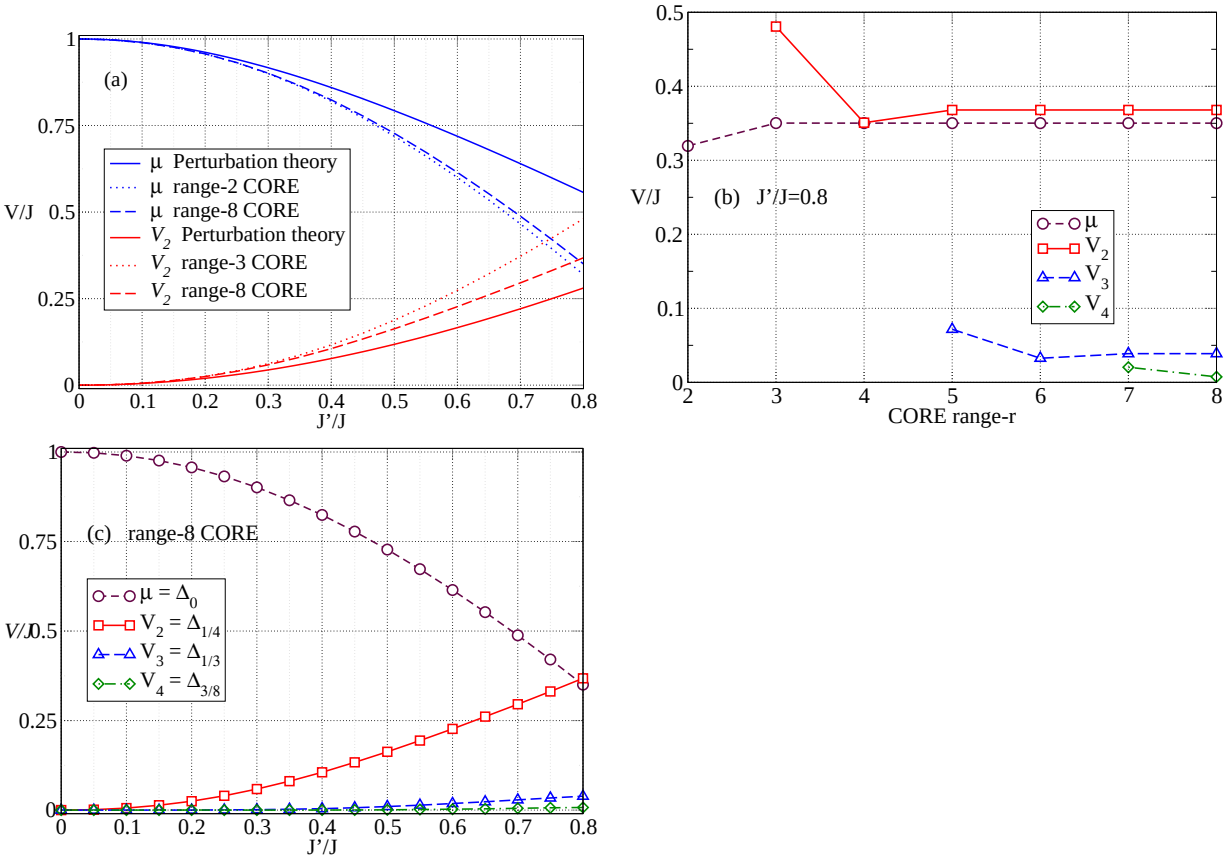


FIG. VI.5: (a) Potentiel chimique μ et interaction V_2, calculés avec la théorie des perturbations de l'équation (VI.4) et des approches de CORE. (b) Évolution de μ et les interactions V_n en fonction de la portée de l'approche de CORE. (c) μ et les interactions V_n en fonction des couplages J'/J, calculés avec CORE à portée 8.

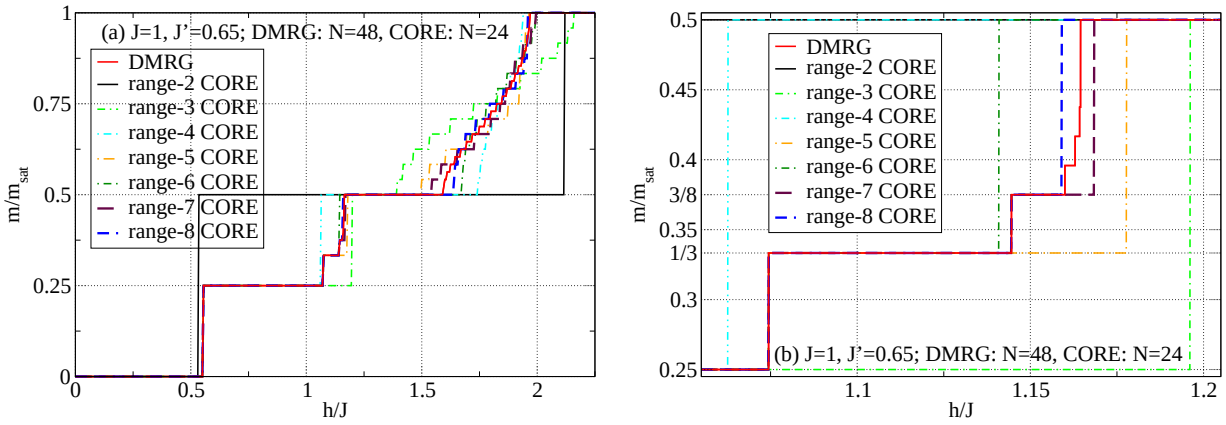


FIG. VI.6: Courbe d'aimantation de la chaîne de dimères orthogonaux pour $J'/J = 0.65$, calculée avec le DMRG de 48 dimères et la diagonalisation exacte de notre modèle effectif à différentes portée pour 24 sites effectifs. La figure (b) montre un extrait de la figure (a) pour $\frac{1}{4} \leq m \leq \frac{1}{2}$.

reste inaccessible. La première approche qui puisse reproduire ce plateau est celle à portée 3 en raison de la possibilité de calculer V_2. La portée 4 corrige ensuite la taille du plateau $m = \frac{1}{4}$, mais ne rend pas accessible de plateaux supplémentaire. Le prochain plateau $m = \frac{1}{3}$ est reproduit pour la première fois par CORE à portée 5 grâce au calcul de l'interaction V_3 et ensuite la portée 6 corrige la taille de ce plateau. Enfin, nous atteignons le dernier plateau de la série infinie de l'équation (VI.2) qui soit encore accessible avec notre approche de CORE : la portée 7 permet de calculer l'interaction V_4 et nous observons le plateau $m = \frac{3}{8}$. La portée 8 corrige la taille de ce plateau.

Nous remarquons que nous pourrions calculer des plateaux supplémentaires de la série infinie en augmentant la portée de CORE, mais nous nous limitons à portée 8 en raison de limitations numériques et puisque notre approche nous a déjà permis de comprendre la physique du processus d'aimantation du système.

3 Conclusion partielle

La chaîne de dimères orthogonaux sous champ magnétique est un exemple intéressant d'une application de la méthode CORE. Pour des aimantations $m \leq \frac{1}{2}$, nous trouvons un modèle effectif *classique* en fondant notre approche sur la base la plus simple, à savoir un singulet et le triplet polarisé d'un dimère. Le processus d'aimantation est très bien capturé par cette approche, comme illustrent nos résultats de matrice densité réduite. En variant la portée du modèle effectif CORE, nous pouvons calculer des interactions à plus longue distance entre triplets sur des dimères verticaux consécutifs. Nous sommes donc capables de trouver les premiers plateaux d'une série infinie

de plateaux pour des aimantations $\frac{1}{4} \leq m \leq \frac{1}{2}$.
Ces résultats servent également à préparer la discussion du réseau de Shastry-Sutherland sous champ magnétique que nous abordons dans le chapitre suivant. Ce réseau étant la généralisation bidimensionnelle de la chaîne de dimères orthogonaux, nous allons voir que la physique des deux systèmes est pourtant très différente.

Chapitre VII

Le réseau de Shastry-Sutherland sous champ magnétique

Dans ce chapitre nous discutons en détail le réseau de Shastry-Sutherland et sa réalisation dans le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ sous champ magnétique [77]. Dans notre étude du réseau de Shastry-Sutherland avec la méthode CORE, nous avons comme but de trouver un modèle effectif qui soit capable d'expliquer dans une approche microscopique les plateaux d'aimantation que l'on observe pour le composé $SrCu_2(BO_3)_2$. Nous rappelons que les résultats expérimentaux ainsi que la structure atomique de ce composé formé de dimères couplés sont illustrés dans la section 2.2 du chapitre I.

Ce chapitre est structuré comme suit : nous présentons dans la section 1 les différentes approches théoriques pour ce modèle qui sont en majorité des méthodes perturbatives et qui visent également à dériver un modèle effectif. Dans la section 2, nous détaillons le modèle effectif que nous trouvons avec l'approche de CORE à différentes portées et pour des différents couplages. Nous discutons également la validité de notre approche et comparons nos résultats aux résultats perturbatifs. La section 3 est consacrée à des résultats de diagonalisation exacte (cf. la section III.1) du modèle microscopique ou du modèle effectif de CORE à différentes portées. En comparant les courbes d'aimantation correspondantes, nous trouvons que l'approche de CORE à portée 9 est très fiable. Pour cette approche, nous analysons les tailles et les positions exactes de différents plateaux en fonction du couplage en comparant avec les résultats exacts et considérons la stabilité des plateaux dans la limite thermodynamique. En plus, nous étudions la structure des plateaux $m = \frac{1}{4}$ et $\frac{1}{3}$ en calculant pour ces deux exemples la corrélation statique particule-particule avec notre modèle effectif. Ce chapitre est enfin clôturé avec les conclusions partielles présentées dans la section 4.

Les résultats les plus importants de notre étude du réseau de Shastry-Sutherland sous champ magnétique se trouvent également dans notre article : Abendschein et Capponi [91].

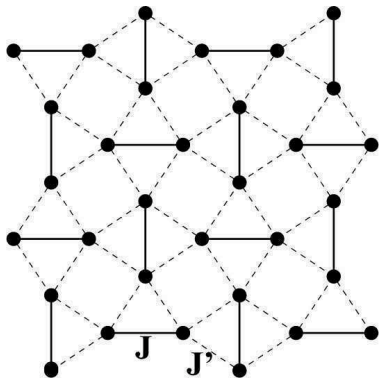


FIG. VII.1: Le réseau de Shastry-Sutherland avec le couplage J sur un dimère, et J' entre les dimères.

1 Le modèle microscopique et des résultats théoriques pour le composé $SrCu_2(BO_3)_2$

Le réseau de Shastry-Sutherland [75, 76] décrit un système bidimensionnel, caractérisé par des spin-$\frac{1}{2}$ couplés antiferromagnétiquement qui forment des dimères couplés. Le hamiltonien sous champ magnétique h est défini comme suit :

$$\mathcal{H} = J \sum_{<i,j>} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J' \sum_{\ll i,j \gg} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - h \sum_i S_i^z. \tag{VII.1}$$

Comme illustré dans la figure VII.1, les spins $\mathbf{S}_i$ sur les sites i ont une interaction J avec leurs plus proches voisins et une interaction frustrante J' avec leurs deuxièmes voisins.

Considérons d'abord les deux cas limites suivants du réseau de Shastry-Sutherland de l'équation (VII.1) en supposant $J = 1$: premièrement pour des grandes valeurs négatives du couplage J', l'état fondamental est ferromagnétique et complètement polarisé. Et deuxièmement pour des grandes valeurs positives de J', l'état fondamental correspond à l'état fondamental de Néel du modèle de Heisenberg bidimensionnel de spin-1 qui est ordonné [190] et dont différentes quantités, comme l'énergie de l'état fondamental et des susceptibilités, sont connues [191]. Entre ces cas limites et pour des couplages J et J' antiferromagnétiques, se trouve la phase dimérisée de singulets du réseau de Shastry-Sutherland que nous abordons dans ce qui suit.

Si tous les dimères formés par les liens J sont occupés par des singulets, le système est dans un état propre exact, qui est en plus l'état fondamental pour des valeurs $J'/J \lesssim 0.7$ [192, 193]. En outre, pour des valeurs $J'/J \lesssim 0.7$, le système se trouve dans une phase gappée. En revanche, pour $J'/J \gtrsim 0.7$, on observe un ordre antiferromagnétique de Néel à longue distance et le système est non gappé [193]. Entre ces deux phases, des phases supplémentaires [194–197] pourraient exister, comme une phase de singulets de plaquettes, par exemple.

Comme déjà discuté dans la section I.2.2, le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ correspond au réseau de

Shastry-Sutherland et on observe un rapport des couplages dominants $J'/J \approx 0.65$ [136, 137]. En outre, on trouve un faible couplage entre les couches bidimensionnelles [78] ainsi qu'une faible interaction du type Dzyaloshinskii-Moriya [30, 85, 86] et nous notons que ces deux couplages ne sont pas capturés notre modèle. Nous illustrons l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya, qui brise la symétrie SU(2), dans la figure I.13 et nous notons que cette interaction est plutôt petite par rapport aux couplages J et J'. Néanmoins, elle peut jouer un rôle important pour des faibles aimantations $m \leq \frac{1}{8}$, comme le discutent Levy *et al.* [83]. En raison de leurs relativement petites amplitudes, nous négligeons le couplage entre les couches bidimensionnelles ainsi que l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya et nous décrivons le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ par le réseau de Shastry-Sutherland avec $J'/J \approx 0.65$. Par conséquent, le système se trouve au-dessous, mais près du point de transition de phase $(J'/J)_{crit} \approx 0.7$ [192, 193] et on observe un état fondamental de singulets de dimères avec un gap de spin $\Delta_s = 30K$ [78]. Le grand intérêt que ce composé a suscité dans les dix dernières années est expliqué par le comportement sous champ magnétique, à savoir les plateaux d'aimantation pour $m = \frac{1}{4}$ et $m = \frac{1}{8}$ [78] ainsi que $m = \frac{1}{3}$ [79] (cf. la figure I.11). Du côté expérimental, il y a des indications récentes [82] de plateaux supplémentaires pour $m = \frac{1}{q}$ avec $4 \leq q \leq 9$ ainsi que pour $m = \frac{2}{9}$, comme illustré dans la figure I.12. Ces expériences demandent une confirmation et théorique et expérimentale, comme elles sont contestées expérimentalement [83].
Différentes approches théoriques ont donc été entreprises afin d'expliquer le processus d'aimantation de $SrCu_2(BO_3)_2$ à l'échelle microscopique. Une bonne description de la physique de basse énergie consiste dans un modèle effectif qui est basé sur deux états d'un dimère, à savoir sur un singulet $|s\rangle$ et un triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$. Comme discuté dans la section 1 du chapitre II, on peut ensuite utiliser un modèle effectif dans lequel un singulet correspond à un site vide et un triplet polarisé à un site occupé par un boson de cœur dur, c'est-à-dire une particule [38, 109, 110].

Dans le contexte de la discussion du réseau de Shastry-Sutherland, nous remarquons deux études théoriques récentes : Premièrement, pour spin-$\frac{1}{2}$, Meng et Wessel [198] étudient le réseau de Shastry-Sutherland avec un couplage transverse ferromagnétique sous champ magnétique. Il s'agit donc d'un modèle XXZ (cf. l'équation (II.5) dans la section 1 du chapitre II) qui, en absence du couplage transverse, se réduit en modèle antiferromagnétique d'Ising avec un ordre de Néel. Pour un couplage transverse ferromagnétique fini, on observe une phase de dimères qui est séparée de la phase de Néel ordonnée par une phase superfluide. Dans le régime quantique, ils trouvent un plateau $m = \frac{1}{2}$ ainsi qu'un plateau $m = \frac{1}{3}$ qui persiste dans la limite Ising.
Et deuxièmement, comme le discutent Moliner *et al.* [98], le réseau de Shastry-Sutherland classique pour spin $S \to \infty$ montre un quasi-plateau $m = \frac{1}{3}$ à basse température T$\neq$0 et pour un rapport des couplages $J'/J = 0.5$. Pour $T = 0$, ce plateau n'est pas stable en raison de la compétition de différentes configurations de même énergie, tandis que pour basse température finie et $J'/J = 0.5$, la configuration colinéaire UUD de spins résulte dans un plateau $m = \frac{1}{3}$. Cette configuration est sélectionnée en raison de considérations d'entropie et consiste de deux spin $\uparrow$ (U)

et un spin $\downarrow$ (D) sur chaque triangle du réseau. Pour des couplages $J'/J = 0.5 \pm \varepsilon$ (où ε est un petit nombre), on observe également un plateau $m = \frac{1}{3}$ avec une configuration de spins de type « parapluie » (« umbrella » en anglais) pour basse température (T$\neq$0) et la configuration UUD pour des températures intermédiaires.

