



HAL
open science

Modeles de dimeres classiques et quantiques pour des systemes d'electrons correles bidimensionnels

Fabien Trouselet

► **To cite this version:**

Fabien Trouselet. Modeles de dimeres classiques et quantiques pour des systemes d'electrons correles bidimensionnels. Physique [physics]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2009. Français. NNT : . tel-00404146

HAL Id: tel-00404146

<https://theses.hal.science/tel-00404146>

Submitted on 15 Jul 2009

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: Université Toulouse III - Paul Sabatier
Discipline ou spécialité: Physique Théorique

Modèles de dimères classiques et quantiques pour
des systèmes d'électrons corrélés bidimensionnels

Thèse présentée et soutenue par Fabien TROUSSELET
le 26 juin 2009

JURY

Pierre PUJOL (Président)
Claudine LACROIX (Rapportrice)
Nic SHANNON (Rapporteur)
Peter FULDE (Examineur)
Federico BECCA (Examineur)
William KNAFO (Membre invité)
Didier POILBLANC (Directeur de thèse)

École Doctorale: Sciences de la Matière
Unité de Recherche: Laboratoire de Physique Théorique
Directeur: Didier POILBLANC

Remerciements

Je voudrais remercier toutes les personnes qui m'ont permis de mener à son terme cette thèse dans des bonnes conditions : en premier lieu Didier Poiblanç pour avoir accepté de diriger ma thèse voilà 3 ans et demi ; pour, pendant cette thèse, avoir guidé mes travaux dans une thématique très vaste, et m'avoir fait apprendre et mettre en pratique de nombreux concepts et techniques, directement ou par les écoles et conférences auxquelles j'ai eu la chance de participer. La pertinence de ses conseils, sa disponibilité, sa détermination à mener à bien les divers projets de cette thèse, m'ont beaucoup aidé.

Je remercie également Pierre Pujol, qui a informellement co-dirigé une bonne partie de cette thèse ; sa pédagogie, sa patience et sa grande connaissance de domaines complexes comme les théories conformes m'ont permis de percevoir la richesse des modèles et théories que j'ai eu l'occasion d'utiliser. Merci également à Fabien (Alet) pour ses conseils et son expertise numérique et des modèles de dimères classiques, et à Roderich Moessner pour sa participation éclairante à d'autres travaux présentés dans ce manuscrit.

Plus largement c'est à toute l'équipe Fermions Fortement Corrélés que j'adresse de sincères remerciements pour des conseils fréquents, que ce soit sur la physique, les techniques numériques, voire sur l'utilisation raisonnable des moyens informatiques du labo ! La bonne ambiance et le sérieux de cette équipe sont des qualités dont j'ai amplement profité.

Je remercie à nouveau Didier Poiblanç et au même titre Clément Sire, pour m'avoir accueilli dans le Laboratoire de Physique Théorique qu'ils ont successivement dirigé et m'avoir donc donné accès aux infrastructures et moyens de ce laboratoire. Merci également à Sylvia et Sandrine pour leurs supports indispensables, pour des problèmes administratifs et informatiques que j'aurais sinon vus comme des murs infranchissables. Merci également au personnel de l'IDRIS d'Orsay pour les moyens de calcul et l'assistance qui m'ont permis d'avoir les résultats dont je parle dans ce manuscrit.

Merci beaucoup à Claudine Lacroix et Nic Shannon d'avoir accepté de rapporter ce manuscrit, avec le temps de lecture que cela implique ; et aux autres membres du jury d'y avoir participé : c'était un grand honneur pour moi de pouvoir y compter Peter Fulde, et une chance de bénéficier de ses commentaires ainsi que de ceux de Federico Becca, et de William Knafo.

Je n'imagine pas ce qu'aurait été cette thèse sans l'entraide et la bonne humeur de mes compagnons de route ; merci donc aux thésards désormais docteurs qui ont rendu plus facile et agréable mon arrivée à Toulouse : Julien S., Guillaume, Andreas, Gaspard,

Fabien C., Faheel ; aux thésards actuels : Clément, Ludovic, Pépoune, Lorand, Daniel, David, Benoît, Jérémie, Sylvain ; et à ceux qui ne font pas partie de ces deux catégories : Samuel, Arnaud, Manuela, Lino, Octavien, Julien B. ; si j'en oublie, qu'ils ne s'en vexent pas. Plus largement merci à l'ensemble des membres du LPT et en fait de l'IRSAMC, pour l'ambiance conviviale de cet institut et l'énergie consacrée à animer et faire vivre la recherche au quotidien.

Hors du labo, merci à plein de gens qui ne liront probablement pas ces lignes mais qui, à Toulouse ou ailleurs, m'ont soutenu, conseillé, ou tout simplement fait passer des moments agréables, et en particulier à celles et ceux par qui j'ai pu écouter, voire parfois jouer à mon très humble niveau, toutes sortes de musiques qui ont enjolivé ces années. Et pour finir un grand merci à mes parents, qui m'ont donné le goût d'apprendre depuis l'enfance mais surtout qui ont fait de leur mieux pour m'aider dans les étapes successives de mes études.

Table des matières

1	La physique des dimères dans les systèmes à électrons fortement corrélés	10
1.1	Définitions élémentaires des modèles de dimères	10
1.1.1	Définition(s)	10
1.2	Un exemple didactique : les modèles d'Ising frustrés	11
1.3	Modélisation des phases non magnétiques dans les systèmes à fortes interactions antiferromagnétiques	13
1.3.1	Les différentes phases induites par les fortes corrélations	13
1.3.2	Construction d'un modèle effectif de dimères dans les phases de singulets à courte portée	15
1.4	Phases de singulets dans des systèmes à degrés de liberté orbitaux	20
1.5	Dimères quantiques et réseaux de jonctions Josephson	22
1.6	Interactions magnétiques frustrantes dans les structures de type pyrochlore	25
1.6.1	Composés à glace de spin et absence d'ordre magnétique à basse température	25
1.6.2	Modèle XXZ sur réseau pyrochlore : limite d'Ising	26
2	Criticalité dans les modèles de dimères classiques bidimensionnels	29
2.1	Traitement exact du modèle sans interaction	29
2.2	Interactions et ordres favorisés	32
2.3	Dimères sur réseaux bipartites et criticalité	34
2.3.1	Notions sur les théories conformes bidimensionnelles	34
2.3.2	Champ de hauteurs et secteurs topologiques sur un réseau bipartite	35
2.3.3	Approche perturbative la non-bipartacité	40
2.3.4	Modèle de dimères en interactions sur un réseau triangulaire anisotrope	42
2.4	Méthodes de matrices de transfert pour les dimères classiques	42
2.4.1	Définition de la matrice de transfert	44
2.4.2	Principe de la méthode des puissances	45
2.4.3	Apports de l'utilisation des invariances du modèle	46
2.4.4	Utilisation de la matrice de transfert hors d'une phase critique	49
2.5	Criticalité sur le réseau triangulaire anisotrope	51
2.5.1	Effets de l'introduction des liens diagonaux à interactions u finie	51

2.5.2	Effets des interactions frustrantes v	52
2.6	Transition directe entre les phases liquide et ordonnée	54
2.6.1	Stabilisation d'une phase ordonnée à basses températures	54
2.6.2	Estimation de la transition de mise en ordre	57
3	Modèles de dimères quantiques	62
3.1	Définition et particularités du modèle de Rokhsar-Kivelson	62
3.1.1	Définitions	62
3.1.2	Point de Rokhsar-Kivelson - correspondance classique-quantique	63
3.1.3	Correspondance quantique-classique à température finie; phase critique quantique	64
3.1.4	Secteurs topologiques et secteurs d'ergodicité	65
3.1.5	Un autre modèle de dimères quantiques sur réseau kagomé	66
3.2	Les différentes phases du modèle de Rokhsar-Kivelson	67
3.2.1	Phases alternées et dégénérescence entre secteurs topologiques	67
3.2.2	Phases colonnaires	69
3.2.3	Phases à plaquettes résonantes	69
3.2.4	Phase liquide du réseau triangulaire et condensation de visons	76
3.3	Excitations de vortex et de trous dans les modèles de dimères quantiques	77
3.3.1	Interprétation physique des trous et statistiques fermionique et bosonique	77
3.3.2	Modèle de dimères dopés en trous bosoniques	78
4	Phases de singlets résonants dans un système d'électrons corrélés	81
4.1	Du modèle de Hubbard étendu à un modèle de dimères	81
4.1.1	Définition et conséquences de fortes interactions sur site	81
4.1.2	Cas bosonique : une dérivation du modèle de Rokhsar-Kivelson	82
4.1.3	Modèle effectif pour des fermions à $n = 1/4$	83
4.1.4	Extension : modèle de type Rokhsar-Kivelson de fermions itinérants	85
4.1.5	Phases possibles du modèle $t_2 - W$	86
4.1.6	Analyse des symétries des phases cristallines du modèle	87
4.2	Traitement variationnel du modèle $t_2 - W$	89
4.2.1	Choix des fonctions d'onde variationnelles	89
4.2.2	Energies variationnelles et stabilité des différentes phases	89
4.2.3	Cas $W \geq 0$ et limites de l'approche variationnelle	91
4.3	Diagonalisation exacte dans un modèle de dimères à 2 couleurs	92
4.3.1	Diagonalisation exacte d'un modèle contraint : utilisation des contraintes locales	93
4.3.2	Utilisation des symétries	95
4.3.3	Algorithme de Lanczos	96
4.4	Identification des phases <i>MCPC-1</i> et <i>RSPC</i>	97
4.4.1	$W \ll - t_2 $: approche perturbative	97
4.4.2	Analyse complète du spectre de basse énergie	103
4.4.3	Corrélations de plaquettes dans les différentes phases ordonnées	106

5	Application d'un modèle de dimères à la transition metal-isolant sur le réseau damier	111
5.1	Phénoménologie de la transition de Mott	111
5.1.1	Isolants de Mott induits par les interactions	111
5.1.2	Caractérisations de la transition métal-isolant	112
5.2	Transition métal-isolant sur un réseau frustré	115
5.2.1	Motivations expérimentales : un métal fortement corrélé sur réseau pyrochlore	115
5.2.2	Etats métallique et isolant sur le réseau pyrochlore	115
5.2.3	Défauts de charge dans l'isolant	118
5.2.4	Définition d'un modèle effectif pour une transition métal-isolant	118
5.3	Méthodes numériques pour l'étude de la transition métal-isolant	120
5.4	Eléments de caractérisation de la transition métal-isolant sur réseau damier	124
5.4.1	Gap de charge et poids de Drude	124
5.4.2	Disparition (partielle ?) de l'ordre de charge	127
5.4.3	Conductivité optique dans l'isolant	129
5.4.4	Energie d'appariement des trous	130

Introduction

L'étude physique des solides implique a priori, même lorsqu'ils ont une structure cristalline bien déterminée, une grande variété de degrés de liberté qu'on peut en général difficilement inclure simultanément dans une même théorie : pour un problème donné il faut alors sélectionner les degrés de liberté les plus pertinents et une modélisation appropriée. Pour étudier le magnétisme d'un composé à électrons localisés sur les sites du réseau, on considère en général des modèles de spins, sur le réseau tridimensionnel lui-même ou, dans des plans si les couplages dans la direction transverse ne jouent pas un rôle essentiel. Même dans le cadre des systèmes bidimensionnels, la géométrie du réseau et la nature quantique des spins influe fortement les états ordonnés résultants - s'ils existent. En effet lorsque les interactions magnétiques sont frustrées entre elles ou par d'autres effets, des phases sans ordre de spin à longue distance, par exemple des phases où les électrons tendent à s'apparier en singulets pour maximiser les interactions d'échange de Heisenberg. Pour étudier de tels états, des modélisations ou les constituants élémentaires sont des dimères représentant ces singulets peuvent être appropriées.

Le chapitre 1 présente différents systèmes faisant intervenir le concept de dimères, qui ne représentent pas toujours le même objet physique suivant le cas. Si un modèle d'Ising frustré fait naturellement intervenir une représentation des liens frustrés en termes de dimères, qu'on présente d'abord pour illustrer ce concept, la modélisation d'une phase à liens de valence résonants par un modèle de dimères quantiques nécessitera un peu plus d'attention. Cette modélisation a été initiée il y a plus de 20 ans, principalement par les travaux de Rokhsar et Kivelson dans le contexte de la découverte des supraconducteurs à hautes températures critiques (cuprates) ; depuis, la physique des dimères quantiques a trouvé des applications dans des domaines plus ou moins éloignés de cette problématique initiale, comme les systèmes à dégénérescence orbitale. Un contexte encore différent, celui des systèmes dits à glace de spin sur réseau pyrochlore présentant des phases magnétiquement désordonnés à basses températures, motive également une approche par des modèles contraints, de dimères entre autres.

Le chapitre 2 aborde une famille de modèles de dimères dits *classiques*, avec des interactions à courte portée ; ici, ce sont les fluctuations thermiques qui conditionnent l'existence ou non d'une phase ordonnée. Les réseaux bipartites présentent une phase critique à hautes températures, qu'on interprète à l'aide d'une correspondance avec un modèle de hauteurs ; par des méthodes de matrice de transfert qu'on détaillera, exploitant l'invariance conforme de la phase critique, on déterminera entre autres sous

quelles conditions une telle phase peut exister sur un réseau triangulaire anisotrope. Le chapitre suivant 3, sur les modèles de dimères quantiques, présente essentiellement le modèle de Rokhsar et Kivelson et les principaux concepts associés ; on décrit ensuite différentes approches permettant d'expliquer l'existence, suivant la géométrie considérée et les paramètres de ce modèle, de diverses phases quantiques originales qu'on peut assimiler à des cristaux à liens de valence ; et aussi, sur le réseau triangulaire, d'une phase désordonnée présentant les propriétés d'un liquide *RVB*.

Les deux derniers chapitres forment un sous-ensemble de ce manuscrit, traitant de l'application de la physique des dimères à un système d'électrons en fortes interactions, décrits dans le cadre d'un modèle de Hubbard étendu, sur un réseau géométriquement frustré. Le réseau bidimensionnel (*damier*) qu'on considère présente, pour des remplissages électroniques spécifiques, des contraintes analogues à celles du réseau pyrochlore, et par des arguments basés sur des modèles contraints on peut envisager l'existence d'excitations de charge fractionnaire. Le chapitre 4 traite de la limite de fortes corrélations, où un modèle effectif de dimères à deux couleurs permet d'envisager des phases ordonnées à singulets résonants ; la caractérisation de ces phases pour une densité électronique $n = 1/4$ est réalisée principalement par une approche numérique de diagonalisation exacte dont on détaillera les méthodes et les résultats. Le chapitre 5 considère le cas d'interactions finies dans le modèle de Hubbard étendu, donc de fluctuations de charge par rapport aux configurations respectant les contraintes de dimères. On construit alors un modèle effectif basé sur ces contraintes mais autorisant un faible nombre de fluctuations ; dans ce cadre, des travaux en cours qu'on décrira tentent de déterminer (outre les limites de validité de ce modèle) quel scénario on peut attendre pour une transition de la phase ordonnée, isolante, déterminée au chapitre 4, vers un état métallique existant pour de faibles interactions.