1.1 La théorie des perturbations jusqu'au quatrième ordre

En appliquant la théorie des perturbations, on peut dériver un modèle effectif qui contient différents termes, comme les opérateurs de création $b_i^\dagger$ (d'annihilation b_i) de particules où le nombre de particules est donné par $n_i = b_i^\dagger b_i$. Si les dimères verticaux (horizontaux) du réseau de Shastry-Sutherland constituent le sous-réseau A (B), le site $i \in A$ est un dimère vertical et l'index $i + e_x$ ($i + e_y$) indique le dimère voisin horizontal à droite (au-dessus) de celui-ci. Par exemple, au deuxième ordre de perturbations [110], on trouve le hamiltonien suivant :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \left(J - h - \frac{J'^2}{J}\right)\sum_i n_i + \left(\frac{J'}{2} + \frac{J'^2}{2J}\right)\sum_{\langle i,j\rangle} n_i n_j + \\
&+ \frac{J'^2}{4J}\sum_{i\in A}\Big[[b_i^\dagger(b_{i+e_y} - b_{i-e_y}) + h.c.](n_{i-e_x} - n_{i-e_x}) + \\
&+ 2n_{i+e_x}(1-n_i)n_{i-e_x} + (b_{i+e_y}^\dagger b_{i-e_y} + h.c.)n_i\Big] + \frac{J'^2}{4J}\sum_{i\in B}\Big[e_y \leftrightarrow e_x\Big].
\end{aligned} \tag{VII.2}$$

Avec la théorie des perturbations au deuxième ordre et à des ordres plus élevés, on peut dériver des quantités comme des interactions entre deux particules à différentes distances ainsi que des termes de saut de particules, comme illustré schématiquement dans la figure VII.2. Au quatrième ordre [192], on trouve pour le potentiel chimique μ, qui correspond au gap de spin :

$$\frac{\mu}{J} = 1 - \left(\frac{J'}{J}\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{J'}{J}\right)^3 - \frac{1}{8}\left(\frac{J'}{J}\right)^4, \tag{VII.3}$$

ce qui indique que le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ est gappé puisque $\mu > 0$ pour des couplages $J'/J \lesssim 0.8$ selon cette équation. Pour les interactions entre deux particules, définies dans la figure VII.2 (a), on trouve au troisième ordre [110, 199, 200] :

$$\begin{aligned}
\frac{V_1}{J} &= \frac{1}{2}\frac{J'}{J} + \frac{1}{2}\left(\frac{J'}{J}\right)^2 - \frac{1}{8}\left(\frac{J'}{J}\right)^3, \\
\frac{V_2}{J} &= \frac{1}{4}\left(\frac{J'}{J}\right)^3, \\
\frac{V_3}{J} &= \frac{1}{2}\left(\frac{J'}{J}\right)^2 + \frac{3}{4}\left(\frac{J'}{J}\right)^3 \qquad \text{et} \qquad \frac{V_3'}{J} = 0.
\end{aligned} \tag{VII.4}$$

Notons que l'interaction V_1 entre les plus proches voisins est l'interaction la plus importante. Ensemble avec l'interaction entre troisièmes voisins V_3, V_1 domine les autres interactions pour des

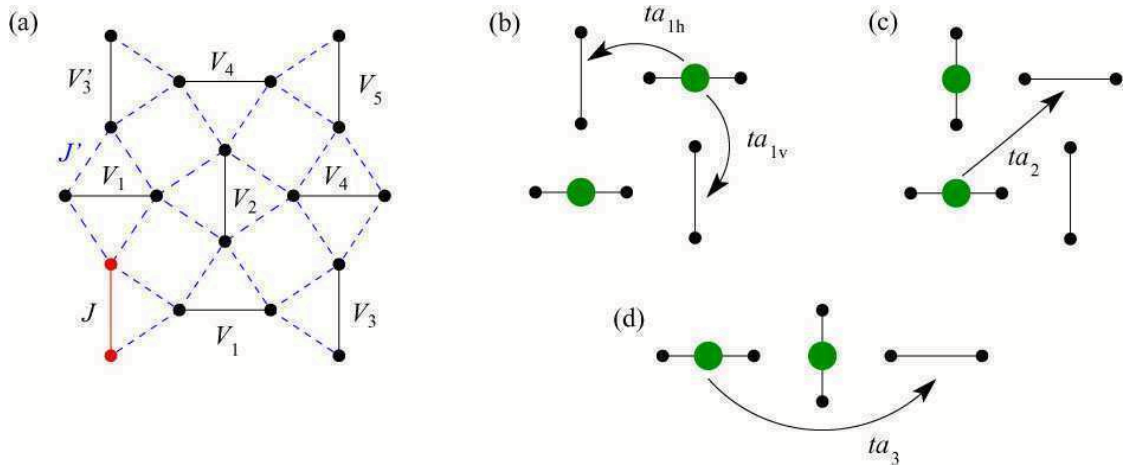


FIG. VII.2: Le réseau de Shastry-Sutherland et des définitions d'interactions effectives et de sauts effectifs : (a) interaction à deux corps entre une particule sur le dimère rouge et une particule sur l'un des dimères indiqués, (b)-(d) des processus de saut corrélé.

couplages $J'/J \lesssim 0.7$ et en conséquence aussi pour le composé $SrCu_2(BO_3)_2$. Le fait que l'interaction entre troisièmes voisins V_3' soit nulle en perturbation au troisième ordre montre que la géométrie des interactions est cruciale dans le réseau de Shastry-Sutherland.
Enfin, la théorie de perturbations au troisième ordre [110, 200] indique l'absence de termes de saut d'une seule particule isolée. Pour de tels termes de saut, on trouve une contribution au sixième ordre [192], qui est en conséquence très petite. Ceci résulte dans une excitation d'un triplet presque localisée ce qui est confirmé dans les expériences avec le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ [192, 201]. En revanche, des termes de saut corrélé, illustrés dans les figures VII.2 (b) - (d), peuvent être importants. Ce sont des processus d'un saut d'une particule sur un dimère voisin en présence d'une deuxième particule (voire plusieurs particules) dans le voisinage qui peuvent favoriser une phase supersolide [123]. Au troisième ordre [110, 200], on dérive les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{ta_{1v}}{J} &= 0 = \frac{ta_2}{J} \qquad \text{et} \qquad \frac{ta_{1h}}{J} = \frac{1}{4}\left(\frac{J'}{J}\right)^2 + \frac{5}{16}\left(\frac{J'}{J}\right)^3, \\ \text{où} \qquad \frac{ta'_{1h}}{J} &= \frac{ta_{1h}}{J} \times (-1)^{\#\text{réflexions}} \times (-1)^{\#\text{rotations}}, \\ \frac{ta_3}{J} &= \frac{1}{4}\left(\frac{J'}{J}\right)^2 + \frac{3}{8}\left(\frac{J'}{J}\right)^3. \end{aligned} \tag{VII.5}$$

On voit que le processus dominant est décrit par le terme ta_3 et qu'il est important de noter la différence entre les deux termes de saut corrélé au plus proche dimère ta_{1v} et ta_{1h} qui est due à leur géométrie différente. Tandis que ta_{1h} est un terme important, ta_{1v} est nul et de façon équivalente, tous les processus dérivés de ta_{1v} par une rotation de $90°$ ou par une réflexion verticale ou horizontale sont nuls.
L'absence d'un terme de saut d'un triplet isolé a pour conséquence que la physique des plateaux

d'aimantation est dominée par les interactions entre les triplets qui sont des particules massives. Pour les plateaux, on s'attend à une cristallisation de triplets qui forment des cristaux de Wigner [38, 110, 200, 202, 203], ce qui est à l'origine des plateaux.

1.2 Des approches théoriques alternatives

D'autres approches ont essayé d'améliorer la compréhension du processus d'aimantation du composé $SrCu_2(BO_3)_2$, et parmi celles-ci, on compte l'étude d'un réseau de Shastry-Sutherland généralisé [203] avec un couplage supplémentaire au troisième voisin. Une autre approche vise à transformer le modèle initial en problème de bosons de cœur dur qui est ensuite transformé en système de fermions sans spin, couplés à un champ de jauge de Chern-Simons [107, 108]. Comme discuté dans la section 4 du chapitre II, elle dérive le spectre de Hofstadter [141], où des sauts de l'énergie de Fermi se traduisent en plateaux d'aimantation. De cette façon, on trouve des plateaux pour $m = \frac{1}{4}$, $\frac{1}{3}$ et $\frac{1}{2}$, en revanche, on n'observe pas de plateaux au-dessus du plateau $m = \frac{1}{2}$ ou au-dessous du plateau $m = \frac{1}{4}$. Rappelons que Sebastian *et al.* [82] ont aussi mesuré des plateaux pour $m < \frac{1}{4}$ dans le composé $SrCu_2(BO_3)_2$. Afin d'expliquer une série de plateaux, mesurée pour $m = \frac{1}{q}$ avec $4 \leq q \leq 9$ ainsi que pour $m = \frac{2}{9}$, ils effectuent un calcul analogue à celui de Misguich *et al.* [107, 108] et trouvent un spectre de Hofstadter. Comme ils expliquent, ce spectre théorique inclut de nombreux plateaux à faible aimantation qui sont observés dans leurs expériences.
Les expériences récentes de Sebastian *et al.* [82], mais aussi l'absence d'une bonne compréhension théorique du processus d'aimantation dans le réseau de Shastry-Sutherland et le composé $SrCu_2(BO_3)_2$ en particulier, ont suscité deux approches récentes qui utilisent l'interprétation des triplets polarisés comme bosons de cœur dur. La première méthode est celle de Dorier *et al.* [90] qui consiste en transformations perturbatives, continues et unitaires (PCUTs) qui sont combinées avec une analyse du modèle effectif de bosons de cœur dur. La deuxième est la méthode CORE qui nous sert également à dériver un modèle effectif de bosons de cœur dur qui est ensuite diagonalisé sur des réseaux effectifs de taille finie [91] en utilisant la diagonalisation exacte, discutée dans la section III.1. Avant de discuter notre approche en détail et avant de comparer les résultats des deux méthodes dans les sections suivantes de ce chapitre, considérons dans ce qui suit l'approche de PCUTs de Dorier *et al.*.
À partir du réseau de Shastry-Sutherland, la méthode de transformations perturbatives, continues et unitaires (PCUTs) [204] dérive un modèle effectif qui conserve le nombre de triplets élémentaires [205]. Ensuite, l'interprétation des triplets polarisés comme des bosons de cœur dur est appliquée. Ceci est justifié puisque la physique sous champ magnétique est bien décrite par des processus qui ont un spin total maximal et une composante S_z maximal. En conséquence, la forme générale du hamiltonien effectif que l'on dérive avec PCUTs est définie par :

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{n=2,4,6,\cdots} \sum_{r_1,\cdots,r_n} C_{r_1,\cdots,r_n} b^\dagger_{r_1} \cdots b^\dagger_{r_{n/2}} b_{r_{n/2+1}} \cdots b_{r_n}, \tag{VII.6}$$

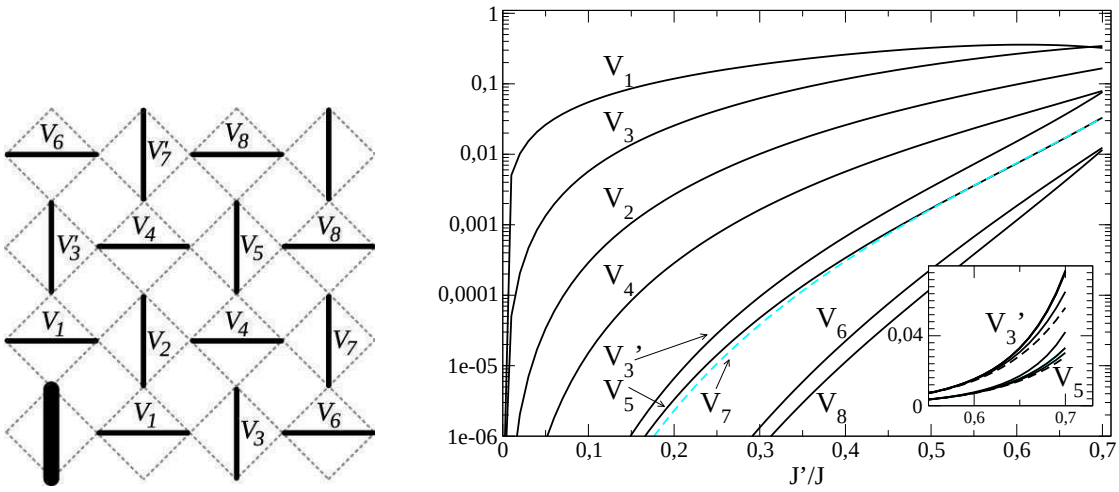


FIG. VII.3: À gauche : le réseau de Shastry-Sutherland et des définitions d'interactions effectives à deux corps entre une particule sur le dimère épais et une particule sur l'un des dimères indiqués. (par rapport à figure VII.2 des interactions à plus longue distance sont inclues). À droite : les coefficients correspondants en fonction du rapport des couplages J'/J. D'après Dorier *et al.* [90].

où les r_i indiquent les sites du réseau carré effectif, formé par les dimères avec le couplage J. Les $b_r^\dagger$ (b_r) indiquent les opérateurs des bosons de cœur dur qui créent (annihilent) un triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ sur le site r et les coefficients $C_{r_1,r_2,\cdots,r_n}$ décrivent l'amplitude des différents processus, par exemple l'interaction à deux corps qui est illustrée dans la figure VII.3. Enfin, l'équation (VII.6) inclut également des interactions à plusieurs particules ainsi que des termes de saut et des termes de saut corrélé qui favorisent une phase supersolide [123]. La figure VII.4, à gauche, montre les processus les plus importants de chaque type pour $J'/J = 0.5$. On voit que les interactions à deux corps sont dominantes pour des faibles densités de particules et parmi celles-ci, les interactions à courte distance sont plus importantes que celles à plus longue distance. En outre, puisque les termes de saut d'une seule particule sont négligeables, on s'attend à une courbe d'aimantation qui consiste de plateaux, séparés par des sauts d'aimantation ou des phases intermédiaires étroites.
Dans ce procédé, afin de décrire l'interaction à deux corps, tous les termes qui apparaissent pour la première fois à ordre 10 ou moins sont considérés (ordre 8 pour des termes avec trois opérateurs de création et d'annihilation ou des termes d'interaction à quatre corps). Les coefficients $C_{r_1,r_2,\cdots,r_n}$ sont calculés au $15^{\text{ième}}$ ordre pour les interactions à deux corps et à $12^{\text{ième}}$ ordre pour celles à plusieurs corps ce qui résulte dans un hamiltonien qui contient environ 15000 processus.
Puisque ce hamiltonien contient des termes hors-diagonaux positifs et négatifs, la méthode du Quantum Monte Carlo (QMC) n'est pas applicable. Afin de déduire le diagramme de phase du hamiltonien, la représentation de Matsubara-Matsuda [109] est appliquée aux bosons de cœur dur qui sont ensuite traités comme des spins-$\frac{1}{2}$. Avec une approximation classique des spins-$\frac{1}{2}$, l'énergie est

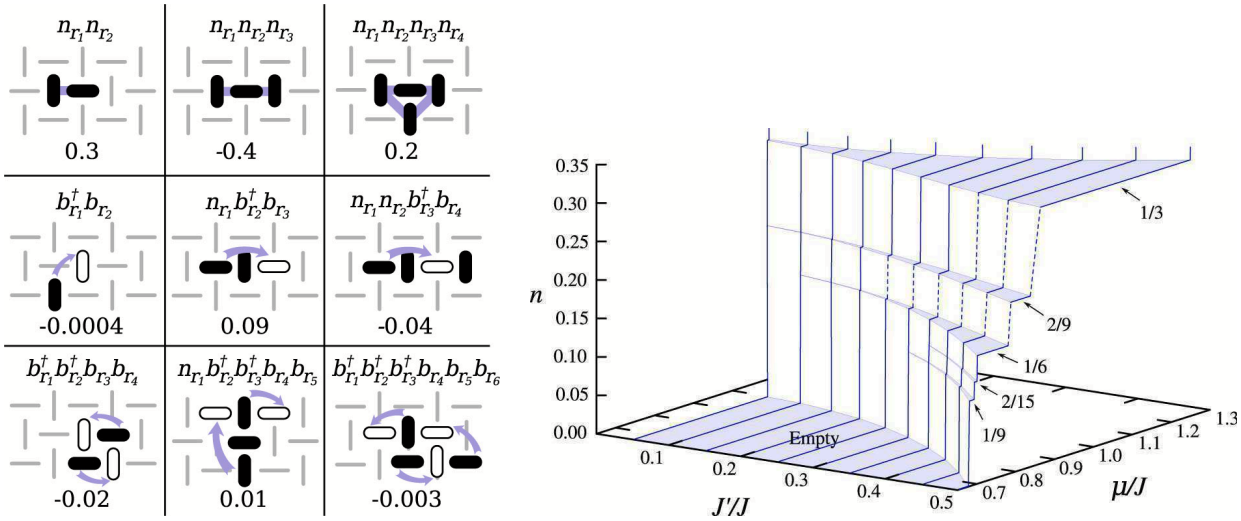


FIG. VII.4: À gauche : les processus dominants de chaque type pour $J'/J = 0.5$ selon Dorier*et al.* [90]. À droite : des plateaux d'aimantation convergés en fonction du potentiel chimique μ et de J'/J. La densité de bosons n est équivalente à l'aimantation m/m_{sat}, et μ correspond au champ magnétique h. D'après Dorier *et al.* [90].

minimisée pour différentes mailles élémentaires. Enfin, le diagramme de phase résultant est dérivé et nous le montrons dans la figure VII.4, à droite. On voit (outre le plateau pour $m = \frac{1}{2}$ qui n'est pas montré) que le plateau $m = \frac{1}{3}$ est déjà très grand pour des petits valeurs de J'/J, et on constate le fait remarquable de l'absence des plateaux $m = \frac{1}{4}$ et $m = \frac{1}{8}$. Dorier *et al.* [90] argumentent que l'absence de ces plateaux, qui sont pourtant observés dans les expériences [78, 79], pourrait être dû à des couplages supplémentaires dans le composé $SrCu_2(BO_3)_2$, par exemple des couplages du type Dzyaloshinskii-Moriya ou des interactions entre les couches bidimensionnelles ou bien des interactions à plus longue portée. En revanche, d'autres plateaux avec une faible aimantation font leur apparition progressivement avec J'/J : ce sont les plateaux $m = \frac{2}{9}$, $m = \frac{1}{6}$, $m = \frac{1}{9}$ et $m = \frac{2}{15}$. En considérant ces plateaux de faible aimantation avec $m < \frac{1}{3}$, on remarque que le plateau $m = \frac{1}{6}$ est plus grand que les autres plateaux pour $J'/J \gtrsim 0.4$. À l'exception du plateau $m = \frac{2}{15}$, dont on n'a pas considéré une maille élémentaire correspondante, ces plateaux sont aussi trouvés par Sebastian *et al.* [82] bien que le plateau $m = \frac{1}{5}$ de Sebastian *et al.* puisse être exclu selon Dorier *et al.*.