Chapitre 1

La physique des dimères dans les systèmes à électrons fortement corrélés

On va commencer dans ce chapitre par définir les concepts généraux communs aux modèles de dimères (classiques et quantiques), dont on verra l'intérêt dans divers systèmes physiques ; après une discussion traitant des modèles d'Ising frustrés, permettant une dérivation simple d'un modèle de dimères mais d'intérêt surtout conceptuel, on évoquera les phases à liens de valence résonants à courte portée et le principe de la construction d'un modèle de dimères quantiques dans ce cas ; ensuite on abordera le cas de systèmes à dégénérescence orbitale, puis de certains systèmes frustrés sur réseau pyrochlore (et des systèmes bidimensionnels reliés) où les contraintes de dimères interviennent également sur chaque unité magnétiquement frustrée, en présence d'un champ magnétique.

1.1 Définitions élémentaires des modèles de dimères

1.1.1 Définition(s)

Une propriété essentielle des dimères, dans les modèles du même nom, est qu'ils sont définis sur les liens d'un réseau, à la différence des modèles de spins définis sur les sites. Les dimères joignent deux sites du réseau (a priori pas forcément plus proches voisins) et doivent satisfaire la contrainte suivante (contrainte de cœur dur) : chaque site doit être connecté par au maximum un dimère à un autre site [1]. Une configuration donnée consiste en la répartition des dimères sur les liens du réseau. Dans la situation la plus courante, à laquelle on se restreindra par la suite sauf mention contraire, on impose deux contraintes supplémentaires :

- les dimères connectent uniquement des sites plus proches voisins du réseau
- chaque site est connecté par *exactement* un dimère à un autre site, ce qui impose que le réseau ait un nombre N pair de sites et donc $N/2$ dimères dans chaque configuration

(si on autorise la présence de $2p$ sites non connectés à un dimère, donc $N/2 - p$ dimères sur le réseau, on parlera de *monomères* pour ces $2p$ sites).

Sur un réseau donné, si l est la longueur minimale d'une boucle constituée d'un nombre pair de liens tous distincts (donc $l \geq 4$), on appelle *plaquette*, toute surface entourée par une telle boucle : il s'agit de carrés et d'hexagones sur les réseaux du même nom, de losanges et d'hexagones sur les réseaux triangulaire et kagomé respectivement. Une plaquette peut alors être occupée par au maximum 2 ou 3 liens suivant le réseau, et dans ce cas de 2 manières possibles. On l'appelle alors plaquette *flippable* : un flip de dimères sur cette plaquette correspond à passer d'une de ces deux configurations à l'autre.

1.2 Un exemple didactique : les modèles d'Ising frustrés

On va voir ici que les dimères interviennent dans un cas bien connu du magnétisme frustré : les systèmes magnétiques frustrés de type Ising [2]. Le terme *frustré* exclut un modèle d'Ising à couplages uniformes entre premiers voisins sur un réseau bipartite, i.e. divisible en 2 sous-réseaux A et B tels que les sites de A soient voisins des sites de B et vice-versa. L'exemple le plus simple d'un modèle d'Ising frustré est sur le réseau triangulaire, avec des interactions d'Ising antiferromagnétiques entre premiers voisins, $J > 0$. Sur chaque triangle, au moins un lien doit être frustré, c'est à dire avec deux spins parallèles aux bouts du lien. A basse température les configurations favorisées sont celles n'ayant qu'un lien frustré par triangle (configuration de type $\uparrow\uparrow\downarrow$) - les configurations de plus haute énergie contiennent forcément des triangles $\uparrow\uparrow\uparrow$ ou $\downarrow\downarrow\downarrow$. Les configurations de basse énergie peuvent se représenter en dessinant un dimère sur le lien frustré et joignant les centre des triangles adjacents (voir Figure 1.1). Il s'agit donc, à un mapping de 2-à-1 près (un flip global des spins ne change pas la position des liens frustrés) des configurations de dimères sur réseau hexagonal. Ceci montre qu'il existe un nombre macroscopique de telles configurations, i.e. une entropie par spin finie à $T = 0$. On considère maintenant le même modèle avec un champ magnétique h transverse (par exemple suivant x si l'axe d'orientation des spins est z) :

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - h \sum_i \sigma_i^x \quad (1.1)$$

la somme étant sur les paires de sites i, j proches voisins. Le champ magnétique h déstabilise les configurations respectant la contrainte de dimères s'il est d'ordre J mais pas si $h \ll J$: un spin entouré par 3 dimères peut être retourné, ce qui donne une autre configuration de basse énergie où les liens frustrés (donc les dimères) ont été tournés de $\pi/3$: c'est le flip de dimères défini au paragraphe 1.1.1. En conséquence un champ faible stabilise, parmi les configurations de basse énergie, celles ayant le maximum de plaquettes hexagonales flippables. On verra au chapitre 3 que la phase résultante est

descriptible par une mise en ordre des dimères, qui brise des symétries de translation du réseau.

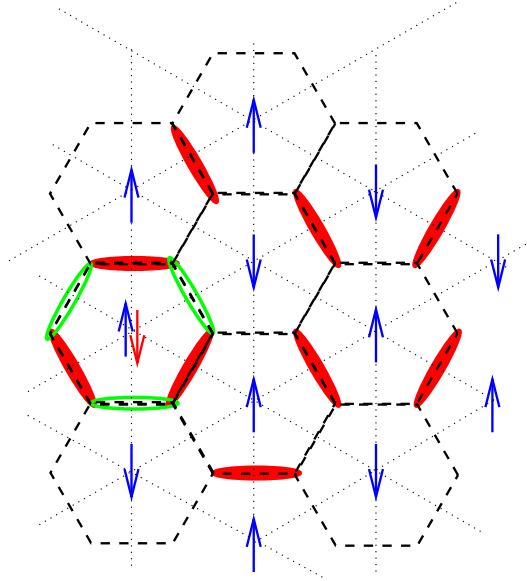


FIG. 1.1 – Configuration de basse énergie (spin en bleu) du modèle d’Ising triangulaire antiferromagnétique, avec la représentation associée en terme de dimères (rouges). Si le flip d’un spin (représenté en rouge) n’augmente pas le nombre de liens frustrés, il correspond à un flip de dimères (représentés en vert après le flip).

Un mapping équivalent, sur un modèle de dimères sur un réseau carré, peut être effectué à partir d’un modèle d’Ising artificiellement frustré, également sur le réseau carré : il faut pour cela que les couplages d’Ising J_{ij} soient non uniformes et tels que sur chaque carré entouré de 4 liens $i = 1..4$, le produit des 4 couplages (en fait de leurs opposés) soit négatif. On peut prendre :

$$H = J_0 \sum_{x,y} (\sigma_{x,y}^z \sigma_{x,y+1}^z + (-1)^{x+y} \sigma_{x,y} \sigma_{x+1,y}) \quad (1.2)$$

Dans ce cas les configurations de basse énergie ont sur chaque carré un lien frustré : soit le lien ferromagnétique horizontal a ses 2 spins parallèles ($\uparrow\uparrow$) soit un des 3 liens antiferromagnétiques est en configuration $\uparrow\downarrow$. Là encore, si on place des dimères perpendiculairement aux liens frustrés ils ne se touchent pas ; on a donc des configurations de dimères sur le réseau dual, carré également ; et ces configurations sont reliées par l’effet d’un champ magnétique transverse- ici la condition est qu’un 1 spin soit entouré par 2 dimères parallèles ; le flip défrustré les liaisons associées et frustre les 2 autres liaisons impliquant le spin, ce qui correspond cette fois à un flip des 2 dimères sur une plaquette du réseau dual.

1.3 Modélisation des phases non magnétiques dans les systèmes à fortes interactions antiferromagnétiques

1.3.1 Les différentes phases induites par les fortes corrélations

Ordre de Néel ou ordres non magnétiques dans le modèle de Heisenberg

Un autre type de systèmes physiques motivant l'utilisation de modèles de dimères sont les matériaux à fortes corrélations électroniques, mais sans ordre magnétique à longue distance. Un modèle typique utilisé pour décrire les fortes corrélations électroniques à courte portée est le modèle de Hubbard [3]. Sur un réseau donné, des électrons sans interactions peuvent être décrits par un modèle de type liaisons fortes à une orbitale par site (sauf si plusieurs orbitales dégénérées sont les plus hautes occupées), avec des termes de sauts $t_{i,j}$ correspondant au recouvrement entre les orbitales des sites i et j . Les interactions entre électrons peuvent être décrites en rajoutant au terme cinétique les intégrales coulombiennes $V_{i,j}$ entre sites proches i et j , ou pour des électrons de spin opposés sur le même site (U), ce qui donne le modèle de Hubbard étendu :

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c.c.) + U \sum_i n_{i,+} n_{i,-} + \sum_{i,j} V_{i,j} n_i n_j \quad (1.3)$$

La version standard du modèle de Hubbard consiste à garder seulement les sauts aux plus proches voisins ($t_{i,j} = t\delta(\vec{r}_{ij}, 1)$) et l'interaction sur site U - on verra plus loin que les termes négligés, notamment les interactions entre premiers voisins, peuvent être déterminantes à des remplissages n commensurables mais différents de 1. Néanmoins le modèle de Hubbard décrit bien la physique de nombreux composés à fortes corrélations (notamment si elles sont écrantées à des distances supérieures à la maille du réseau). Dans la limite de fortes corrélations, et pour un remplissage d'un électron par site, les électrons sont localisés avec une densité uniforme et un gap s'ouvre au niveau de Fermi, entraînant un état isolant (de Mott [4]), pour lequel on peut dériver un Hamiltonien effectif au second ordre en perturbation en t/U :

$$H_J = J \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 1/4) \quad (1.4)$$

où $J = 4t^2/U$. Il s'agit du Hamiltonien de Heisenberg, qui sur le réseau $2D$ carré prédit un état de Néel antiferromagnétique, avec un ordre magnétique à longue distance, caractérisé par un facteur de structure $S(\pi, \pi)$ de l'aimantation suivant z (ou un autre axe). L'état de Néel brise la symétrie $SU(2)$ de rotation des spins ; il en va de même sur le réseau hexagonal, avec également une aimantation finie sur chaque sous-réseaux (ces deux réseaux sont bipartites) ; un ordre antiferromagnétique est moins évident mais vérifié aussi sur le réseau triangulaire, bien que non bipartite - l'ordre magnétique est alors à 3 sous-réseaux. Les excitations à partir de ce type de fondamental sont non gappées dans la limite thermodynamique (sur un système de taille L^2 ces énergies d'excitation sont en C/L). Ceci est en accord avec la généralisation à 2 dimensions et plus,

1.3. MODÉLISATION DES PHASES NON MAGNÉTIQUES DANS LES SYSTÈMES À FORTES INTERACTIONS ANTIFERROMAGNÉTIQUES

par Hastings [5] du théorème de Lieb-Schultz-Mattis [6], qui dit entre autres que le fondamental d'un Hamiltonien de type Heisenberg, pour des spins demi-entiers, ne peut pas être ordonné et avec un gap fini (dans la limite thermodynamique). Si maintenant on considère le modèle de Heisenberg sur réseau kagomé, la situation est plus originale : le fondamental ne présente pas d'ordre magnétique, la question de sa nature exacte n'est actuellement pas tranchée [7]. Il peut s'agir d'un état ordonné à longue distance, mais non magnétique, appelé Cristal de Liens de Valences (Valence Bond Crystal, *VBC*). Dans cet état, les électrons sont appariés en singulets (à courte portée - éventuellement il peut exister des *VBC* avec des unités élémentaires de plus de 2 spins) formant une structure ordonnée, caractérisée par un gap fini ($O(J)$ dans un modèle de Heisenberg) aux excitations élémentaires de spin, et qui brise la symétrie de translation, respectant ainsi le théorème de Lieb-Schulz-Mattis. Un autre type d'état possible pour une phase non magnétique, entre autres dans le modèle de Heisenberg sur kagomé, est un liquide de spin, i.e. une phase où les corrélations de spin décroissent exponentiellement avec la distance comme dans un liquide, où la symétrie de translation n'est pas brisée. S'il s'agit d'un liquide de spin gappé, la vérification du théorème de Lieb-Schulz-Matthis impose alors une dégénérescence du fondamental de nature topologique, entre des états localement non distinguables.

Au plan expérimental, de nombreux composés présentent un ordre dimérisé, la brisure de symétrie du réseau étant induite par la géométrie des interactions (comme dans CaV_4O_9 ou $SrCu_2(BO_3)_2$) ou spontanée. Par contre l'identification de liquides de spin est plus délicate : on peut mentionner comme liquide de spin potentiels des composés comme $ZnCu_3(OH)_6Cl_2$ (Herbertsmithite) [8] ou $Cu_3V_2O_7(OH)_2 \cdot 2(H_2O)$ (Volborthite) [9], d'après des mesures de diffusion de neutrons, RMN, chaleur spécifique, etc.. indiquant l'absence conjuguée d'ordre magnétique et de gap de spin.

Phase *RVB*, dopage et supraconductivité

Pour décrire les états de type liquide de spin, on peut se baser sur une image (voir figure 1.2) où le réseau est couvert par des singulets entre des paires de sites à distances plus ou moins grandes, et construire un modèle effectif agissant dans l'espace de ces pavages de singulets. Une telle modélisation est aussi intéressante dans le contexte de la physique des cuprates, connus pour leurs propriétés de supraconduction non conventionnelle depuis les travaux de Bednorz et Müller [10]. Dans ces composés à structure de type perovskite, la supraconductivité résulte des plans CuO_2 où les atomes de cuivre, en configuration Cu^{2+} donc avec des spins 1/2 sur des réseaux carrés, bien décrits avec un terme d'échange J antiferromagnétique entre premiers voisins (remarquons que dans le modèle de Hubbard dont ils dérivent le terme de saut entre Cu^{2+} voisins ne vient pas du recouvrement direct entre les orbitales $d_{x^2-y^2}$ des cuivres, négligeable, mais du recouvrement t_{pd} entre celle-ci et les orbitales p des oxygènes intermédiaires : au second ordre en perturbation en t_{pd}/Δ où Δ est la différence d'énergie entre orbitales p et $d_{x^2-y^2}$, $t \sim t_{pd}^2/\Delta$). Sous l'influence d'un dopage en trous croissant (provenant de substitutions chimique entre les couches comme dans $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ ou d'insertion d'oxygènes dans

1.3. MODÉLISATION DES PHASES NON MAGNÉTIQUES DANS LES SYSTÈMES À FORTES INTERACTIONS ANTIFERROMAGNÉTIQUES

$YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$) le système perd son ordre magnétique puis un état supraconducteur apparaît avec T_c allant jusqu'à $\sim 100K$, suivant le composé, le dopage, et éventuellement la pression.

Dans ce contexte le système non dopé a d'après ce qui précède un ordre de Néel. Mais il a été proposé par Anderson [11] qu'un état à liens de valence résonants (phase *RVB*), bien que d'énergie par site légèrement supérieure à celle du fondamental sans dopage, est stabilisé pour des dopages faibles en trous, et donc l'état précurseur de la phase supraconductrice. Schématiquement, l'appariement des trous y est favorisé par celui des singulets dans l'état non dopé, puisque l'arrachage d'un singulet est plus favorable que l'arrachage de 2 électrons non appariés l'un à l'autre, brisant 2 singulets avec pour chacun un coût énergétique $\sim J$.