Discutons maintenant, dans le reste du chapitre, la méthode CORE appliquée au réseau de Shastry-Sutherland sous champ magnétique. Des comparaisons avec les résultats de Dorier *et al.* [90] sont faites puisque le modèle effectif et les courbes d'aimantation théoriques sont faciles à comparer.

2 L'approche de CORE à différentes portées

Comme dans les exemples d'application précédents, notre approche non-perturbative de la méthode de Contractor Renormalization (CORE, cf. la section 2 du chapitre III) au réseau de Shastry-Sutherland sous champ magnétique (cf. l'équation (VII.1)) est fondée sur des dimères, c'est-à-dire deux spins couplés par une interaction J. Nous dérivons un modèle effectif pour le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ et plus précisément, notre approche est basée sur le singulet $|s\rangle$ et ce triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ d'un dimère. Cette base est aussi utilisée dans la théorie des perturbations [90, 110, 192, 199, 200], discutée dans la section 1.1 ainsi que dans l'approche de Dorier *et al.* [90], discutée dans la section 1.2 de ce chapitre.

Puisque CORE développe un hamiltonien effectif $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ comme une série de contributions de blocs de différentes tailles, l'amplitude de processus locaux peut déjà être tirée de relativement petits blocs. Nous considérons des blocs jusqu'une taille de 3×3 dimères et pour le développement de la série, on a aussi besoin des blocs bidimensionnels de 2×2 et 3×2. Même s'il n'est pas requis pour la série, nous calculons aussi les contributions d'un bloc de 4×2 dimères ce qui nous donne des informations supplémentaires.

Notons que, numériquement, la taille maximale accessible d'un bloc de la série est de 3×3 dimères, soit 18 sites parce que ce bloc doit être diagonalisé exactement de façon numérique afin de trouver ses valeurs propres *et* ses vecteurs propres. Puisque le hamiltonien microscopique est diagonal par blocs de la composante du spin S_z en raison de sa symétrie SU(2), cette tâche est équivalente à la diagonalisation exacte d'une matrice creuse de 48620×48620 (=$18!/(9!9!)$) pour $S_z = 0$, et de 43758×43758 ($= 18!/(10!8!)$) pour $S_z = 1, \ldots$. Par contre, seulement une petite fraction (typiquement jusqu'à quelques centaines) d'états de basse énergie est cherchée. Dû à des états « fantômes », la diagonalisation exacte n'est pas effectuée avec le très performant algorithme de Lanczos (cf. la section III.1.1). On utilise plutôt les librairies d'algèbre linéaire BLAS/LAPACK pour des tailles de blocs moyennes ou bien l'algorithme de Davidson (cf. la section III.1.2) pour des grands blocs ce qui limite la taille maximale à 3×3 dimères.

Dans ce qui suit, nous allons aborder la validité de notre approche et ensuite discuter en grand détail l'évolution des processus avec la portée de notre approche. Ces résultats sont également comparés avec les résultats perturbatifs jusqu'au quatrième ordre [110, 192, 199, 200] ainsi qu'avec l'approche jusqu'au $15^{\text{ième}}$ ordre de Dorier *et al.* [90]. Ensuite, dans la section suivante, nous présentons et discutons des courbes d'aimantation qui ont été dérivées avec la diagonalisation exacte de notre modèle effectif que nous comparons avec les courbes correspondantes que l'on obtient à partir du modèle microscopique.

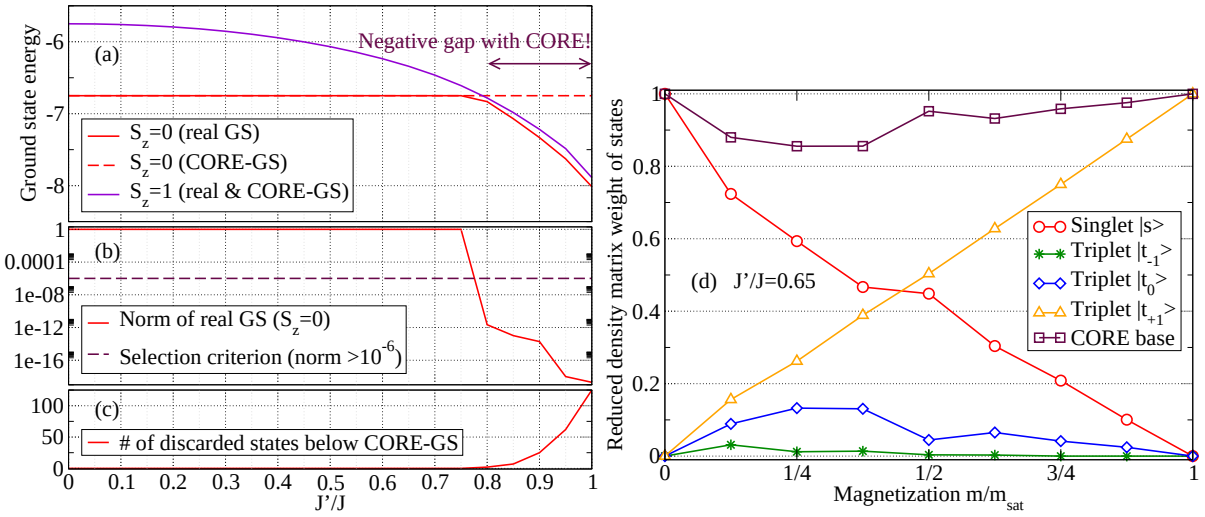


FIG. VII.5: (a) Les énergies du fondamental pour $S_z = 0$ et $S_z = 1$. L'état gardé par CORE pour $S_z = 0$ (ligne tiretée) est en désaccord avec les résultats exacts pour $J'/J \geq 0.8$. (b) Projection de l'état fondamental sur la base tensorielle de CORE pour $S_z = 0$. Jusqu'à $J'/J = 0.75$, sa projection est suffisante (critère : $> 10^{-6}$) et l'état fondamental est accepté. (c) Nombre d'états de basse énergie négligés avant que CORE accepte le premier état : p. ex. pour $J'/J = 0.8$, le troisième état de plus basse énergie est accepté. Résultats (a) - (c) sont calculés avec 3×3 dimères. (d) Poids de la matrice densité réduite pour les états d'un dimère, calculé avec 8 dimères pour $J'/J = 0.65$.

2.1 Sur la validité de notre approche de CORE

Dans les figures VII.5 (a) - (c), différentes quantités caractéristiques d'un bloc de 3×3 dimères sont montrées afin de faciliter la discussion de validité de notre approche de CORE, par exemple, dans (a) nous présentons les énergies des états fondamentaux dans les secteurs $S_z = 0$ et $S_z = 1$. On voit que notre approche de CORE à portée 9 garde pour toutes les valeurs de J'/J un état de singulets sur les 9 dimères avec une énergie de $E^{CORE}_{S_z=0} = 9 \times (-\frac{3}{4})J = -6.75J$ comme état fondamental. Ceci s'explique avec le choix de deux états gardés pour un dimère, à savoir le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$. Ce choix ne pose aucun problème pour des valeurs $J'/J < 0.8$ puisque pour 3×3 dimères, cet état est le vrai état fondamental et la projection de cet état sur la base tensorielle de CORE est très grande, comme le montre la figure VII.5 (b). La figure VII.5 (d) souligne la fiabilité de notre approche de CORE : elle montre les poids de la matrice densité réduite des quatre états d'un dimère, calculés avec la diagonalisation exacte selon l'équation (III.20) d'un réseau de Shastry-Sutherland de 8 dimères pour $J'/J = 0.65$. On voit que la base de CORE, le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ réunissent plus de 85% du poids total lors du processus d'aimantation et que la base de CORE représente par conséquent les états pertinents afin de capturer la physique du système. Pourtant, nous remarquons que le triplet $|t_0\rangle$ représente environ la

moitié du poids de la matrice densité réduite du triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$ pour des aimantations $m \leq \frac{1}{4}$ et que le triplet $|t_0\rangle$ peut s'avérer important dans la description de certains aspects du réseau de Shastry-Sutherland [88, 206]. Néanmoins, nous fondons notre approche sur le singulet $|s\rangle$ et le triplet polarisé $|t_{+1}\rangle$, qui constituent également la base de l'approche perturbative et permettent une interprétation dans le langage de bosons de cœur dur.

Quant aux poids de la matrice densité réduite pour des plus petites valeurs de J'/J, nous notons que la situation est similaire avec celle illustrée dans la figure VII.5 (d) pour $J'/J = 0.65$, mais devrait changer de façon importante pour des valeurs plus élevées. Comme le montre les figures VII.5 (a) et (b), pour $J'/J \geq 0.8$, l'état fondamental est différent avec une plus basse énergie et puisque sa projection sur la base tensorielle de CORE devient très petite, cet état est négligé dans le procédé de CORE. En conséquent, notre approche de CORE n'est pas capable de capturer ce changement de la physique et on obtient un gap négatif avec CORE. Cela montre que cette approche de CORE ne marche certainement pas pour $J'/J \geq 0.8$, et avec la connaissance du point de transition de phase $(J'/J)_{crit} \approx 0.7$[1] [192, 193], on peut conclure que l'approche de CORE à portée 9 n'est pas fiable pour des valeurs $J'/J \geq 0.7$, mais marche de manière fiable jusqu'à $J'/J \simeq 0.65$.

Comme déjà discuté dans la section 1 de ce chapitre, les interactions effectives à longue distance jouent un rôle important, et parmi les termes de saut corrélé, le saut au troisième voisin est le terme dominant. En conséquence, notre approche de CORE doit être fondée sur un bloc assez large afin d'être capable de reproduire des tels processus. Ceci est également indiqué par le calcul de l'annulation du gap de spin pour les différentes portées de CORE dans la section suivante et explique pourquoi notre approche de CORE à portée 4 (soit 2×2 dimères) ne peut pas marcher correctement et on a en conséquence besoin d'un grand bloc de 3×3 dimères afin de bien décrire le réseau de Shastry-Sutherland. Avec les portées intermédiaires 6 (3×2 dimères) et 8 (4×2 dimères), on peut aussi dériver des processus à plus longue distance, mais il faut pourtant être prudent avec les résultats correspondants puisque ce sont des blocs rectangulaires. Ils pourraient également refléter une physique entre une et deux dimensions puisqu'il s'agit d'une double chaîne de dimères orthogonaux et on note une similarité avec l'exemple des échelles de spin à deux ou plusieurs montants [48] qui s'impose.

La validité de notre approche à portée 9 (soit 3×3 dimères) est encore consolidée avec des résultats qui sont présentés dans les sections suivantes, par exemple la comparaison d'amplitudes des différents processus avec les résultats avec la théorie des perturbations, comme discuté dans la section 2.2. L'argument le plus fort est sans doute le très bon accord entre les résultats de la diagonalisation exacte de notre modèle effectif avec ceux du modèle microscopique, présenté dans la section 3.

[1] La différence entre les deux valeurs pour le point de transition de phase est due à la taille finie de notre bloc de 3×3 dimères.

2.2 Évolution d'amplitudes de processus avec la portée de CORE

Les différentes tailles de blocs, et donc les différentes portées de notre approche de CORE, permettent de retracer l'évolution des amplitudes des différents processus en fonction de la portée de l'approche de CORE. Ces processus incluent, par exemple, le potentiel chimique μ ou les interactions à deux ou trois corps à différentes distances, comme illustré dans les figures VII.2 (a) et VII.3. Cette évolution peut également être étudiée pour les termes de saut corrélé qui sont illustrés dans les mêmes figures. Par contre, en raison de leurs contributions négligeables, les termes de saut d'une seule particule isolée ne sont pas pris en considération dans cette discussion bien qu'ils soient calculés et inclus dans le hamiltonien effectif.

Comme toutes les autres quantités que nous étudions dans ce qui suit, le potentiel chimique μ[2], est calculé avec une approche de CORE à portée 4 (c'est-à-dire un bloc de 2×2 dimères), à portée 6 (3×2 dimères), à portée 8 (4×2 dimères) et à portée 9 (3×3 dimères). Les résultats sont montrés dans les figures VII.6 (a) ainsi que VII.7 (e) et (f) qui incluent également une comparaison avec la théorie des perturbations au quatrième ordre [192] (cf. l'équation (VII.3)). Les figures montrent un très bon accord entre les résultats de CORE et la théorie des perturbations jusqu'à $J'/J \approx 0.6$. Pour ces couplages, nous obtenons déjà une bonne valeur avec l'approche à portée 4 qui est presque identique avec le résultat perturbatif et les approches de CORE à des plus grandes portées n'apportent pas de changement important pour le calcul du potentiel chimique.
En revanche, pour des couplages $J'/J > 0.6$, les différentes portées de CORE peuvent se distinguer de façon importante du résultat perturbatif au quatrième ordre. D'abord, on remarque que CORE à portée 4 est toujours en bon accord avec la théorie des perturbations, par exemple, μ est nul pour $J'/J = 0.82$ dans le calcul perturbatif contre $J'/J = 0.81$ dans le calcul de CORE à portée 4. CORE à portée 6 et à portée 8 s'écartent des résultats perturbatifs à partir de $J'/J = 0.7$. Pour les portées 6 et 8, on note également une différence entre les dimères horizontaux et verticaux que nous discutons dans ce qui suit. Dans ce cas, nous calculons le potentiel chimique en moyennant les deux contributions des dimères horizontaux et verticaux. Et finalement, des écarts importants entre CORE à portée 9 et les résultats perturbatifs apparaissent à partir de $J'/J = 0.6$.
En considérant l'annulation du gap en fonction du couplage J'/J (c'est-à-dire $\mu(J'/J) = 0$), nous notons que les résultats de CORE s'approchent du résultat exact $(J'/J)_{crit} \approx 0.7$ [192, 193] si on augmente la portée de CORE : le gap s'annule (c'est-à-dire $\mu(J'/J) = 0$) pour $J'/J = 0.82$ dans le calcul perturbatif contre $J'/J = 0.81$ (CORE à portée 4), $J'/J = 0.78$ (CORE à portée 6), $J'/J = 0.75$ (CORE à portée 8) et enfin $J'/J = 0.73$ (CORE à portée 9). Ceci confirme la validité de notre approche à plus grande portée, à savoir portée 9.
Notons que le potentiel chimique est différent pour les dimères verticaux et horizontaux si le bloc est rectangulaire comme pour les exemples de portée 6 (3×2) et $r = 8$ (4×2). Cela fait penser à la réalisation unidimensionnelle du modèle Shastry-Sutherland, à savoir la chaîne de dimères ortho-

[2]Le gap de spin Δ_s correspond à un état lié à deux magnons, donc $\Delta_s < \mu$.

gonaux, traitée dans le chapitre VI. Pour ce système, la différence entre les dimères horizontaux et verticaux est cruciale puisque, jusqu'à demi-aimantation, seulement une sorte des deux dimères est peuplée par des particules tandis que l'autre reste vide. Par ailleurs, les hamiltoniens à portée 4, 6 et 8 permettent également l'étude de la double chaîne de dimères orthogonaux. Par contre, si notre approche au réseau de Shastry-Sutherland est basée sur des blocs carrés comme $r = 4$ (2×2) et $r = 9$ (3×3), il n'y a pas de différence entre les deux sortes de dimères.

Les interactions à différentes distances sont définies dans les figures VII.2 (a) et VII.3 et les figures VII.6 (b)-(e), VII.7 (a)-(f) et VII.8 (a) et (b) montrent nos résultats pour ces quantités. En raison de la différence du potentiel chimique pour les dimères horizontaux et verticaux pour les portées 6 et 8, les interactions diffèrent aussi pour les deux sortes de dimères, comme on le voit dans les figures VII.6 (b)-(e). Par ailleurs, pour V_3 et V_3' seulement l'une des deux contributions est montrée puisque l'autre est inaccessible en raison de la géométrie. Dans les figure VII.7 (b) et (c), par contre, la valeur moyenne est prise en compte pour les comparaisons.
En considérant les figures VII.6 (b)-(e), on remarque le très bon accord entre la théorie des perturbations au troisième ordre [110, 199, 200] (cf. l'équation (VII.4)) et les résultats de CORE pour les interactions dominantes V_1 et V_3 lors que $J'/J \leq 0.5$. Pourtant, les résultats de CORE à portée 9 indiquent que V_1 atteint son maximum pour $J'/J = 0.5$ et V_3 le sien pour $J'/J = 0.6$ ce qui est en contradiction avec les résultats perturbatifs. En outre, les interactions V_1 et V_3 sont négatives et donc attractives pour des plus grandes valeurs de J'/J, mais ceci n'implique pas forcement la formation de groupes de particules en raison d'autres interactions répulsives à plusieurs corps. Notons aussi que, parmi les différentes portées de CORE, les approches à plus courtes portées sont généralement en meilleur accord avec les résultats perturbatifs au troisième ordre que l'approche à portée 9. Enfin, les figures VII.6 (c) et (e) montrent que les interactions V_2 et surtout V_3' sont beaucoup moins importantes que V_1 et V_3. Soulignons le fait que les calculs perturbatifs au troisième ordre est en très bon accord avec les calculs CORE pour des valeurs $J'/J \leq 0.5$. Seulement, ils sous-estiment V_2 par rapport à CORE et indiquent $V_3' = 0$, contrairement au calculs de CORE aux portées assez élevées.
Les interactions sont encore plus détaillées dans les figures VII.7 (a)-(d) avec des échelles logarithmiques pour chaque portée de CORE avec un bloc bidimensionnel : $r = 4$ (bloc de 2×2 dimères), $r = 6$ (3×2 dimères), $r = 8$ (4×2 dimères) et $r = 9$ (3×3 dimères). Évidemment, les petites portées ne permettent pas de calculer les interactions à des longues distances. On remarque que parmi toutes les interactions, la différence entre la théorie des perturbations au troisième ordre et les approches de CORE est la plus prononcée pour l'interaction V_2.
Enfin, les figures VII.7 (e) et (f) résument toutes les interactions discutées à deux corps en utilisant une échelle linéaire et soulignent visiblement l'importance des termes V_1 et V_3. Pour l'approche à portée 9, nous montrons aussi deux processus à trois corps, à savoir V_3^{3p} et $V_3'^{3p}$, qui ont la même géométrie que les interactions V_3 et V_3', mais avec une particule supplémentaire sur le dimère au centre. V_3^{3p} illustre le rôle important que peuvent jouer les interactions à plusieurs corps, même