1.3.2 Construction d'un modèle effectif de dimères dans les phases de singulets à courte portée

Pour décrire le dopage d'une phase *RVB*, il est naturel de définir un modèle où les constituants élémentaires sont les singulets et non les spins. On peut représenter les singulets comme des dimères, à courte portée (pour représenter un état *RVB* avec des corrélations de spin à courte portée et quasiment nulles à des distances $\geq 2a_0$) ou de portée variable (définis avec cette fois la convention que dans $[i, j]$, $i \in A$ et $j \in B$), et un Hamiltonien effectif agit alors dans l'espace des pavages de dimères considérés. Un tel cadre permet d'envisager diverses phases non magnétiques des systèmes fortement corrélés : liquides de spin comme la phase *RVB*, mais aussi des états *VBC* correspondant à des pavages ordonnés de dimères. La difficulté dans la construction d'un tel modèle effectif vient de la non-orthogonalité des différentes configurations de singulets. Suivant le type de pavages auxquels on se restreint, on peut autoriser plus ou moins d'états possibles. Si on autorise des pavages de singulets à portées variables, on a une base nécessairement surcomplète, avec des dépendances linéaires. On peut s'en convaincre en considérant 4 sites $i = 1..4$ orientés tels que 1 et 3 sont sur le même sous-réseau : en notant $[i, j]$ le singulet $(\uparrow_i \downarrow_j - \uparrow_j \downarrow_i)/\sqrt{2}$ ($i < j$ par convention), les 3 pavages possibles sont linéairement dépendants :

$$[1, 2][3, 4] = 1/2([1, 4][2, 3] - [1, 3][2, 4]) \quad (1.5)$$

Ce type de base peut décrire des états magnétiques (un état de Néel est une superposition de tous les pavages bipartites de singulets à toute portée) comme non magnétiques : sur le réseau carré, un état où le poids d'un singulet entre deux sites varie en loi de puissance $r^{-\alpha}$ de leur distance r , est un type d'état *RVB*, désordonné, mais avec des corrélations de spin à décroissance algébrique, et très proche en énergie du fondamental ordonné [13]. Sur un système de N sites, bipartite avec des sous-réseaux A (sites $i \leq N/2$) et B (sites $i > N/2$), en considérant l'ensemble des pavages bipartites C , chaque pavage s'écrivant $[p_1, p_2][p_3, p_4] \dots [p_{N-1}, p_N]$ ($p_{2i-1} \leq N/2$ et $p_{2i} > N/2$) ; et en notant $h(m, n) = k|\vec{r}_n - \vec{r}_m|^\alpha$

1.3. MODÉLISATION DES PHASES NON MAGNÉTIQUES DANS LES SYSTÈMES À FORTES INTERACTIONS ANTIFERROMAGNÉTIQUES

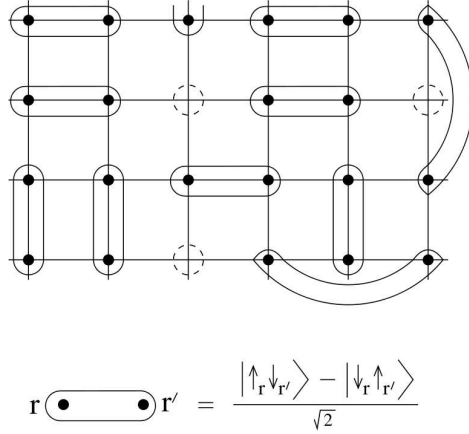


FIG. 1.2 – Allure schématique d’une phase à liens de valence résonants (*RVB*) sur un réseau 2D, les singulets étant ici entre sites à distance variable, et des sites non occupés (trous) sont considérés. Issu de [12].

un tel état s’écrit :

$$|\Psi_0\rangle = \sum_C \prod_{1 \leq i \leq N/2} h(p_{2i-1}, p_{2i}) [p_{2i-1}, p_{2i}] \quad (1.6)$$

Un autre type d’état *RVB* peut être construit en projetant sur l’espace des configurations sans double occupation, par le projecteur de Gutwiler $P = \prod_i (1 - n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow})$, une fonction d’onde $|\Psi_{BCS}\rangle$ obtenue par un traitement de type BCS [14] du Hamiltonien de Heisenberg (ou $t - J$ à dopage non nul) [12]; cet état peut être également décrit comme une combinaison linéaire de pavages de singulets.

On peut également (au prix d’exclure la possibilité d’états magnétiquement ordonnés) se restreindre à la base \mathbf{B} des pavages de singulets entre sites proches voisins. Celle-ci permet de bien décrire des phases ordonnées mais non magnétiques (*VBC*) d’une part, et de phases désordonnées de type *RVB* d’autre part. Au contraire d’une base de singulets à portée variable, la base \mathbf{B} est, sur la plupart des réseaux 2D usuellement considérés (de taille suffisamment grande), linéairement indépendante [15]. Reste un autre problème : la non-orthogonalité de cette base. On peut calculer facilement, sur un système fini de N sites, le recouvrement entre deux pavages $|\Psi_m\rangle$ et $|\Psi_n\rangle$ de singulets proches voisins, définis avec cette fois la convention que dans $[i, j]$, $i \in A$ et $j \in B$ (ce qui permet d’avoir tous les recouvrements positifs). Pour ce calcul on considère un graphe de transition consistant en la superposition des deux pavages. Ceci fait apparaître $p_{m,n} \leq N/2$ boucles $i = 1..p_{m,n}$ de longueur paire l_i (si un singulet est présent dans les deux pavages il constitue une boucle d’aire nulle et de longueur $l_i = 2$ par convention). Le recouvrement entre deux pavages peut indifféremment s’exprimer en fonction des longueurs de boucles [16] ou de leur nombre, et du facteur $x = 1/\sqrt{2}$ inhérent à la fonction d’onde d’un

1.3. MODÉLISATION DES PHASES NON MAGNÉTIQUES DANS LES SYSTÈMES À FORTES INTERACTIONS ANTIFERROMAGNÉTIQUES

singulet :

$$O_{m,n} = \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \prod_{1 \leq i \leq p_{m,n}} 2x^{l_i} \quad (1.7)$$

ou encore :

$$O_{m,n} = z^{2p_{m,n} - N} (z = x^2) \quad (1.8)$$

$O_{m,n}$ est donc toujours non nul, maximal pour deux pavages identiques et ensuite s'ils diffèrent seulement sur une boucle de longueur $l_i = 4$. On a ainsi défini une matrice de recouvrement \mathbf{O} , symétrique et (en supposant la base B linéairement indépendante) définie positive, donc on peut considérer les matrices \mathbf{O}^{-1} , $\mathbf{O}^{-1/2}$, etc.. Les états propres d'un Hamiltonien H^ϕ sont définis dans la base \mathbf{B} par l'équation $H^\phi |\Psi\rangle = E\mathbf{O}|\Psi\rangle$; il est alors plus pratique de définir une base orthonormale \mathbf{B}' , dont chaque élément $|C\rangle$ est associé à un pavage de singulets $|\Psi_C\rangle$ *habillé* par les autres pavages :

$$|C\rangle = \sum_m O_{c,m}^{-1/2} |\Psi_m\rangle \quad (1.9)$$

L'orthogonalité de cette base est assurée par $\mathbf{O}^{-1/2} \mathbf{O} \mathbf{O}^{-1/2} = \mathbf{I}$. L'Hamiltonien effectif H^{eff} a pour éléments de matrice dans la base \mathbf{B}' :

$$H_{C,C'}^{eff} = \sum_{m,n} O_{C,m}^{-1/2} \langle \Psi_m | H^\phi | \Psi_n \rangle O_{n,C'}^{-1/2} H_{C,C'}^{eff} = \sum_{m,n} O_{C,m}^{-1/2} H_{m,n}^\phi O_{n,C'}^{-1/2}$$

Les termes $O_{n,C'}^{-1/2}$ étant tous non nuls, l'utilisation pratique de l'Hamiltonien de dimères est à priori très complexe. L'idée à la base du modèle de dimères quantiques développé par Rokhsar et Kivelson [17] est de considérer le paramètre x dans l'équation 1.7 comme infinitésimal et de faire un développement limité de \mathbf{O} , puis de $\mathbf{O}^{-1/2}$, en puissances de x :

$$\begin{aligned} O_{m,n} &= \delta_{m,n} + 2x^4 \square_{m,n} + 2x^6 \epsilon_{m,n} + o(x^6) \\ O_{m,n}^{-1/2} &= \delta_{m,n} - x^4 \square_{m,n} - x^6 \epsilon_{m,n} + o(x^6) \end{aligned} \quad (1.10)$$

le terme $\square_{m,n}$ valant 1 si une seule boucle (et de taille minimale) différencie les deux pavages, et 0 sinon; de même $\epsilon_{m,n}$ vaut 1 ou 0 suivant que les configurations diffèrent par une boucle de taille $l_i = 6$. Ceci fait apparaître les termes de flip déjà vus au paragraphe 1.2, connectant des configurations différenciant entre elles sur une et une seule plaquette. Un développement similaire des éléments de matrice de H_ϕ puis du produit 1.10 permet finalement l'expression de H^{eff} à un ordre fini en x .

1.3. MODÉLISATION DES PHASES NON MAGNÉTIQUES DANS LES SYSTÈMES À FORTES INTERACTIONS ANTIFERROMAGNÉTIQUES

En appliquant ceci au Hamiltonien de Heisenberg d'amplitude J (on rajoute sur chaque lien un terme constant $3J/16$ pour que $\langle \Psi_c | H^\phi | \Psi_c \rangle = 0$, évitant ainsi des amplitudes de flip extensives dans H^{eff}) : les terme d'interactions sur une plaquette p dans $H^\phi : H_{c,c'}^\phi = -J_d = -9J/2x^4$ donnent, à l'ordre minimal en x , un terme de flip de même amplitude $-J_d$ dans H^{eff} . On dérive de la même manière un terme diagonal dans \mathbf{B}' : pour une configuration $|C\rangle$ connectée sur une boucle 4 (plaquette flippable p) à $|C'\rangle$, les termes d'interaction sur la plaquette entrent dans (toujours à l'ordre minimal en x) :

$$\langle C | H^{eff,p} | C \rangle = O_{C,C'}^{-1/2} H_{c',c}^\phi O_{C,C}^{-1/2} + c.c. = 2 \cdot (-x^4) \cdot (-J_d) = 9Jx^8 \quad (1.11)$$

Ceci définit l'amplitude V ($= J_d/2$ ici) d'un terme potentiel comptant le nombre de plaquettes flippables n_{fl} . Le Hamiltonien effectif résultant de ces deux termes s'exprime :

$$H_{RK} = J_d \sum_{C,C'} |C\rangle \langle C' | \square_{C,C'} + V \sum_C n_{fl}(C) |C\rangle \langle C| \quad (1.12)$$

Une autre approche [20], basée sur un développement en puissances de $z = x^2$ mais en partant de l'équation 1.8 (où la puissance de z est désormais le nombre de boucles et non la moitié de leur longueur cumulée : J_d et V sont alors d'ordres respectifs 2 et 4 en z), fait apparaître des termes d'ordre non minimal en z correspondant à des graphes non connexes (par exemple deux boucles i, j telles que $l_i = l_j = 4$ contribuent en z^4 dans \mathbf{O} et H^ϕ). Ce type de termes n'apparaît pas explicitement dans H^{eff} mais on doit en tenir compte pour calculer exactement l'amplitude des termes de type $\epsilon_{m,n}$ et d'ordres supérieurs dans le Hamiltonien effectif.

Mentionnons ici une dérivation similaire à celle de Rokhsar et Kivelson, en partant du Hamiltonien de Heisenberg dans la base des singulets proches voisins, mais sur le réseau kagomé. Ici, aucune convention d'orientation des liens ne peut amener la matrice des recouvrements à avoir tous ses termes de même signe. En orientant sur chaque hexagone les 6 liens l'entourant dans le même sens, par exemple horaire, on obtient pour le recouvrement de deux configurations $|\Psi_m\rangle$ et $|\Psi_n\rangle$ la formule suivante (le produit étant toujours sur les boucles) :

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \prod_{1 \leq i \leq \rho_{m,n}} (2x^{l_i} (-1)^{1+n_i+l_i/2}) \quad (1.13)$$

Ici, n_i est le nombre d'hexagones dans la boucle et $x = 1/\sqrt{2}$ comme précédemment. On verra par la suite qu'il est intéressant de considérer toutes les boucles de longueur $l_i \leq 12$ (et n'entourant qu'un seul hexagone - des boucles $l_i = 12$ entourant 2 hexagones existent aussi), ce qui constitue au total 32 boucles distinctes (certaines étant équivalentes à une rotation près). La valeur de $\langle \Psi_m | H^\phi | \Psi_n \rangle$ se déduit comme précédemment et est donnée dans le tableau 1.3 issu de [18] .

1.3. MODÉLISATION DES PHASES NON MAGNÉTIQUES DANS LES SYSTÈMES À FORTES INTERACTIONS ANTIFERROMAGNÉTIQUES


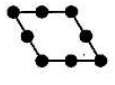
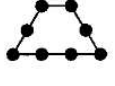

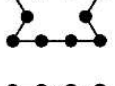
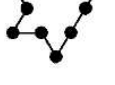

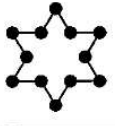
Loop α	$L/2$	$h_\alpha(x)$
	3	$-3yx^3 = -3/4$
	4	$yx^4(4-y) = 1/4$
	4	$yx^4(4-y) = 1/4$
	4	$yx^4(4-y) = 1/4$
	5	$yx^5(2y-5) = -1/16$
	5	$yx^5(2y-5) = -1/16$
	5	$yx^5(2y-5) = -1/16$
	6	$yx^6(6-3y) = 0$

FIG. 1.3 – Les différents types de boucles entourant un seul hexagone sur le réseau kagomé, et les amplitudes effectives de flip h_α dérivées du Hamiltonien de Heisenberg (avec $J = 1$). La fugacité des boucles $y = 2$ est considérée comme un paramètre supplémentaire.

Les dérivations précédentes ont l'avantage de définir un Hamiltonien générique (en laissant libre le paramètre V/J_d) qu'on étudiera plus en détail dans le chapitre 3 ; mais l'inconvénient de reposer sur un développement où on suppose $x = 1/\sqrt{2} \ll 1$. On peut dériver le modèle de Rokhsar et Kivelson de manière plus contrôlée en partant d'une base de singulets non $SU(2)$ mais $SU(N)$ et en prenant la limite $N \rightarrow \infty$ [19] ; ou encore décorer le réseau en rajoutant sur chaque lien $2R$ sites [15]. Des pavages distincts de singulets couvrant le réseau décoré ont un recouvrement, à l'ordre le plus bas en x , en x^{4R} correspondant à des boucles sur une plaquette (pour le réseau carré), et les termes sous-dominants, correspondant à des boucles plus larges sont en $O(x^{6R})$. En faisant tendre R vers l'infini (mais x restant fixé à $1/\sqrt{2}$) les seconds sont donc négligeables par rapport aux premiers, et le terme 1.12 est bien retrouvé.