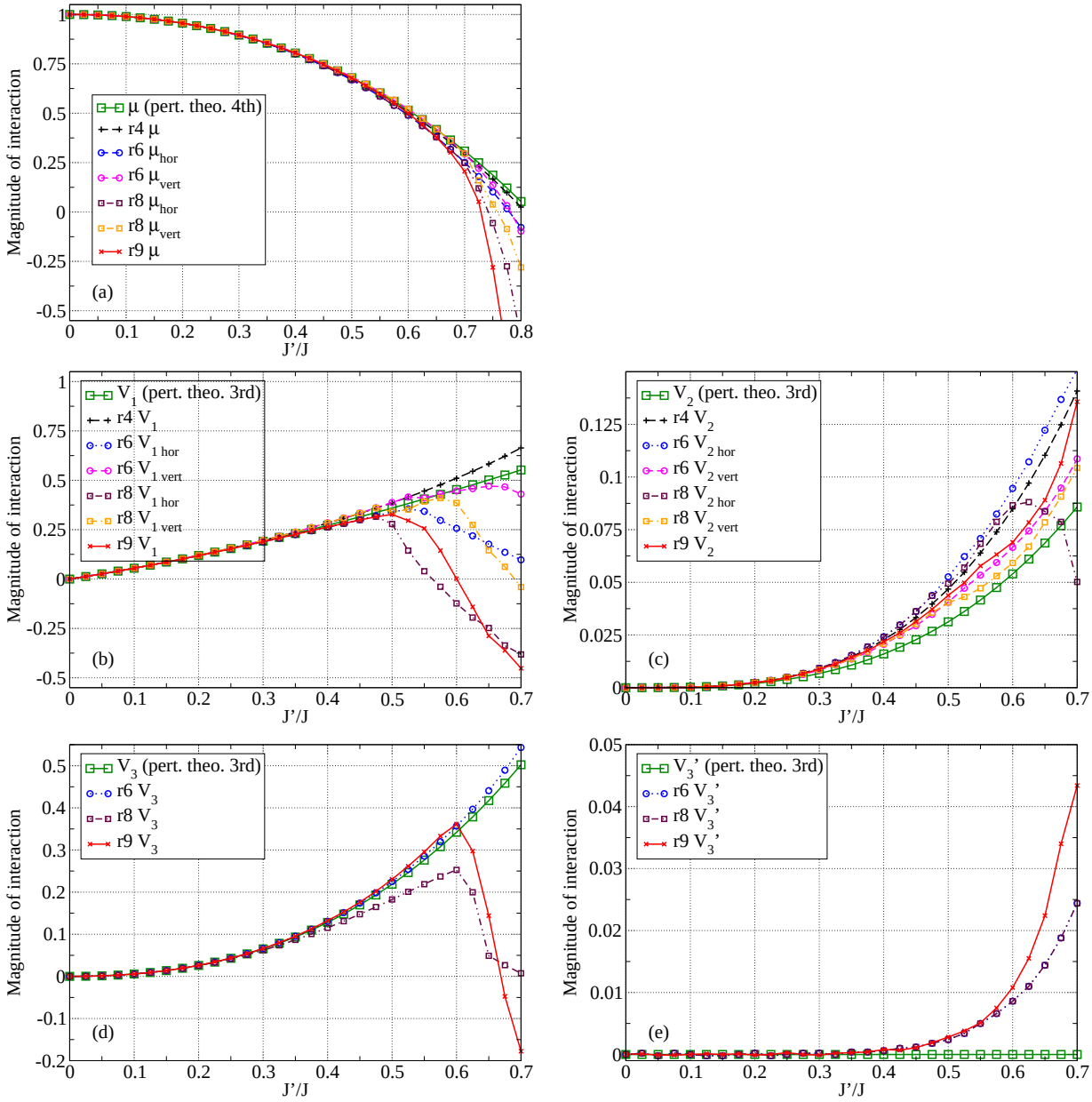


FIG. VII.6: Évolution (a) du potentiel chimique μ et (b)-(e) des interactions à deux corps à différentes distances en fonction de la portée r de CORE et du rapport des couplages J'/J : $r = 4$ (bloc de 2×2 dimères), $r = 6$ (3×2), $r = 8$ (4×2) et $r = 9$ (3×3). Pour les blocs rectangulaires ($r = 6, 8$) μ d'un dimère horizontal n'est pas égal à celui d'un dimère vertical. Ceci explique les différences des interactions pour les blocs rectangulaires. Les résultats perturbatifs jusqu'au quatrième ordre (cf. les équations (VII.3) et (VII.4)) sont donnés pour comparition.

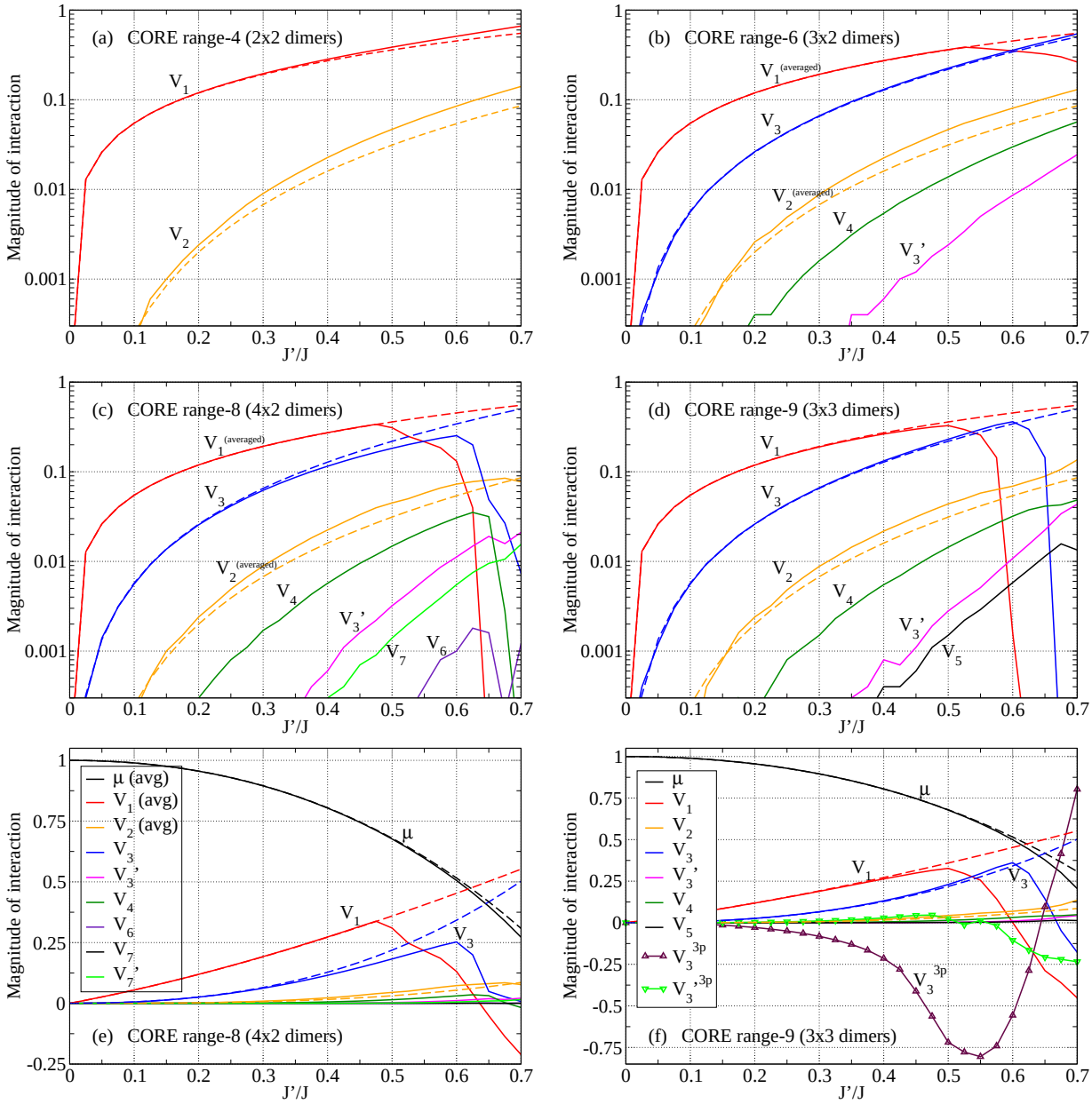


FIG. VII.7: Évolution des interactions à deux corps en fonction du rapport des couplages J'/J et de la portée r de CORE : (a) bloc de 2×2 dimères ($r = 4$), (b) 3×2 ($r = 6$), (c) 4×2 ($r = 8$) et (d) 3×3 ($r = 9$). Les petits blocs permettent seulement des interactions à courte distance. Pour les blocs rectangulaires ($r = 6, 8$), les valeurs de V_1 et V_2 sont moyennées ($V_{\text{hor}} + V_{\text{vert}}/2$) afin de faciliter la comparaison. Pour $r = 8$ (e) et pour $r = 9$ (f), une vue globale des interactions est donnée. (f) inclut aussi des interactions à trois corps ($V_3^{3\text{p}}$ et $V_3'^{3\text{p}}$). Les lignes tiretées indiquent les résultats perturbatifs jusqu'au quatrième ordre (cf. les équations (VII.3) et (VII.4)).

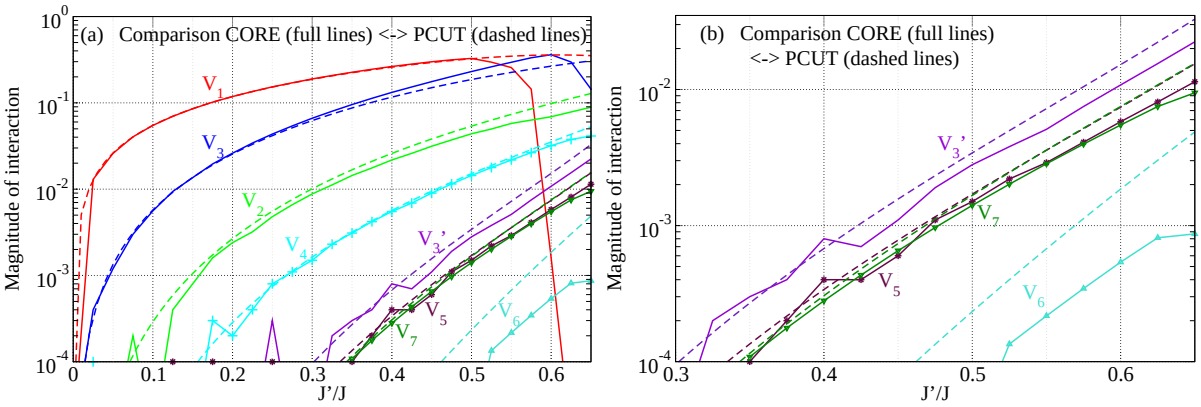


FIG. VII.8: Les interactions à deux corps en fonction du rapport des couplages J'/J : comparaison des résultats de notre approche de CORE à portée 9 (bloc de 3×3 dimères) avec ceux de l'approche perturbative PCUTs de Dorier *et al.* [90] (lignes tiretées). (b) est un extrait de la figure (a) montrant les faibles interactions V_3', V_5, V_6 et V_7.

si elles ne sont pas incluses dans notre discussion en raison de leur très grand nombre dans le hamiltonien effectif. Ici, nous nous limitons à une discussion des interactions à deux corps en raison de leur importance pour le système faiblement aimanté, mais nous notons que d'autres termes apparaissent et deviennent pertinents pour des aimantations plus élevées. Dans la section 3 de ce chapitre, nous étudions donc notre modèle effectif avec la diagonalisation exacte qui prend en compte toutes les contributions à une ou plusieurs particules dérivées avec la méthode CORE. Cela permet de comparer nos résultats avec des résultats exacts et non seulement perturbatifs.

Terminons la discussion des interactions avec la comparaison de nos résultats avec ceux de l'approche PCUTs de Dorier *et al.* [90], illustrée dans la figure VII.8 (a) et (b). Premièrement, on remarque la même hiérarchie des interactions, qui est notamment $V_1 > V_3 > V_2 > V_4 > V_3' >$($V_5$ et V_7)$> V_6$. Ceci montre de façon générale l'importance des interactions à courte distance parmi les interactions à deux corps. Deuxièmement, on note le très bon accord des deux approches pour les interactions V_1, V_4, V_5 et V_7 pour un rapport des couplages $J'/J \leq 0.5$ et pour quelques interactions au-delà de cette valeur. Pour V_3 on note une petite déviation à partir de $J'/J = 0.3$ alors que des relativement grands écarts sont visibles pour les interactions V_2, V_3 et surtout V_6. Remarquons que CPUTs *sur*-estime V_2 par rapport à notre approche de CORE tandis que la théorie des perturbations au troisième ordre [110, 199, 200] *sous*-estime cette interaction par rapport à nos résultats. Néanmoins, la différence la plus importante entre les deux approches est certainement la chute de V_1 à partir de $J'/J = 0.5$ avec des valeurs négatives pour $J'/J > 0.6$ qui sont calculées avec l'approche de CORE à portée 9. Les résultats de PCUTs indiquent que V_1 devrait plutôt être stabilisée à partir de $J'/J = 0.5$.

En conclusion, notre approche de CORE à portée 9 et les calculs de PCUTs de Dorier *et al.* [90] donnent des résultats très similaires pour les interactions à deux corps ce qui est rassurant pour les

deux puisqu'elles approchent le réseau de Shastry-Sutherland différemment et indépendamment. En outre, le très bon accord des deux approches avec la théorie des perturbations au troisième ordre pour $J'/J \leq 0.5$ est tout à fait remarquable.

Après les termes diagonaux du hamiltonien effectif, abordons dans ce qui suit les termes hors-diagonaux, et plus précisément les termes de saut corrélé. Les figures VII.2 (b) - (d) en montrent des illustrations schématiques et les résultats correspondants de nos calculs de CORE sont montrés dans les figures VII.9 (a) - (f). Comme pour les interactions à deux corps, nous comparons nos résultats avec les calculs de la théorie des perturbations au troisième ordre [110, 200], donnés dans l'équation (VII.5). Rappelons que les processus de saut d'une seule particule isolée sont négligés dans les calculs perturbatifs. Nos résultats confirment que ces processus sont au moins un ordre de grandeur plus petits que les termes de saut corrélé et en conséquence ces premiers sont négligés dans notre discussion.
Tandis que les figures VII.9 (a) - (e) montrent l'évolution avec la portée de CORE de chaque terme que nous discutons, la figure (f) montre une vue générale des différents termes. En considérant cette dernière, on remarque que les processus dominants sont les termes ta_3 et ta_{1h}. Comme pour les termes d'interaction, on observe que les termes de saut corrélé peuvent fortement dépendre de la géométrie : les deux termes ta_3' et ta_{1v} sont largement dominés par ta_3 et ta_{1h}, les termes correspondants à même distance, mais avec une géométrie différente. On note en outre que, à l'exception de ta_{1v} et ta_{1h}, tous les termes de saut corrélé que nous considérons sont bien capturés par la théorie des perturbations au troisième ordre pour des couplages $J'/J \leq 0.5$. Par ailleurs, la valeur de PCUTs de Dorier *et al.* [90] pour le processus dominant, $ta_3^{\mathrm{PCUTs}} = 0.09$ pour le couplage $J'/J = 0.5$, est en bon accord avec nos résultats aux différentes portées r : $ta_3^{r=6} = ta_3^{r=9} = 0.09$ et $ta_3^{r=8} = 0.08$ et aussi en relativement bon accord avec le résultat perturbatif au troisième ordre $ta_3^{3ième} = 0.11$, pour le même couplage respectivement. En revanche, pour ta_{1v} et ta_{1h}, les calculs de CORE s'écartent des calculs perturbatifs au troisième ordre à partir de $J'/J = 0.3$. Pour $J'/J \leq 0.5$, il est remarquable que nos calculs à portées 4, 6 et 8 sont en bon accord avec les calculs de PCUTs, c'est-à-dire une approche perturbative au $15^{ième}$ ordre, tandis que nos résultats à portée 9 sont bien décrits par la théorie des perturbations au *deuxième* ordre [110, 200].
D'un point de vue général, on constate pour les termes de saut corrélé que les résultats des différentes portées de CORE coïncident pour $J'/J \leq 0.5$ et des écarts importants peuvent apparaître à partir de $J'/J = 0.55$. Ceci nous indique que pour $J'/J \geq 0.55$ notre discussion des processus de saut corrélé reste insuffisante et on peut donner deux explications potentielles, même si des résultats exacts ne sont pas disponible afin de résoudre ce problème. Premièrement, notre approche de CORE ne marche pas bien et ces processus nécessitent une approche de CORE à plus longue portée. Afin de vérifier cette hypothèse nous étudions notre modèle effectif dans la section suivante avec la diagonalisation exacte et comparons les résultats avec des résultats de diagonalisation exacte du modèle microscopique de Shastry-Sutherland. Deuxièmement, à partir de $J'/J = 0.55$, de nouveaux processus émergent et ces processus sont déjà inclus dans notre ha-