Ces dérivations peuvent se généraliser à d'autres réseaux, avec des termes de flips sur des boucles plus larges ($J_d \sim Jx^6$ pour des flips sur des hexagones, sur les réseaux hexagonal et kagomé), toujours en supposant l'absence de dépendance linéaire dans la base B des pavages de singulets proches voisins. On peut aussi inclure, pour une approximation moins grossière, des termes cinétiques en x^6 (ou d'ordre supérieur..) provenant de boucles plus larges dans les recouvrements entre 2 pavages de singulets. Dans tous les cas, un modèle de type H_{RK} (voir équation 1.12) est bien approprié à l'étude de phases à corrélations de spin à courtes portée, pour étudier la nature et la stabilité relative de phases VBC d'une part, et de phases désordonnées de type RVB d'autre part.

1.4 Phases de singulets dans des systèmes à degrés de liberté orbitaux

On a jusqu'ici considéré des situations où les électrons en interaction étaient, localisés ou non, dans un seul type d'orbitale. Or, dans de nombreux composés magnétiques, on doit considérer plusieurs orbitales par site. Notamment, dans des oxydes de métaux de transition, les orbitales à prendre en compte sont les orbitales d , 5 fois dégénérées pour un ion isolé ; un environnement octaédrique (typiquement d'anions oxygènes) lève cette dégénérescence en deux groupes t_{2g} et e_g , et suivant le remplissage, un électron a le *choix* entre 2 orbitales e_g (cas de $LiNiO_2$ ou $NaNiO_2$ avec des ions Ni^{3+} en configuration $t_{2g}^6 e_g^1$ [21]) ou entre 3 orbitales t_{2g} (cas de $NaTiO_2$ avec des ions Ti^{3+} en configuration t_{2g}^1 [22, 23, 24]). Dans les cas cités, on peut considérer ces ions comme dans des plans découplés, occupant dans ces plans un réseau triangulaire. Ceci laisse a priori deviner que les différentes interactions entre électrons voisins peuvent être frustrantes et empêcher une mise en ordre simultanée des degrés de libertés orbitaux et de spin.

La description de ces systèmes part généralement d'un modèle de Hubbard à plusieurs orbitales α , incluant un couplage J_H de Hund (généralement > 0) et des sauts de paires entre orbitales du même site (aussi d'ordre J_H). La forme typique du Hamiltonien à

considérer est :

$$\begin{aligned}
 H_0 = & - \sum_{\alpha} t_{\alpha} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\alpha,\sigma}^{\dagger} c_{j,\alpha,\sigma} + c.c.) - U/2 \sum_i (\sum_{\alpha,\sigma} n_{i,\alpha,\sigma})^2 + J_H \sum_{i,\alpha} n_{i,\alpha,\uparrow} n_{i,\alpha,\downarrow} \\
 & + J_H \sum_i \sum_{\alpha \neq \beta} [-\vec{S}_{i,\alpha} \cdot \vec{S}_{i,\beta} + 3/4 n_{i,\alpha} n_{i,\beta} + (c_{i,\alpha,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\alpha,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\beta,\downarrow} c_{i,\beta,\uparrow} + c.c.)] \quad (1.14)
 \end{aligned}$$

(Ici les sauts ne sont qu'entre orbitales de même couleur α ; il se peut en fait que d'une orbitale donnée un électron ne puisse sauter au site voisin que vers une orbitale différente, mais unique pour des raisons de symétrie). On considère ensuite, comme pour dériver le modèle de Heisenberg d'un modèle mono-orbitalaire, la limite de fortes interactions $|t_{\alpha}| \ll U, J_H$, ce qui définit un Hamiltonien effectif (dit de Kugel-Khomskii [25]) n'agissant que sur le spin et les degrés de liberté orbitaux. L'expression de cet Hamiltonien effectif est en général assez longue ; lorsque deux orbitales sont en jeu ($\alpha = 1, 2$ ce qui est le cas pour des orbitales e_g) il est alors utile de définir des opérateurs de pseudospin, agissant sur les degrés de liberté orbitaux :

$$\begin{aligned}
 T_{i,z} &= \sum_{\sigma} n_{i,1,\sigma} - n_{i,2,\sigma} \\
 T_{i,x} &= \sum_{\sigma} (c_{i,1,\sigma}^{\dagger} c_{i,2,\sigma} + c.c.) \quad (1.15)
 \end{aligned}$$

et une définition similaire pour $T_{i,y}$. Si 3 orbitales sont actives, mais deux paires d'orbitales seulement sont à prendre en compte pour un lien $\langle i, j \rangle$ donné, il faut définir des opérateurs propres au lien, ce qui permet d'utiliser un formalisme similaire. Il apparaît alors dans l'Hamiltonien effectif des produits de termes de couplage des spins et des pseudospins, dont des termes du type $(\vec{T}_i \cdot \vec{T}_j - 1/4)(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + 3/4)$ ou $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 1/4)(\vec{T}_i \cdot \vec{T}_j + 3/4)$. La dimérisation est alors favorisée par rapport au cas à une orbitale : un singulet de spin est d'autant plus facilement formé sur une liaison qu'il s'accompagne d'une configuration triplet de pseudo-spin. Dans une approche variationnelle (ou de champ moyen) consistant à découpler les termes de spin et de pseudo-spin, on trouve dans le diagramme de phases d'un tel modèle (i.e. en fonction des paramètres J_H/J et t_2/t_1) un grand nombre de pavages de dimères où chaque dimère représente un singulet de spin - triplet de pseudospin (ou éventuellement l'inverse [22]). Des phases ordonnées (par exemple à colonnes de dimères alignés) sont généralement les plus favorisées (voir par exemple ceux sur la figure 1.4-haut), mais le grand nombre de pavages d'énergies quasi-identiques dans cette approche de champ moyen incite à dériver un modèle de dimères effectif sans cette approximation, et couplant ces différents états. Un tel modèle a été étudié pour le cas de $LiNiO_2$ [26] : en comparaison avec le modèle de type Rokhsar-Kivelson 1.12 (avec, sur le réseau triangulaire, des flips et termes d'interaction sur des losanges) celui-ci inclut aussi des termes de flips de 3 dimères sur des boucles triangulaires. Une phase désordonnée, de type *RVB*, a été identifiée dans une large gamme de paramètres du modèle, et peut être reliée à l'absence conjuguée d'ordre magnétique et de distortion de type Jahn-Teller (signalant une mise en ordre des orbitales) dans $LiNiO_2$.

La situation est un peu plus simple quand on se restreint à un Hamiltonien effectif dépendant toujours des états de spin et orbitales sur chaque site, mais diagonal dans l'espace des états orbitales. De tels modèles ont été étudiés dans des systèmes à un électron d sur 3 orbitales t_{2g} dégénérées [23, 24] pour divers composés. Dans un tel Hamiltonien effectif du type [23] :

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} (J(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - 1/4)O_{i,j} - (kJ + J_H \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)O'_{i,j}) \quad (1.16)$$

où $O_{\langle i,j \rangle}$ est un projecteur sur les états où les deux orbitales de i et j actives sur le lien $\langle i, j \rangle$ sont occupées, et $O'_{\langle i,j \rangle}$ projette sur les états où une seule des deux est occupée. Le modèle contient alors essentiellement une partie antiferromagnétique, qui favorise des pavages de singulets (et ne couple pas des singulets voisins puisque le couplage ferait intervenir des orbitales qui sont vides) et une partie ferromagnétique. La première favorise un nombre macroscopique de pavages de singulets premiers voisins, et on peut expliquer une levée de dégénérescence entre les différents pavages soit par un traitement perturbatif des couplages ferromagnétiques, soit considérant des effets de couplage magnétoélastique au réseau, permettant de comprendre que soient favorisés des états ordonnés dimérisés (VBC) comme dans $MgTi_2O_4$ [24].