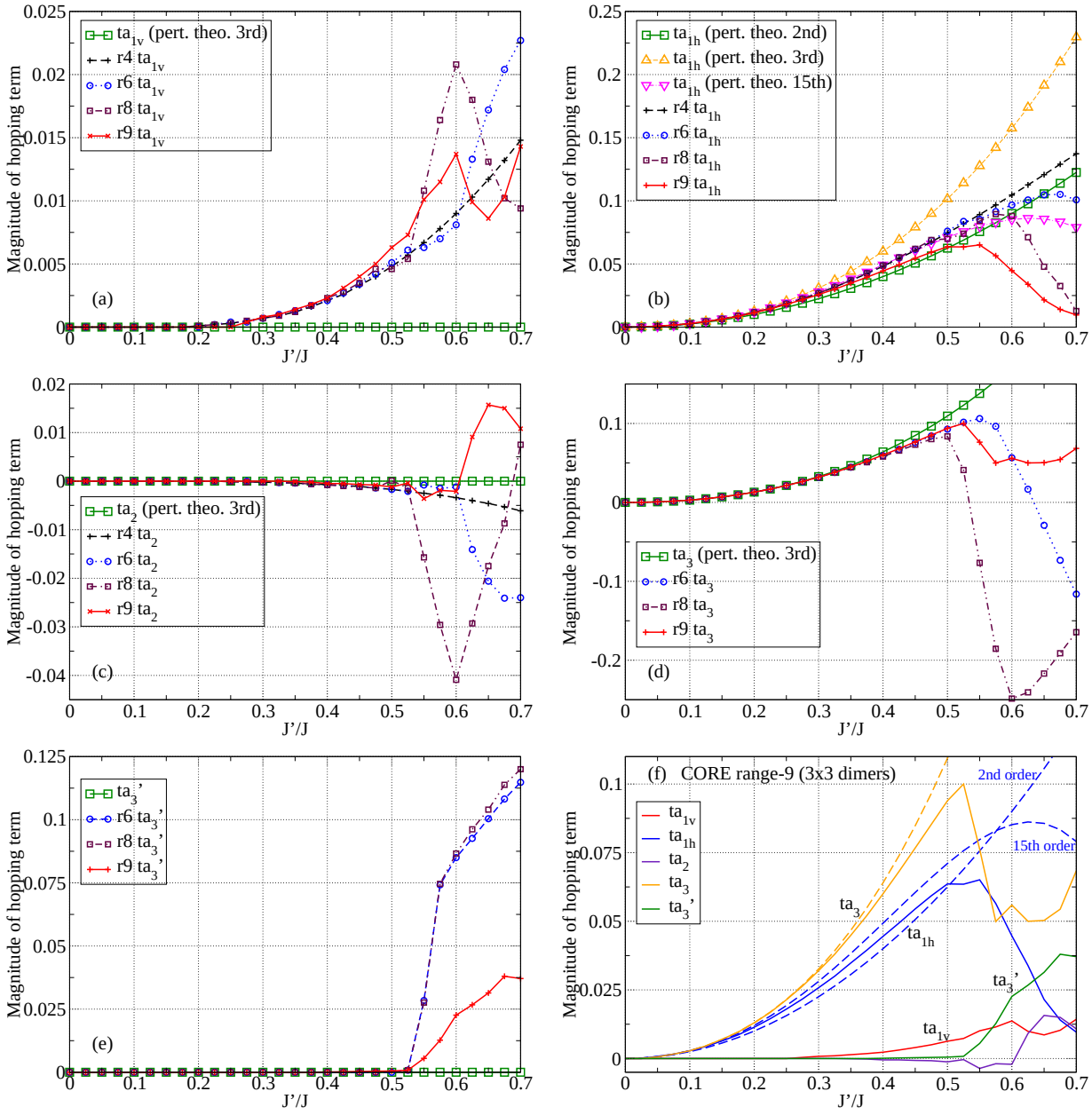


FIG. VII.9: (a)-(e) : Évolution des sauts corrélés à différentes distances en fonction de bloc de base (et ainsi de la portée r) de CORE et du rapport des couplages J'/J : $r = 4$ (bloc de 2×2 dimères), $r = 6$ (3×2 dimères), $r = 8$ (4×2 dimères) et $r = 9$ (3×3 dimères). Les résultats perturbatifs jusqu'au troisième ordre (cf. l'équation (VII.5)) sont donnés afin de comparer. Les termes ta_{1v}, ta_2 et ta_3' sont nuls dans cette approche perturbative. (f) donne une vue globale des termes de saut corrélés pour $r = 9$. Pour le terme ta_{1h} les résultats perturbatifs au deuxième et au 15$^{\text{ième}}$ (de Dorier *et al.* [90]) ordre sont donnés.

miltonien effectif, mais ils ne sont pas discutés en détail ici en raison de leur complexité et leur potentiellement grand nombre. Pour ce cas, les calculs comparatifs avec la diagonalisation exacte de la section suivante nous indiqueront que notre modèle effectif est capable de décrire le réseau de Shastry-Sutherland sous champ magnétique pour $J'/J = 0.65$.

3 Résultats de diagonalisation exacte du modèle effectif

En appliquant la méthode CORE, nous avons formulé un modèle effectif pour le réseau de Shastry-Sutherland sous champ magnétique ce qui nous permet de dériver la courbe d'aimantation correspondante. Dans ce but, nous considérons différentes tailles de systèmes effectifs et diagonalisons le hamiltonien effectif correspondant avec l'algorithme de Lanczos (cf. section III.1.1) pour chaque secteur de la composante du spin S_z. Ceci nous donne l'énergie de l'état fondamental pour les différentes valeurs de S_z et la courbe d'aimantation peut en être tirée, comme discuté dans la section 2 du chapitre II. En outre, nous avons calculé la corrélation particule-particule à partir du modèle effectif de CORE à portée 9 pour deux exemples d'un plateau d'aimantation ce qui nous donne des informations supplémentaires sur la structure de ces plateaux. Outre ces calculs d'une corrélation statique, nous présentons dans ce qui suit des courbes d'aimantation obtenues avec la diagonalisation exacte du modèle effectif à différentes portées. Nous comparons nos résultats avec les résultats exacts correspondants pour le modèle microscopique afin de pouvoir juger la qualité de nos approches aux différentes portées et discutons des différences entre nos résultats et ceux de Dorier *et al.* [90]. Nous étudions également la stabilité des différents plateaux dans la limite thermodynamique.

Les figures VII.10 (a) - (d) illustrent pour différents couplages J'/J les courbes d'aimantation de différents modèles. Le modèle microscopique est considéré sur un bloc de $\sqrt{32} \times \sqrt{32}$ sites, soit 16 dimères et des modèles effectifs de CORE sur un bloc de 4×4 sites effectifs qui correspondent à 16 dimères. Notons d'abord que nous étudions des blocs de taille finie de N dimères et par conséquent, nous n'obtenons pas de courbe d'aimantation avec une pente continue, mais plutôt une courbe d'incréments finis $m = 0, \frac{1}{N}, \frac{2}{N}, \cdots, 1$ par rapport à la valeur saturée. Dans notre étude, nous considérons les modèles effectifs suivants : CORE à portée 4, basé sur un bloc de 2×2 dimères, CORE à portée 6 (3×2 dimères) et CORE à portée 9 (3×3 dimères). En outre, nous considérons le cas spécial de CORE à portée « r4 ext » (portée 4, étendue) qui est fondée sur un bloc de 2×2 dimères avec les contributions supplémentaires au troisième voisin dans la direction horizontale et verticale. Cette approche se base donc sur 6 dimères ($(2 \times 2) + 1 + 1$) au lieu de 4 seulement. Enfin, la portée « r6 ext » (portée 6, élargie) est une approche utilisant la portée 6 horizontalement (3×2 dimères) et verticalement (3×2 dimères) et couvre donc 8 dimères ($(3 \times 2) + 2$).
En considérant les résultats exacts dans les figures VII.10 (a) - (d), on note des plateaux pour

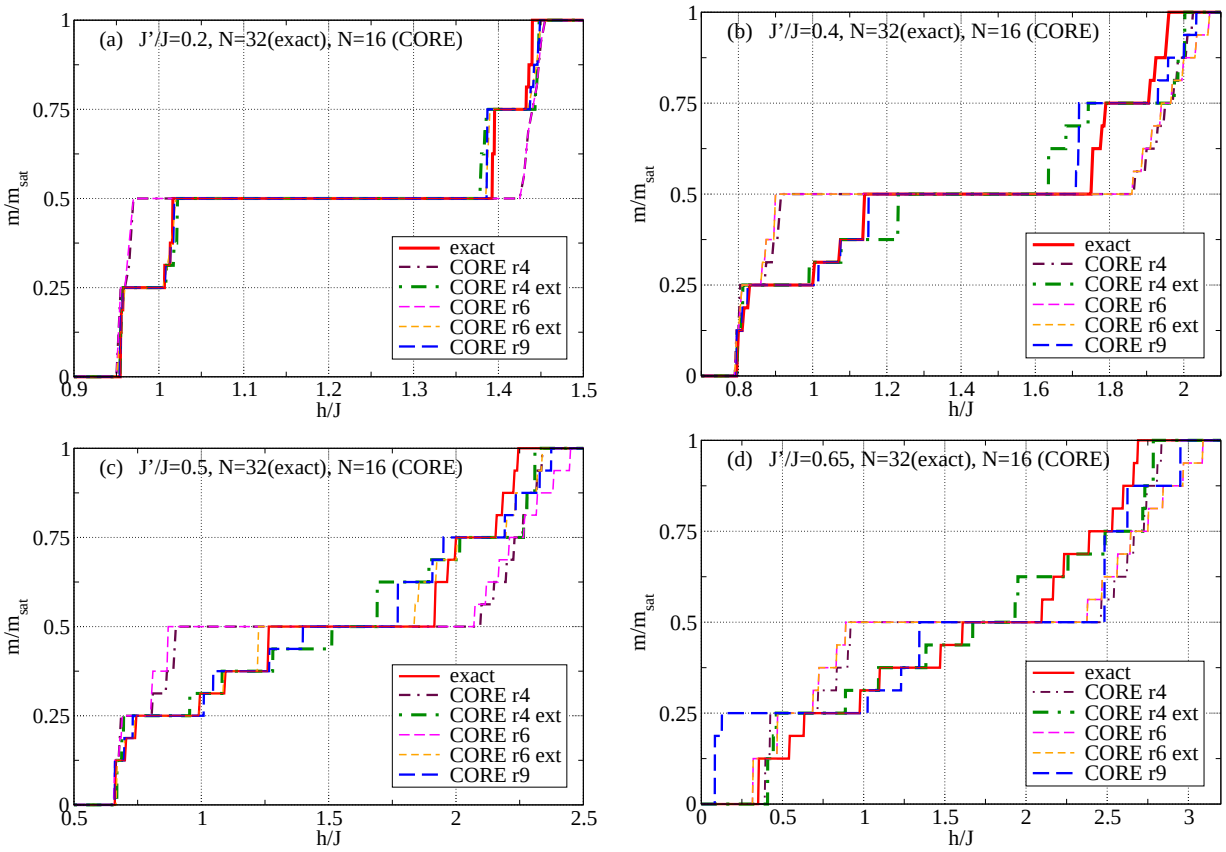


FIG. VII.10: En fonction du couplage J'/J, (a) - (d) montrent les courbes d'aimantation obtenues à partir du modèle microscopique de Shastry-Sutherland pour $N = 32$ sites et du modèle effectif de CORE à différentes portées pour $N_{\text{eff}} = 16$ sites effectifs qui correspondent également à 32 sites. Des plateaux d'aimantation pour $m = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$ et $\frac{1}{8}$ sont permis dans ce réseau.

$m = 0$, $\frac{1}{4}$, $\frac{1}{2}$ et $\frac{3}{4}$ dont la position et la taille dépendent du rapport J'/J. On remarque que l'approche de CORE à portée 4 donne une bonne valeur pour la taille du plateau $m = 0$ qui ne correspond pas directement au gap de spin en raison d'états liés de deux triplets [137, 207]. En revanche, cette approche n'est pas capable de décrire le processus d'aimantation puisque la courbe correspondante s'écarte considérablement de la courbe exacte dans les 4 exemples montrés. Il est intéressant de voir que l'approche à portée « 4 ext », par contre, est déjà une grande amélioration par rapport à l'approche à portée 4. Surtout pour des petites valeurs de J'/J et des valeurs intermédiaires de J'/J, ainsi que pour des faibles aimantations ($m \leq \frac{1}{2}$), la portée « 4 ext » donne de très bons résultats. Même si elle sous-estime très nettement le plateau $m = \frac{1}{2}$ pour des valeurs intermédiaires et des plus grandes valeurs de J'/J, cette approche simpliste donne des résultats d'une qualité étonnante.

L'analyse des résultats à portée 6 et « 6 ext », en revanche, est moins évidente : comme la portée 4, la portée 6 échoue à retracer la courbe exacte, et comme la portée 4, elle donne une bonne valeur pour le plateau $m = 0$. Mais la portée « 6 ext » n'arrive pas à améliorer les résultats de la portée 6 de façon fiable. Pour deux exemples ($J'/J = 0.2$ et 0.5, voir les figures VII.10 (a) et (c)), les résultats basés sur CORE à portée « 6 ext » sont en bon voire très bon accord avec les résultats exacts, mais pour les deux autres exemples ($J'/J = 0.4$ et 0.65, voir les figures VII.10 (b) et (d)), les écarts sont importants et la méthode échoue.

Parmi les différentes portées de CORE, les résultats de l'approche de CORE à portée 9, enfin, donnent le meilleur accord avec les courbes exactes, surtout pour des petites valeurs et des valeurs intermédiaires du couplage J'/J : pour $J'/J = 0.2$ (cf. figure VII.10 (a)), on remarque que les résultats exacts et ceux de CORE à portée 9 sont pratiquement identiques ce qui est aussi le cas pour $J'/J = 0.4$ (cf. figure VII.10 (b)) pour une faible aimantation. En revanche, pour des valeurs d'aimantation $m > \frac{1}{2}$, qui sont moins importantes pour nous, on note des différences entre les deux approches. Aussi pour $J'/J = 0.5$ (cf. figure VII.10 (c)), cette approche de CORE donne de bons résultats jusqu'à $m = \frac{1}{2}$, mais sous-estime le plateau $m = \frac{1}{2}$ de façon non négligeable. Pour $m > \frac{1}{2}$, des grands écarts avec la courbe exacte sont visible et finalement, pour $J'/J = 0.65$ (cf. figure VII.10 (d)) on doit constater que cette approche a des grandes difficultés : pour le plateau $m = 0$, qui est bien reproduit par les autres portées de CORE, les résultats de portée 9 montrent une très large déviation des résultats exacts. Non seulement le comportement à forte aimantation, mais aussi celui à faible aimantation est mal-décrit avec des très larges plateaux pour $m = \frac{1}{4}$ et $\frac{1}{2}$ ce qui ne correspond pas aux résultats exacts.

En conclusion, la comparaison des courbes d'aimantation des différentes approches de CORE avec la courbe exacte révèle que CORE doit être appliquée au réseau de Shastry-Sutherland à plus longue portée possible. L'approche à portée 9 est capable de bien décrire le processus d'aimantation jusqu'à des valeurs intermédiaires de J'/J, mais a visiblement des difficultés pour les rapports du couplage élevés comme $J'/J = 0.65$, la valeur qui correspond au composé $SrCu_2(BO_3)_2$. Pourtant, CORE à portée 9 permet d'approcher cette valeur et on peut néanmoins tirer des conclusions

sur la physique de ce composé. Dans ce contexte, le succès de notre approche à portée « 4 ext » est tout à fait remarquable puisqu'il s'agit d'une approche minimaliste qui inclut le potentiel chimique μ et qui décrit les interactions V_1, V_2 ainsi que les termes de saut corrélé ta_{1h}, ta_{1h} et ta_2 (cf. les figures VII.2 et VII.3 pour la définition de ces termes). Avec la contribution au troisième voisin (qui lui apporte l'ajout « ext », soit « élargie »), on tient aussi compte de V_3 et V_3' ainsi que de ta_3 et ta_3'. Il s'agit d'une première estimation calculée avec une chaîne de seulement trois dimères orthogonaux et pourtant, ces contributions font visiblement la différence. Rappelons aussi que les interactions à plus longue distance V_6 et V_7 ne sont décrites ni avec cette approche à portée « 4 ext » ni avec l'approche à portée 9.

Après avoir justifié le choix de l'approche à portée 9 parmi les différentes portées de CORE, nous effectuons dans ce qui suit une analyse quantitative de cette approche en la comparant avec des résultats exacts. Dans les figures VII.11 (a) et (c), nous montrons des courbes d'aimantation qui ont été calculées pour le modèle microscopique de Shastry-Sutherland avec $J'/J = 0.5$ pour un réseau carré de $N = 32$ et $N = 36$ sites (soit 16 et 18 dimères), respectivement. Ces deux figures incluent également nos résultats pour $N = 32$ et $N = 36$ sites, calculés à portée 9 de CORE, qui permettent de comparer directement les deux approches. Les diagrammes de phase correspondants sont illustrés dans les figures VII.11 (b) et (d) et indiquent différents plateaux d'aimantation en fonction du couplage J'/J. Notons que le réseau $N = 32$ peut accommoder des plateaux pour $m = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$ et $\frac{1}{8}$ et le réseau $N = 36$ pour $m = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$, $\frac{2}{9}$, $\frac{1}{6}$, et $\frac{1}{9}$. En outre, dans les figures VII.11 (a) et (c), nous présentons une partie de la courbe d'aimantation qui est calculée pour 32 et 36 sites effectifs ce qui correspond à 64 et 72 sites du modèle microscopique. Le fait que ces tailles du réseau effectif soient accessibles constitue une amélioration importante qui est rendue possible grâce à la réduction de l'espace de Hilbert du modèle effectif de CORE. Pourtant, nous ne pouvons pas calculer la courbe d'aimantation complète du système de 32 ou 36 sites effectifs parce que pour des aimantations moyennes $m \sim \frac{1}{2}$, l'espace de Hilbert est très grand. Nous ne pouvons résoudre le modèle effectif que pour faible aimantation ($m \lesssim \frac{1}{3}$) ou bien pour aimantation élevée ($m \gtrsim \frac{2}{3}$). Comme déjà discuté au-dessus, pour $J'/J = 0.5$ et $N = 32$ on observe un bon accord entre les calculs de CORE à portée 9 et les calculs exacts, surtout pour faible aimantation, c'est-à-dire $m \leq \frac{1}{2}$. Nous confirmons ces résultats avec un calcul pour un réseau effectif à taille doublée ($N = 64$) que nous effectuons pour faible aimantation et pour aimantation élevée : dû à la très grande taille de l'espace de Hilbert, nous ne pouvons pas accéder à des aimantations moyennes $m \sim \frac{1}{2}$. Les résultats pour $J'/J = 0.5$ et $N = 36$ montrent également un très bon accord entre les deux approches où la courbe du modèle effectif est encore confirmée pour des faibles aimantations par des calculs pour un réseau effectif à taille doublée ($N = 72$). Le très bon accord entre les deux approches se retrouve aussi dans les diagrammes de phase, montrés dans les figures VII.11 (b) et (d) : pour $N = 32$ (figure VII.11 (b)), on trouve un accord remarquable entre notre approche de CORE et les résultats exacts non seulement pour la taille des plateaux $m = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$ et $\frac{1}{8}$, mais aussi pour leurs positions exactes, c'est-à-dire leurs débuts et leurs fins en fonction du couplage J'/J. Seulement

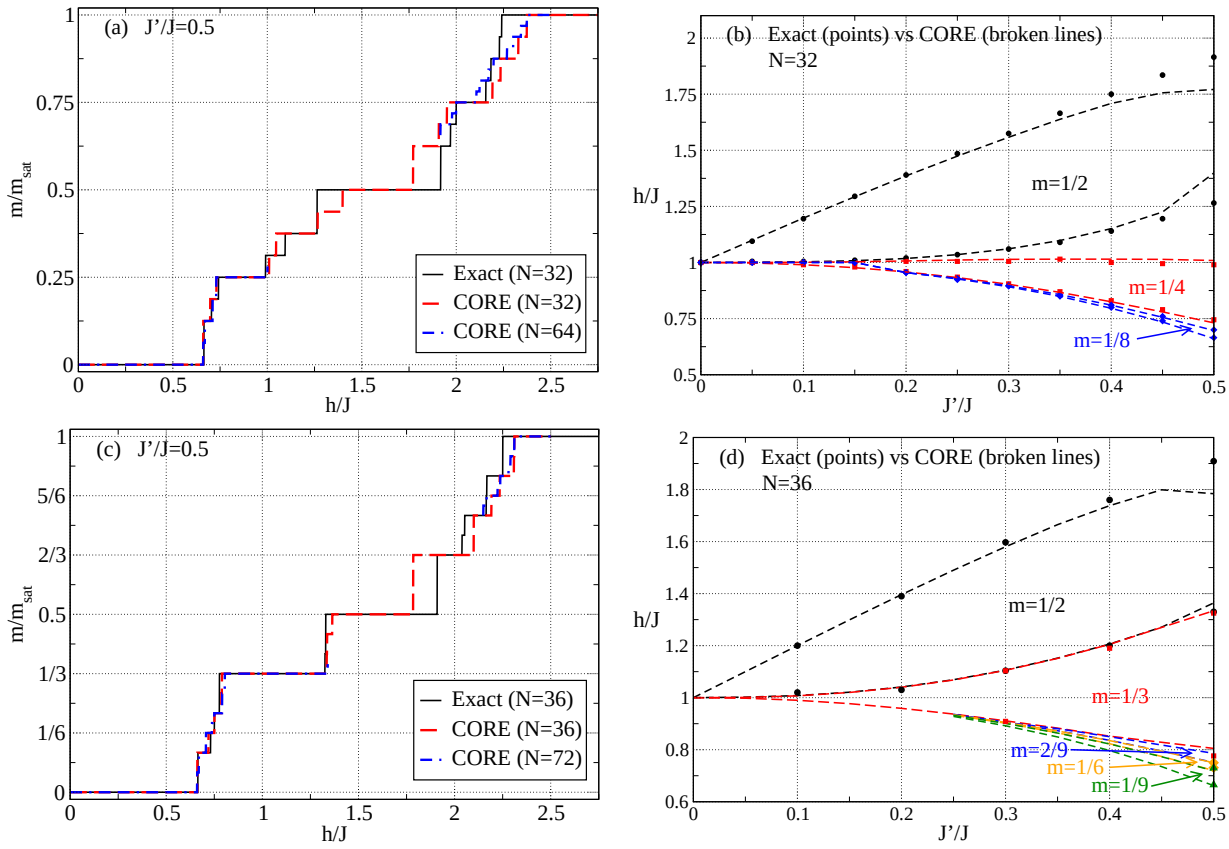


FIG. VII.11: (a) Courbes d'aimantation obtenues à partir du modèle microscopique de Shastry-Sutherland et du modèle effectif de CORE à portée 9, pour un réseau de $N = 32$ sites ainsi que les résultats de CORE pour $N = 64$. (b) Diagramme de phase pour $N = 32$ en fonction du couplage J'/J et du champ magnétique h/J : les résultats exacts (points) et de CORE (lignes tiretées) montrent un bon accord pour la position des plateaux d'aimantation pour $m = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{4}$ et $\frac{1}{8}$ qui sont permis dans ce réseau. (c) et (d) correspondent à (a) et (b) pour $N = 36$ et $N = 72$. Pour $N = 36$, des plateaux pour $m = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$, $\frac{2}{9}$, $\frac{1}{6}$, et $\frac{1}{9}$ sont possibles. Le plateau $m = \frac{1}{4}$, par contre, n'est pas accessible avec $N = 36$ et pour $N = 72$, cette structure n'est pas stable en raison de la géométrie du réseau.

des petites déviations entre les calculs de CORE et les calculs exacts sont visibles pour le plateau $m = \frac{1}{2}$ lors de $J'/J \geq 0.475$. La situation est similaire pour $N = 36$ (figure VII.11 (d)), où le très bon accord entre les deux méthodes est confirmé. Les positions exactes des plateaux $m = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$, $\frac{2}{9}$, $\frac{1}{6}$, calculées avec les deux approches, coïncident de façon impressionnante à l'exception du plateau $m = \frac{1}{2}$ pour $J'/J \geq 0.45$. Ceci souligne la grande qualité de notre approche de CORE à portée 9 au réseau de Shastry-Sutherland sous champ magnétique.
En conclusion, les deux exemples montrent très nettement et sans laisser de doute que notre approche à portée 9 est bien justifiée afin de calculer le processus d'aimantation du réseau de Shastry-Sutherland jusqu'à demi-saturation et pour des couplages $J'/J \lesssim 0.5$. Elle est capable de calculer de manière fiable la position précise des plateaux accommodables sur un réseau de taille finie. Ceci est encore concrétisé avec la discussion suivant de la taille des différents plateaux et leur pertinence dans la limite thermodynamique que l'on calcule en utilisant notre approche CORE et celle de de Dorier *et al.* [90]

Rappelons le diagramme de phase de Dorier *et al.* [90], obtenus avec la méthode de PCUTs et montré dans la figure VII.4 à droite : comme Sebastian *et al.* [82], ils ont trouvé des plateaux pour $m = \frac{1}{2}$ et $\frac{1}{3}$ et une série de plateaux pour $m = \frac{1}{9}$, $\frac{2}{15}$, $\frac{1}{6}$, et $\frac{2}{9}$. En revanche, contrairement au résultats de Sebastian *et al.* et aux autres études expérimentales [78, 79], Dorier *et al.* constatent l'absence des plateaux $m = \frac{1}{8}$, $\frac{1}{4}$ dans leurs résultats. Comme le montre la figure VII.12 pour $J'/J = 0.5$, notre étude CORE indique clairement la stabilité des plateaux $m = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$ $\frac{1}{4}$ puisque l'extrapolation de la taille de ces plateaux nous donne des valeurs finies dans la limite thermodynamique. En outre, notre approche de CORE arrive à calculer de manière précise le plateau $m = 0$ qui diffère du gap de spin à cause d'états liés de deux triplets [137, 207]. En plus, des plateaux, qui sont plus petits mais également stables, sont visible dans nos résultats pour $m = \frac{2}{9}$, $\frac{1}{6}$, $\frac{1}{8}$ et $\frac{1}{9}$ avec des tailles typiques entre $0.01J$ et $0.05J$.
Les contradictions entre les approches théoriques et les résultats expérimentaux à propos de quelques plateaux d'aimantation demandent certainement plus d'études des deux côtés. Pourtant, conformément aux expériences [78, 79] et en contradiction avec les résultats de PCUTs, les plateaux $m = \frac{1}{4}$ et $\frac{1}{8}$ sont très stables dans nos calculs puisque leurs tailles restent constantes lorsqu'on double la taille de notre réseau effectif de $N = 32$ à $N = 64$ sites. Par ailleurs, l'absence de ces deux plateaux dans les calculs de PCUTs pourrait élargir le plateau $m = \frac{1}{6}$ qui a une taille à peu près doublée par rapport à nos calculs. Le cas est plus difficile pour les plateaux de plus basse aimantation qui nécessitent une grande précision des calculs théoriques. Notons dans ce contexte que notre approche nous permet de calculer l'énergie de l'état fondamental pour $J'/J = 0.5$, $N = 32$ et $m = \frac{1}{8}$ avec une erreur relative de 0.3% et que notre modèle effectif est étudié de manière non biaisée en utilisant la diagonalisation exacte. Enfin, le fait que nous n'observons pas de plateaux $m = \frac{2}{15}$ (observé avec PCUTs [90]) ou $m = \frac{1}{7}$ et $m = \frac{1}{5}$ (mesurés par Sebastian *et al.* [82] est dû au choix des tailles de réseaux effectifs pour notre étude. Par exemple, la limitation des tailles accessibles avec les méthodes numériques rend impossible de calculer la taille du plateau d'aimantation

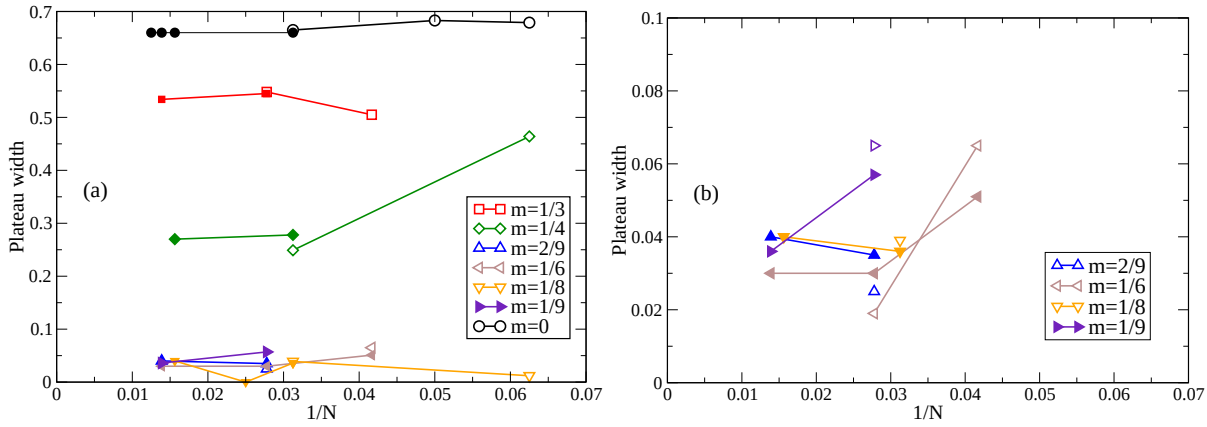


FIG. VII.12: Stabilité des plateaux d'aimantation pour $m < \frac{1}{2}$ dans la limite thermodynamique : pour $J'/J = 0.5$, les tailles des plateaux sont calculées avec le modèle microscopique (symboles vides) et avec le modèle effectif de CORE à portée 9 (symboles pleins) pour différentes tailles de réseaux finies.

$m = \frac{2}{15}$ puisqu'une plus grande maille élémentaire est requise.

Nous terminons notre discussion du réseau de Shastry-Sutherland avec une analyse approfondie des plateaux d'aimantation $m = \frac{1}{4}$ et $m = \frac{1}{3}$. Dans ce but, nous appliquons l'algorithme de Lanczos (cf. les sections 1.1 et 1.3 du chapitre III) au modèle effectif de CORE à portée 9 pour des réseaux effectifs de $N_{\text{eff}} = 32$ et $N_{\text{eff}} = 36$ ce qui correspond au réseau de Shastry-Sutherland avec 64 et 72 sites, respectivement. Nous montrons les résultats de ce calcul dans les figures VII.13 et VII.14.

Considérons d'abord la figure VII.13, qui montre la structure du plateau $m = \frac{1}{4}$ pour un réseau effectif de $N = \sqrt{32} \times \sqrt{32}$ sites. Nous utilisons les conditions aux bords périodiques et par conséquent, les sites aux quatre coins du cadre sont équivalents. Les cercles bleues montrent la corrélation entre le site du cercle et une particule au coin du réseau effectif et indiquent donc la présence ou l'absence d'une particule sur ce site. Sauf aux quatre coins, on observe également des particules aux milieux des quatre côtés et au centre du réseau. Cette structure s'explique comme suit : pour le plateau $m = \frac{1}{4}$, on observe des bandes remplies par des particules qui se trouvent au long de deux côtés opposées du réseau effectif, par exemple à droite et à gauche, noté comme ⟮⟮. On trouve une bande supplémentaire milieu de ces deux bandes et on observe par conséquent que le réseau effectif de $N_{\text{eff}} = \sqrt{32} \times \sqrt{32}$ sites est couvert par des bandes de particules qui sont séparées l'une de l'autre par trois bandes vides. Notre calcul indique que l'état fondamental n'est pas dégénéré et pour des tailles finies on conserve donc la symétrie de rotation. Ceci explique l'existence de trois bandes décrites et de trois bandes que l'on trouve en effectuant une rotation de $90° = \frac{\pi}{2}$. Ainsi, les deux autres côtés du réseau effectif sont couvertes par des bandes de particules, à savoir en haut et en bas du réseau ⟯⟯, avec une bande supplémentaire au milieu entre ces deux

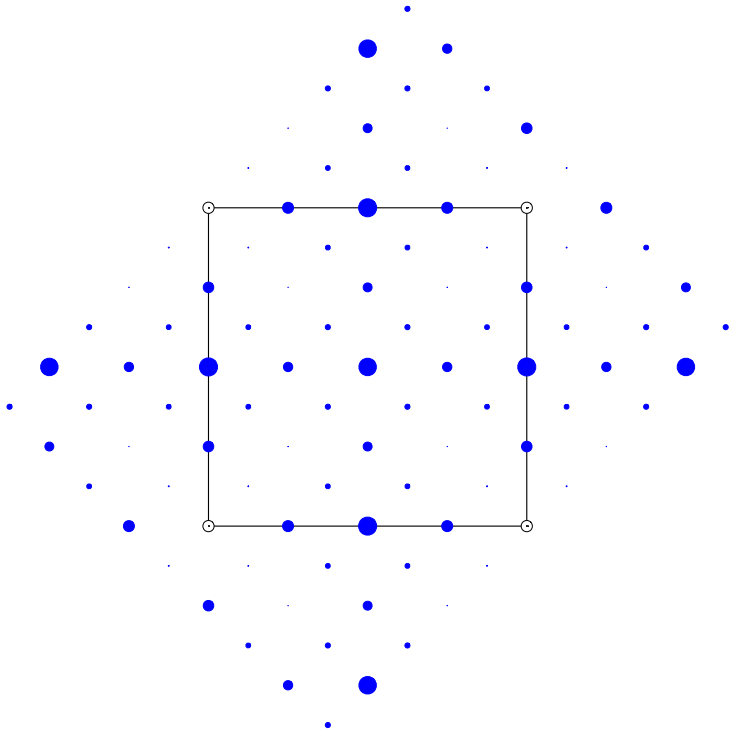


FIG. VII.13: Corrélation statique particule-particule du modèle Shastry-Sutherland pour le plateau $m = \frac{1}{4}$. Nos calculs sont basés sur le modèle effecif à portée 9 et effectués pour un réseau effectif de $N_{\text{eff}} = \sqrt{32} \times \sqrt{32}$ sites, indiqué par le cadre. En raison des conditions aux bords périodiques, les sites aux quatre coins du réseau effectif sont équivalents. La taille des cercles bleues indique la grandeur de la corrélation entre une particule sur le site du cercle avec la particule située à l'origine (cercle vide aux coins) du réseau. Plus de détails sont discutés dans le texte.

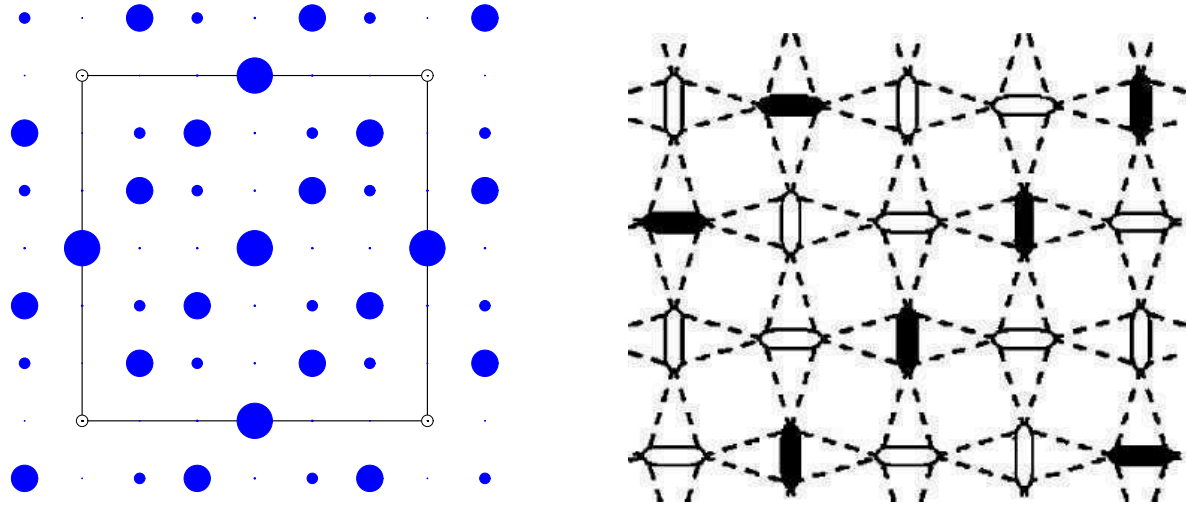


FIG. VII.14: Corrélation à temps égaux particule-particule du modèle Shastry-Sutherland pour le plateau $m = \frac{1}{3}$. À gauche, des résultats basés sur le modèle effectif à portée 9 pour un réseau effectif de $N_{\text{eff}} = 6 \times 6$ sites, indiqué par le cadre. En raison des conditions aux bords périodiques, les sites aux quatre coins du réseau effectif sont équivalents. La taille des cercles bleues indique la grandeur de la corrélation entre une particule sur le site du cercle avec la particule située à l'origine (cercle vide aux coins) du réseau. À droite, la structure de ce plateau selon Momoi et Totsuka [110], où des particules sont indiquées par les liens noirs, montre un bon accord avec nos résultats. On remarque une bande diagonale occupée qui est séparée de la prochaine bande occupée par deux bandes vides.

bandes. Le résultat est la superposition des deux configurations $\square\square + \square$ qui est invariante par rapport à une rotation de $\frac{\pi}{2}$. On observe une distribution de particules qui est plus élevée si des bandes orthogonales se croisent, comme au milieu des côtés et au milieu du réseau. Les autres sites appartenant à une seule bande de particules ont par conséquent des cercles dont la taille est plus petite que celles de deux bandes croisées. En outre, on remarque que hors des bandes décrites, il existe des petits cercles à côté des points de croisement qui ne devraient pas être présents dans un état purement statique.

La situation pour le plateau $m = \frac{1}{3}$ se présente différemment, comme nous illustrons dans la figure VII.14. À gauche, nous montrons la structure du plateau $m = \frac{1}{3}$ pour un réseau effectif de $N_{\text{eff}} = 6 \times 6$ sites. Comme pour le plateau $m = \frac{1}{4}$, on trouve que la structure du plateau est caractérisée par des bandes diagonales de particules qui sont séparées par deux bandes vides. Par exemple, une telle bande peut être observée entre le coin du réseau effectif en bas, à gauche et le coin en haut, à droite. Il est important de noter que les autres deux coins du réseau ne sont pas liés avec une bande de particules ce qui nous indique clairement la brisure de la symétrie de rotation. Les calculs basés sur le modèle effectif à portée 9 résultent dans un état fondamental *exactement*

dégénéré qui brise la symétrie de rotation. Nous obtenons donc des bandes parallèles de particules, comme illustré dans la figure VII.14, à droite.
Généralement, pour une telle configuration, les spins sont couplés au réseau, ce qui résulte dans une déformation de ce dernier. Cet effet est mesurable en analysant la structure de la maille élémentaire avec des expériences de résonance magnétique nucléaire (RMN), par exemple. Kodama *et al.* [80] ont effectué une étude RMN pour le plateau $m = \frac{1}{8}$ du composé $SrCu_2(BO_3)_2$ et nous rappelons que la figure I.12 en montre les résultats (cf. la section 2.2 du chapitre I). Une étude RMN du plateau $m = \frac{1}{3}$ serait souhaitable, or des telles expériences ne sont pas encore envisageable en raison du besoin de champs magnétiques statiques trop élevés.

4 Conclusion partielle

Dans ce chapitre, nous avons présenté une discussion détaillée du réseau de Shastry-Sutherland, en particulier pour des valeurs d'interactions qui caractérisent le composé $SrCu_2(BO_3)_2$. L'approche CORE que nous utilisons afin de dériver des modèles effectifs se base sur le singulet et le triplet polarisé et constitue par conséquent l'approche CORE la plus simple. Néanmoins, cette approche est bien justifiée et valable pour des couplages non perturbatifs qui sont proches de la valeur que l'on trouve pour le composé $SrCu_2(BO_3)_2$. Nous comparons les modèles effectifs résultants avec d'autres approches théoriques et généralement, nous trouvons un bon accord avec une approche perturbative qui inclut des termes jusqu'au $15^{\text{ième}}$ ordre. Une analyse quantitative qui compare des termes d'interaction entre deux particules montre que ces deux approches indépendantes trouvent des modèles effectifs similaires. En plus, nous résolvons des réseaux effectifs avec la diagonalisation exacte, une approche non biaisée, et nous montrons la stabilité de plusieurs plateaux d'aimantation, à savoir des grands plateaux pour $m = \frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$ et $\frac{1}{4}$. Notre analyse quantitative révèle également des plus petits plateaux stables pour $m = \frac{2}{9}$, $\frac{1}{6}$, $\frac{1}{8}$ et $\frac{1}{9}$. La comparaison avec des données exactes souligne la validité ainsi que la précision de notre approche. Ces résultats sont très intéressants dans le contexte d'expériences contradictoires quant à la stabilité de différents plateaux pour le composé $SrCu_2(BO_3)_2$. Nous remarquons que les différences entre les approches théoriques demandent une étude non biaisée et systématique qui combine les idées du champ moyen avec celles de la diagonalisation exacte. Ceci permettrait d'accéder aux réseaux nécessaires afin de discuter la stabilité relative de plateaux à faible aimantation, comme $m = \frac{2}{15}$. Enfin, nous illustrons la structure des deux plateaux $m = \frac{1}{4}$ et $m = \frac{1}{3}$ en calculant la corrélation statique particule-particule à partir du modèle effectif et trouvons un excellent accord avec les structures proposées dans la littérature.

Conclusion générale et perspectives

Les aimants quantiques sous champ magnétique offrent une physique particulièrement riche en montrant une multitude de phases conventionnelles et exotiques. Pourtant l'étude de ces matériaux est difficile à effectuer et nous proposons la dérivation de hamiltoniens effectifs afin de capturer les propriétés essentielles de basse énergie du système. Dans ce but, nous utilisons la méthode non perturbative « Contractor Renormalization (CORE) » qui permet de réduire la complexité du problème en tronquant son espace de Hilbert.

Après avoir introduit les notions indispensables des aimants quantiques sous champ magnétique, nous étudions différents systèmes de dimères couplés en appliquant la méthode CORE. Avec l'exception du cas d'une échelle de spin avec trois interactions du même ordre de grandeur, l'approche CORE se base sur deux états d'un dimère, à savoir le singulet et le triplet polarisé qui sont les degrés de basse énergie d'un dimère sous champ magnétique. Cette base intuitive est aussi utilisée pour différentes approches perturbatives et nous permet de dériver un modèle effectif qui s'interprète comme modèle de bosons de cœur dur. Par contre, l'approche perturbative est souvent limitée à des modèles avec une interaction largement dominante par rapport à d'autres interactions, tandis que l'approche CORE étant non perturbative montre des améliorations importantes pour des systèmes avec plusieurs interactions en compétition. Les modèles de l'échelle de spin, la bicouche de Heisenberg anisotrope et le réseau de Shastry-Sutherland que nous traitons dans cette thèse en sont des exemples.

Grâce aux modèles effectifs que nous dérivons dans cette thèse, nous effectuons une analyse précise de l'existence de plateaux d'aimantation. En analysant le comportement des échelles de spin fortement frustrés sous champ magnétique, nous testons un critère alternatif afin de choisir la base de CORE. En cas de doute, le critère alternatif, qui est le poids de la matrice densité réduite, s'avère plus fiable que le critère initial qui considère les énergies des états en question. Dans le cas de la chaîne de dimères orthogonaux pour des aimantations $m \leq \frac{1}{2}$, nous sommes capables de retracer une série infinie de plateaux d'aimantation et pour la bicouche de Heisenberg nous trouvons un plateau $m = \frac{1}{2}$ avec des moyens très modestes. En plus, pour ce dernier système, le modèle effectif à portée 4, qui se fonde sur une plaquette de quatre dimères, décrit des processus favorisant une phase supersolide. Enfin, notre étude du réseau de Shastry-Sutherland montre la stabilité de plusieurs plateaux à faible aimantation. Ces résultats sont de grande pertinence dans le contexte des expériences sur le composé $SrCu_2(BO_3)_2$. En raison de la réduction de l'espace de Hilbert,

nous effectuons des calculs pour des grands réseaux effectifs qui nous permettent de déduire quantitativement la stabilité de plateaux dans la limite thermodynamique. Pour ces réseaux effectifs, qui sont trop grands pour être traités avec la diagonalisation exacte, nous effectuons également une analyse de la structure des plateaux $m = \frac{1}{4}$ et $m = \frac{1}{3}$ montrant un bon accord avec les structures proposées dans la littérature.

Plusieurs modèles que nous abordons dans cette thèse ne sont pas accessibles à certaines des méthodes numériques qui constituent l'état de l'art dans le domaine des fermions fortement corrélés. Par exemple, la bicouche de Heisenberg et le réseau de Shastry-Sutherland étant des systèmes bidimensionnels ne peuvent pas être traités avec le DMRG. En plus, avec l'exception de la bicouche de Heisenberg anisotrope, les modèles considérés sont généralement frustrés ce qui exclut l'application du QMC. L'approche CORE s'avère très utile dans ce contexte en permettant de traiter des systèmes unidimensionnels et bidimensionnels, en présence d'interactions frustrantes et également en leur absence. Dans certains cas, ceci permet de dériver un modèle effectif non frustré que l'on peut étudier avec le QMC.

Pourtant, CORE n'est probablement pas capable de remplacer les méthodes établies. Comme une bonne connaissance de la physique du système est nécessaire pour un bon choix de la base de CORE, il s'agit plutôt d'une méthode complémentaire. Néanmoins, d'autres modèles peuvent être étudiés avec cette approche, comme d'autres systèmes de dimères couplés en présence ou absence d'un champ magnétique, par exemple. Il est également envisageable de dériver des modèles effectifs avec différents types de bosons pour le réseau carré de Heisenberg avec un échange cyclique à quatre spins.

Publications

Dans le cadre de cette thèse :

– A. Abendschein and S. Capponi,
Effective theory of magnetization plateaux in the Shastry-Sutherland model,
Phys. Rev. Lett. (sous presse), 4 pages, arXiv :0807.1071v1.
Référence [91].
– A. Abendschein and S. Capponi,
Contractor-Renormalization approach to frustrated magnets in a magnetic field,
Phys. Rev. B **76**, 064413 (2007), 13 pages, arXiv :cond-mat/0703586v2.
Référence [124].

Dans le cadre du stage de diplôme (« Diplomarbeit ») à l'université de Würzburg :

– A. Abendschein and Fakher F. Assaad,
Spectral functions of one-dimensional conductors ; comparison with experiments,
Phys. Rev. B **73**, 165119 (2006), 6 pages, arXiv :cond-mat/0601222v1.
Référence [130].

Bibliographie

[1] L. D. Landau, Sov. Phys. JETP **3**, 920 (1957).

[2] L. D. Landau, Sov. Phys. JETP **5**, 101 (1957).

[3] L. D. Landau, Sov. Phys. JETP **8**, 70 (1958).

[4] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).

[5] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer-Verlag, 1994).

[6] L. P. Lévy, *Magnétisme et Supraconductivité* (CNRS Editions - EDP Sciences, 1997).

[7] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **277**, 237 (1963).

[8] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963).

[9] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **281**, 401 (1964).

[10] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems*, Frontiers in Physics No. 82 (Addison-Wesley, 1991).

[11] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism* Series in Modern Condensed Matter Physics Vol. 5 (World Scientific, 1999).

[12] E. H. Lieb and F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).

[13] N. F. Mott, Proc. Phys. Soc. Sect. A **62**, 416 (1949).

[14] N. F. Mott, Rev. Mod. Phys. **40**, 677 (1968).

[15] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions* (Taylor and Francis, 1990).

[16] C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. **150**, 321 (1966).

[17] C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. **150**, 327 (1966).

[18] P. W. Anderson, Mater. Res. Bull. **8**, 153 (1973).

[19] S. Liang, B. Doucot, and P. W. Anderson, Phys. Rev. Lett. **61**, 365 (1988).

[20] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, Ann. Phys **16**, 407 (1961).

[21] I. Affleck, in *Fields, Strings and Critical Phenomena*, edited by E. Brézin and J. Zinn-Justin, Les Houches, Amsterdam, Elsevier Science Publishers, (1988).

[22] F. D. M. Haldane, J. Phys. C **15**, L1309 (1982).

[23] F. Haldane, Phys. Rev. Lett. **61**, 1029 (1988).

[24] M. Yamanaka, M. Oshikawa, and I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **79**, 1110 (1997).

[25] M. B. Hastings, Phys. Rev. B **69**, 104431 (2004).

[26] M. Oshikawa, M. Yamanaka, and I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **78**, 1984 (1997).

[27] I. Affleck and F. D. M. Haldane, Phys. Rev. B **36**, 5291 (1987).

[28] R. R. Singh and M. P. Gelfand, Phys. Rev. Lett. **61**, 2133 (1988).

[29] Y. Narumi *et al.*, Physica B **246**, 509 (1998).

[30] T. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).

[31] C. K. Majumdar and D. K. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, 1388 (1969).

[32] C. K. Majumdar, J. Phys. C **3**, 911 (1970).

[33] I. Affleck, D. D Gepner, H. J. Schulz, and T. Ziman, J. Phys. A **22**, 511 (1989).

[34] K. Okamoto and K. Nomura, Phys. Lett. A **169**, 433 (1992).

[35] R. Chitra, S. Pati, H. R. Krishnamurthy, D. Sen, and S. Ramasesha, Phys. Rev. B **52**, 6581 (1995).

[36] W. Shiramura *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 1548 (1998).

[37] M. Matsumoto, Phys. Rev. B **68**, 18403 (2003).

[38] K. Totsuka, Phys. Rev. B **57**, 3454 (1998).

[39] C. Ruegg *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 037207 (2004).

[40] K. Kodama, M. Takigawa, and H. Tanaka, Prog. Theor. Phys. Supp. **159**, 228 (2005).

[41] K. Takatsu, W. Shiramura, and H. Tanaka, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 1611 (1997).

[42] H. Kikuchi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **94**, 227201 (2005).

[43] H. Kikuchi *et al.*, Prog. Theor. Phys. Supp. **159**, 1 (2005).

[44] M. Ishii *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 340 (2000).

[45] T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Hikihara, Y. Takahashi, and M. Kaburagi, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 332 (2000).

[46] A. Honecker and A. Läuchli, Phys. Rev. B **63**, 174407 (2001).

[47] J. Schulenburg and J. Richter, Phys. Rev. B **65**, 054420 (2002).

[48] E. Dagotto and T. M. Rice, Rev. Mod. Phys. **271**, 618 (1996).

[49] Z. Hiroi, M. Azuma, M. Takano, and Y. Bando, J. Solid State Chem **95 :1**, 230 (1991).

[50] M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, and Y. Kitaoka, Phys. Rev. Lett. **73**, 3463 (1994).

[51] M. Troyer, H. Tsunetsugu, and D. Würtz, Phys. Rev. B **50**, 13515 (1994).

[52] S. Gopalan, T. M. Rice, and M. Sigrist, Phys. Rev. B **49**, 8901 (1994).

[53] T. M. Rice, Z. Phys. B **103**, 165 (1997).

[54] M. Matsuda, K. Katsumata, R. S. Eccleston, S. Brehmer, and H. J. Mikeska, Phys. Rev. B **62**, 8903 (2000).

[55] M. Matsuda, K. Katsumata, R. S. Eccleston, S. Brehmer, and H. J. Mikeska, J. Appl. Phys. **87**, 6271 (2000).

[56] A. Gozar and G. Blumberg, *Collective Spin and Charge Excitations in* $(Sr,La)_{14-x}Ca_xCu_{24}O_{41}$, Frontiers in Magnetic Materials, p. 653, Springer, (2005).

[57] G. Chaboussant *et al.*, Phys. Rev. B **55**, 3046 (1997).

[58] G. Chaboussant *et al.*, Eur. Phys. J. B **6**, 167 (1998).
[59] G. Chaboussant *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 2713 (1998).
[60] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys **5**, 544 (1950).
[61] J. M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963).
[62] M. Clémancey *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 167204 (2006).
[63] S. Capponi and D. Poilblanc, Phys. Rev. B **75**, 092406 (2007).
[64] C. A. Hayward, D. Poilblanc, and L. P. Lévy, Phys. Rev. B **54**, R12649 (1996).
[65] M. Klanjšek *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 137207 (2008).
[66] T. Giamarchi, *Quantum Physics in one Dimension*, International series of monographs on physics No. 121 (Oxford University Press, Oxford, 2004).
[67] M. Jaime *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 087203 (2004).
[68] K. K. Ng and T. K. Lee, Phys. Rev. Lett. **97**, 127204 (2006).
[69] N. Laflorencie and F. Mila, Phys. Rev. Lett. **99**, 027202 (2007).
[70] P. Sengupta and C. D. Batista, Phys. Rev. Lett. **98** (2007).
[71] J.-D. Picon *et al.*, arXiv :0807.4190v1 (unpublished).
[72] R. Coldea *et al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5377 (2001).
[73] A. A. Katanin and A. P. Kampf, Phys. Rev. B **66**, 100403 (2002).
[74] M. Lee, M. S. Choi, and M. Y. Choi, Phys. Rev. B **60**, 10455 (1999).
[75] B. S. Shastry and B. Sutherland, Physica B **108**, 1069 (1981).
[76] B. Sutherland and B. S. Shastry, J. Stat. Phys. **33**, 477 (1983).
[77] S. Miyahara and K. Ueda, J. Phys. : Condens. Matter **15**, R327 (2003).
[78] H. Kageyama *et al.*, Phys. Rev. Lett. **82**, 3168 (1999).
[79] K. Onizuka *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 1016 (2000).
[80] K. Kodama *et al.*, Science **298**, 395 (2002).
[81] M. Takigawa *et al.*, Physica B **346**, 27 (2004).
[82] S. E. Sebastian *et al.*, arXiv :0707.2075v1 (unpublished).
[83] F. Levy *et al.*, Europhysics Letters (EPL) **81**, 67004 (2008).
[84] M. Takigawa *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 037202 (2008).
[85] A. Zorko, D. Arčon, H. van Tol, L. C. Brunel, and H. Kageyama, Phys. Rev. B **69**, 174420 (2004).
[86] K. Kodama *et al.*, J. Phys. : Condens. Matter **17**, L61 (2005).
[87] O. Cepas *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 167205 (2001).
[88] S. Miyahara *et al.*, Phys. Rev. B **75**, 184402 (2007).
[89] K. Sparta *et al.*, Eur. Phys. J. B **19**, 507 (2001).
[90] J. Dorier, K. P. Schmidt, and F. Mila, arXiv :0806.3406v1 (unpublished).
[91] A. Abendschein and S. Capponi, Phys. Rev. Lett. (sous presse), arXiv :0807.1071v1 .

[92] S. Haravifard *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 247206 (2006).
[93] M. S. Kim, M. C. Bennett, and M. C. Aronson, Phys. Rev. B **77**, 144425 (2008).
[94] S. Yoshii *et al.*, J. Magn. and Magn. Mat. **310**, 1282 (2007).
[95] S. Michimura *et al.*, Physica B **378-380**, 596 (2006).
[96] S. Yoshii *et al.*, J. Phys. : Conf. Series **51**, 59 (2006).
[97] F. Iga *et al.*, J. Magn. and Magn. Mat. **310**, e443 (2007).
[98] M. Moliner, D. C. Cabra, A. Honecker, P. Pujol, and F. Stauffer, arXiv :0809.5249v1 (unpublished).
[99] H. Kageyama *et al.*, Prog. Theor. Phys. Supp. **145**, 17 (2002).
[100] P. Jordan and E. P. Wigner, Z. Phys. **47**, 631 (1928).
[101] F. Mila, Eur. Phys. J. B **6**, 201 (1998).
[102] A. Honecker, F. Mila, and M. Troyer, Eur. Phys. J. B **15**, 227 (2000).
[103] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **45**, 1358 (1980).
[104] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **47**, 1840 (1982).
[105] R. Chitra and T. Giamarchi, Phys. Rev. B **55**, 5816 (1997).
[106] D. C. Mattis, *The Theory of Magnetism I*, Springer Series in Solid State Sciences Vol. 17, Springer, (1981).
[107] G. Misguich, T. Jolicoeur, and S. M. Girvin, Phys. Rev. Lett. **8709**, 097203 (2001).
[108] T. Jolicœur, G. Misguich, and S. M. Girvin, Prog.Theor.Phys.Suppl. **145**, 76 (2002).
[109] T. Matsubara and H. Matsuda, Prog. Theor. Phys. **16**, 569 (1956).
[110] T. Momoi and K. Totsuka, Phys. Rev. B **61**, 3231 (2000).
[111] A. A. Ovchinnikov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **64**, 342 (1973) et Sov. Phys. JETP **37**, 176 (1973) .
[112] T. Giamarchi and A. M. Tsvelik, Phys. Rev. B **59**, 11398 (1999).
[113] C. Lhuillier and G. Misguich, arXiv :cond-mat/0109146v1 (unpublished).
[114] C. Lhuillier and G. Misguish, *Frustrated Quantum Magnets*, Lecture Notes in Physics Vol. 595, p. 161, Springer, (2002).
[115] I. Affleck, Phys. Rev. B **43**, 3215 (1991).
[116] A. Honecker, J. Schulenburg, and J. Richter, J. Phys. : Condens. Matter **16**, S749 (2004).
[117] O. Penrose and L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).
[118] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, Phys. Rev. B **40**, 546 (1989).
[119] T. M. Rice, Science **298**, 760 (2002).
[120] G. V. Chester, Phys. Rev. A **2**, 256 (1970).
[121] H. Matsuda and T. Tsuneto, Suppl. Prog. Theor. Phys. **46**, 411 (1970).
[122] K. Liu and M. E. Fisher, J. Low Temp. Phys. **10**, 655 (1973).
[123] K. P. Schmidt, J. Dorier, A. Laeuchli, and F. Mila, Phys. Rev. Lett. **100**, 090401 (2008).
[124] A. Abendschein and S. Capponi, Phys. Rev. B **76**, 064413 (2007).

[125] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum Press, New York, 1981).

[126] S. Capponi, PhD thesis, Université Paul Sabatier (Toulouse III), (1999).

[127] A. Abendschein, Diploma thesis, Universität Würzburg (Germany), (2005).

[128] G. Roux, PhD thesis, Université Paul Sabatier (Toulouse III), (2007).

[129] H. A. Bethe, Z. Phys. **49**, 205 (1931).

[130] A. Abendschein and F. F. Assaad, Phys. Rev. B **73**, 165119 (2006).

[131] G. G. Batrouni, R. T. Scalettar, G. T. Zimanyi, and A. P. Kampf, Phys. Rev. Lett. **74**, 2527 (1995).

[132] G. G. Batrouni and R. T. Scalettar, Phys. Rev. Lett. **84**, 1599 (2000).

[133] F. Hébert *et al.*, Phys. Rev. B **65**, 014513 (2001).

[134] G. Schmid, S. Todo, M. Troyer, and A. Dorneich, Phys. Rev. Lett. **88**, 167208 (2002).

[135] P. Sengupta, L. P. Pryadko, F. Alet, M. Troyer, and G. Schmid, Phys. Rev. Lett. **94**, 207202 (2005).

[136] S. Miyahara and K. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 72 (2000).

[137] C. Knetter, A. Buhler, E. Müller-Hartmann, and G. S. Uhrig, Phys. Rev. Lett. **85**, 3958 (2000).

[138] E. Fradkin, Phys. Rev. Lett. **63**, 322 (1989).

[139] J. Ambjørn and G. W. Semenof, Phys. Lett. B **226**, 107 (1989).

[140] E. Fradkin, Phys. Rev. B **42**, 570 (1990).

[141] D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B **14**, 2239 (1976).

[142] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).

[143] D. Poilblanc, *Exact diagonalisation methods for models of strongly correlated fermions*, Lecture Notes in Physics Vol. 595, p. 161, Springer, (1997).

[144] N. Laflorencie and D. Poilblanc, *Simulations of Pure and Doped Low-Dimensional Spin-1/2 Gapped Systems*, Lecture Notes in Physics Vol. 645, pp. 227–252, Springer, (2004).

[145] A. Dorneich, PhD thesis, Universität Würzburg (Germany), (2001).

[146] C. Lanczos, J. Res. Natl. Bur. Stand. **45**, 255 (1950).

[147] E. R. Davidson, J. Comp. Phys. **17**, 87 (1975).

[148] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).

[149] S. R. White, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).

[150] U. Schollwöck, Rev. Mod. Phys **77**, 259 (2005).

[151] S. Capponi, A. Läuchli, and M. Mambrini, Phys. Rev. B **70**, 104424 (2004).

[152] M. Mambrini, PhD thesis, Université Paul Sabatier (Toulouse III), (2000).

[153] C. J. Morningstar and M. Weinstein, Phys. Rev. Lett. **73**, 1873 (1994).

[154] C. J. Morningstar and M. Weinstein, Phys. Rev. D **54**, 4131 (1996).

[155] J. Piekarewicz and J. R. Shepard, Phys. Rev. B **56**, 5366 (1997).

[156] M. Weinstein, Phys. Rev. B **63**, 174421 (2001).
[157] E. Berg, E. Altman, and A. Auerbach, Phys. Rev. Lett. **90**, 147204 (2003).
[158] R. Budnik and A. Auerbach, Phys. Rev. Lett. **93**, 187205 (2004).
[159] P. Li and S. Q. Shen, Phys. Rev. B **71**, 212401 (2005).
[160] E. Altman and A. Auerbach, Phys. Rev. B **65**, 104508 (2002).
[161] S. Capponi and D. Poilblanc, Phys. Rev. B **66**, 180503 (2002).
[162] K. G. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3174 (1971).
[163] K. G. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3184 (1971).
[164] C. Bloch, Nucl. Phys. **6**, 329 (1958).
[165] J. Des Cloizeaux, Nucl. Phys. **20**, 321 (1960).
[166] A. F. Albuquerque, H. G. Katzgraber, and M. Troyer, arXiv :0805.2290v1 (unpublished).
[167] A. F. Albuquerque, H. G. Katzgraber, and M. Troyer, Phys. Rev. B **78**, 014503 (2008).
[168] M. S. Siu and M. Weinstein, Phys. Rev. B **77**, 155116 (2008).
[169] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
[170] M. S. Siu and M. Weinstein, Phys. Rev. B **75**, 184403 (2007).
[171] M.-B. Lepetit and E. Manousakis, Phys. Rev. B **48**, 1028 (1993).
[172] J.-P. Malrieu and N. Guihéry, Phys. Rev. B **63**, 085110 (2001).
[173] P. Durand, Phys. Rev. A **28**, 3184 (1983).
[174] S. Evangelisti, P. Durand, and J. L. Heully, Phys. Rev. A **43**, 1258 (1991).
[175] M. Al Hajj, PhD thesis, Université Paul Sabatier (Toulouse III), (2005).
[176] S. Ôkubo, Prog. Theor. Phys. **12**, 603 (1954).
[177] A. Auerbach, in *Effective models for low-dimensional strongly correlated systems*, edited by G. G. *et al.*. Batrouni, Peyresq, France (2005), American Institute of Physics, (2006).
[178] I. Reiweger, Diploma thesis, Technische Universität Graz (Austria), (2006).
[179] K. Cichy and P. Tomczak, arXiv :0805.2171 (unpublished).
[180] L. Hulthén, Arkiv Mat. Astron. Fysik **26A**, 1 (1938).
[181] J. B. Fouet *et al.*, Phys. Rev. B **73**, 214405 (2006).
[182] B. Piaud, Compte rendue de stage de DEA, Université Paul Sabatier (Toulouse III), (2003).
[183] S. Capponi, Theor. Chem. Acc. **116**, 524 (2006).
[184] E. Altman, PhD thesis, Technion (Israel), (2002).
[185] R. Bendjama, B. Kumar, and F. Mila, Phys. Rev. Lett. **95**, 110406 (2005).
[186] N. B. Ivanov and J. Richter, Phys. Lett. A **232**, 308 (1997).
[187] J. Richter, N. B. Ivanov, and J. Schulenburg, J. Phys. : Condens. Matter **10**, 3635 (1998).
[188] A. Koga, K. Okunishi, and N. Kawakami, Phys. Rev. B **62**, 5558 (2000).
[189] A. Koga, A. Kawaguchi, K. Okunishi, and N. Kawakami, Prog. Theor. Phys. Supp. **145**, 52 (2002).

[190] E. Jordão Neves and J. Fernando Perez, Phys. Lett. A **114**, 331 (1986).
[191] Z. Weihong, J. Oitmaa, and C. J. Hamer, Phys. Rev. B **43**, 8321 (1991).
[192] S. Miyahara and K. Ueda, Phys. Rev. Lett. **82**, 3701 (1999).
[193] Z. Weihong, C. J. Hamer, and J. Oitmaa, Phys. Rev. B **60**, 6608 (1999).
[194] A. Koga and N. Kawakami, Phys. Rev. Lett. **84**, 4461 (2000).
[195] D. Carpentier and L. Balents, Phys. Rev. B **65**, 024427 (2001).
[196] C. H. Chung, J. B. Marston, and S. Sachdev, Phys. Rev. B **6413**, 134407 (2001).
[197] M. Al Hajj and J. P. Malrieu, Phys. Rev. B **72**, 094436 (2005).
[198] Z. Y. Meng and S. Wessel, arXiv :0808.3104v1 (unpublished).
[199] S. Miyahara and K. Ueda, Phys. Rev. B **61**, 3417 (2000).
[200] T. Momoi and K. Totsuka, Phys. Rev. B **62**, 15067 (2000).
[201] H. Kageyama *et al.*, Phys. Rev. Lett. **84**, 5876 (2000).
[202] S. Miyahara and K. Ueda, Physica B **281**, 661 (2000).
[203] E. Müller-Hartmann, R. R. P. Singh, C. Knetter, and G. S. Uhrig, Phys. Rev. Lett. **84**, 1808 (2000).
[204] C. Knetter and G. S. Uhrig, Eur. Phys. J. B **13**, 209 (2000).
[205] K. P. Schmidt, H. Monien, and G. S. Uhrig, Phys. Rev. B **67**, 184413 (2003).
[206] S. El Shawish and J. Bonca, Phys. Rev. B **74**, 174420 (2006).
[207] K. Totsuka, S. Miyahara, and K. Ueda, Phys. Rev. Lett. **86**, 520 (2001).

Remerciements

J’aimerais remercier Didier Poilblanc et Clément Sire qui ont successivement dirigé le laboratoire de physique théorique et m’y ont accueilli au cours de ces trois années. Également, je tiens à remercier tous les membres du laboratoire, et en particulier Sylvia et Sandrine.

J’ai eu le privilège de pouvoir effectuer mes études sous la direction de Sylvain Capponi à qui je dois mes remerciements les plus chaleureux. Son énorme compétence scientifique et ses vastes connaissances en programmation ont largement contribué à la réussite de cette thèse. Son humeur, sa patience et sa gentillesse laisseront les souvenirs les plus beaux de mon travail à Toulouse.

Jean-Paul Malrieu m’a fait l’honneur et le plaisir d’accepter de présider le jury et je lui en suis très reconnaissant. Je remercie sincèrement Claude Berthier et Frédéric Mila pour avoir accepté la laborieuse tâche de rapporteur. Étant deux spécialistes réconnus du côté expérimental et théorique, je leur suis très reconnaissant pour l’attention qu’ils ont consacrée à la lecture de ce manuscrit. Fakher Assaad m’a fait le plaisir de faire partie du jury de thèse et je le remercie en tant que superviseur de mes études à Würzburg d’avoir fait le trajet pour assister à la soutenance. Je remercie Pierre Pujol qui m’a également fait le plaisir de faire partie du jury.

Lors des trois ans de ma thèse, j’ai eu des discussions intéressantes et instructives avec Fabricio Albuquerque, Nicolas Laflorencie, Frédéric Mila, Kai Schmidt, Jean-David Picon et Julien Dorier à différentes occasions. J’ai largement profité de ces échanges et je les en remercie.

Je remercie les organisateurs et financiers du programme ÉGIDE qui m’ont permis de rester en contact avec mes amis et collaborateurs de l’université de Würzburg qui sont Christian, Lee, Jutta, Matthias, Thomas, . . . et Fakher, évidemment.

Je suis reconnaissant envers le laboratoire de m’avoir donné l’occasion de participer à différentes écoles d’été et conférences. Cela m’a permis de nombreuses discussions intéressantes avec Marion, Ludovic, Thomas, pour en nommer quelques uns.

Je tiens aussi à remercier Guillaume, Fabien T., Gaspard, Fabien C., Julien et Sylvain pour leur soutien lors des premiers mois après mon arrivée à Toulouse. Sans leur aide continu et leur patience inépuisable, ce travail aurait probablement été impossible.

Lors de mon séjour à Toulouse, j’ai fait la connaissance de nombreuses personnes que j’ai beaucoup appréciées : Andreas, Arnaud, Clément, Daniel, David, Dennis, Fabien, Fabien, Fabien, Fa-

heel, Gaspard, Guillaume, Jérémie, Julien, Lino, Lorand, Ludovic, Manuela, Matthieu, Nicolas, Samuel, Sylvain, Thomas, Thomas. Je remercie également Mike et Pauline, Sylvain, David et Nina, Yiquan et Florent, Susu et Jie.

J’aimerais remercier mes amis Alexander, Rawi, Matthias, Matthias et Sabine qui m’ont rendu visite à Toulouse.

Je remercie ma famille : Michael et Magali, Oma et Lina et mes parents, en particulier ma mère. Mes études se sont toujours fondées sur leur soutien.
Merci à Yanjun qui m’a supporté, soutenu et éclairé lors de la rédaction et au-delà.

Résumé

Cette thèse aborde des questions relatives à la physique d'aimants quantiques unidimensionnels et bidimensionnels sous champ magnétique. En utilisant des méthodes numériques, nous considérons des systèmes de dimères couplés, décrits avec des modèles d'électrons fortement corrélés que sont l'échelle de spin, la chaîne de dimères orthogonaux en une dimension ainsi que la bicouche de Heisenberg et le réseau de Shastry-Sutherland en deux dimensions. L'objectif étant de dériver des hamiltoniens effectifs, nous nous servons de la méthode « Contractor Renormalization (CORE) », une technique non perturbative de renormalisation dans l'espace réel qui est capable de reproduire les propriétés de basse énergie du système tout en réduisant sa complexité. L'examen du modèle effectif, soit par des moyens analytiques soit numériquement en résolvant des systèmes effectifs avec la diagonalisation exacte, nous permet de conclure sur la physique du système, en particulier l'existence de plateaux d'aimantation. Nos résultats sont comparés avec l'étude numérique exacte du modèle microscopique d'une part et avec d'autres approches théoriques d'autre part. Grâce au fait que nous étudions des modèles caractérisant des composés réels, nous discutons également nos résultats en rapport avec des données expérimentales. Par exemple, nous proposons la stabilité de nouveaux plateaux d'aimantation sur le réseau de Shastry-Sutherland, ce qui motive son étude expérimentale.

Abstract

This thesis deals with the physics of one- and two-dimensional quantum magnets in a magnetic field. Using numerical methods, we consider coupled dimer systems which are described with models of strongly correlated electrons: namely, the spin ladder and the orthogonal dimer chain in one dimension as well as the Heisenberg bilayer and the Shastry-Sutherland lattice in two dimensions. In order to derive effective hamiltonians, we apply the method of "Contractor Renormalization (CORE)" which is a non-perturbative real-space renormalization technique capable of reproducing the low-energy physics of a system while reducing its complexity. The analysis of the effective model – either with analytical means or numerically by solving effective systems with exact diagonalisation – allows us to conclude on the physics of the system and in particular on the existence of magnetization plateaux. We compare our results both with exact numerical studies of the microscopic model and with other theoretical approaches. Since we study models characterizing real compounds, we also discuss our results in the light of experimental data. For example, we suggest the stability of new magnetization plateaux for the Shastry-Sutherland lattice which asks for experimental clarification.