1.5 Dimères quantiques et réseaux de jonctions Josephson

On va ici décrire succinctement des réalisations de modèles de dimères non dans des composés purs, mais dans des réseaux électriques comprenant des unités supraconductrices, donc des paires de Cooper ; on va voir qu'un arrangement approprié de ces unités (ou îlots), et des échelles d'énergie régissant la dynamique des paires de Cooper, fait émerger les contraintes de dimères et offre des possibilités d'applications pratiques de modèles de type Rokhsar-Kivelson.

Les réseaux de jonctions Josephson sont constitués d'îlots supraconducteurs couplés entre eux par effet Josephson [27] : si deux îlots voisins ont des phases respectives ϕ_1 et ϕ_2 , et sont séparés par une barrière non supraconductrice d'épaisseur suffisamment faible, il existe un courant de paires de Cooper tunnelant à travers la barrière, d'intensité $I = I_c \sin(\phi_2 - \phi_1)$ où I_c est le courant Josephson caractéristique de la barrière. Considérons un système d'îlots en Y, i.e. avec 3 branches chacun, 2 îlots voisins étant *quasi-joints* par 2 de leurs branches respectives (voir figure 1.5), la barrière entre les 2 définissant une capacité C_b et un courant Josephson I_b , d'où des échelles d'énergie de charge sur un îlot $E_b^c = \frac{2e^2}{C_b}$ et d'énergie Josephson $E_b^J = \frac{\hbar I_b}{4\pi e}$. Une structure possible [28] consiste en des îlots répartis de manière à former un réseau triangulaire d'hexagones, avec 6 îlots se joignant sur chaque hexagone. Les énergies $E_h^{C/J}$ à l'intérieur d'un hexagone sont a priori distinctes de celles correspondant à la jonction de 2 îlots d'hexagones différents $E_l^{C/J}$; on peut ainsi choisir E_h^C suffisamment faible pour joindre les 6 îlots d'un hexagone en un îlot géant, connecté à la masse par une jonction de capacitance $C_Y \ll C_l$ telle qu'on n'ait qu'une demi-paire de Cooper par hexagone. Avec une grande énergie J_l associée

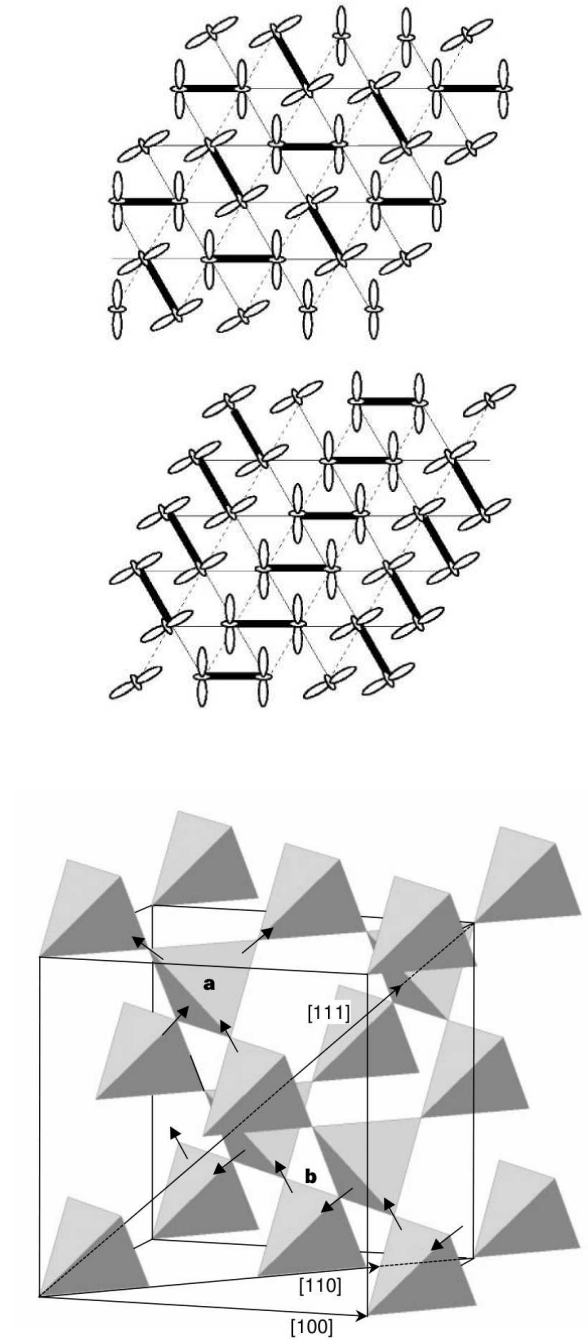


FIG. 1.4 – En haut : Deux états dimérisés parmi ceux de basse énergie (d’après un calcul variationnel) dans $LiNiO_2$ - aux sites du réseau triangulaire sont des ions Ni . D’après [21]. En bas : Structure de type pyrochlore dans les composés à glace de spin, avec des spins d’Ising (ions de terre rare) couplés par des interactions d’Ising ferromagnétiques favorisant les configurations de type ($2\ in-2\ out$) (a) sur les tétraèdres. D’après [32].

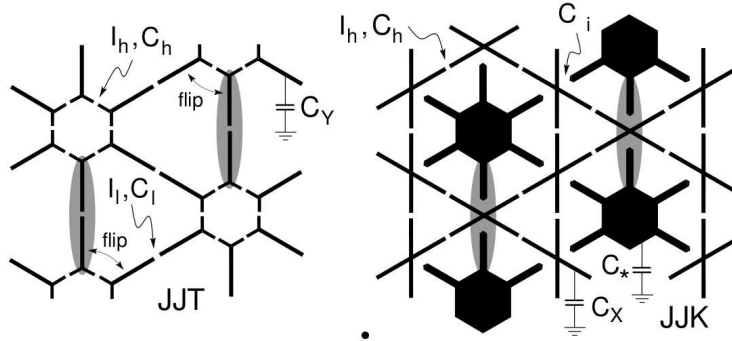


FIG. 1.5 – Structures à base d’îlots supraconducteurs en Y (à gauche) ou en X (à droite) couplés entre eux par effet Josephson à travers des jonctions b ($= h, l, ..$ suivant le cas) avec des intensités Josephson I_b associées, ainsi que des capacités C_b (et également des capacités C_X ou C_Y entre les îlots et la masse du système). Pour des valeurs appropriées de ces paramètres les paires de Cooper représentées soit entre 2 îlots Y soit sur des îlots X peuvent êtres vues comme des dimères dans un modèle effectif de dimères quantiques. Issu de [28]

au couplage tunnel par la jonction entre 2 îlots d’hexagones voisins, on fait en sorte que chaque paires de Cooper soit délocalisée sur les 2 îlots entourant cette jonction, i.e. sur un lien du réseau triangulaire dont les hexagones sont les sites. On peut associer chaque configuration de charge définie par l’ensemble de ces contraintes à une configuration de dimères sur ce réseau triangulaire, où un dimère représente une paire de Cooper.

L’effet d’une grande capacité C_h (donc d’une énergie de charge $E_h^C \ll E_l^C$) et d’un faible couplage Josephson entre îlots d’un même hexagone $E_h^J \ll E_l^J$ induit des termes respectivement diagonaux et hors diagonaux dans un Hamiltonien effectif décrivant la dynamique à l’intérieur des configurations de charge précédemment définies ; on a en fait une réalisation du modèle de dimères quantique de Rokhsar-Kivelson sur le réseau triangulaire, avec un terme de flip de 2 paires de Cooper voisines (chacune *pivotant* autour d’un hexagone dans le flip) d’amplitude $J_{eff} \sim (E_h^J)^2 / E_l^J$ et $V_{eff} \sim E_h^C (C_l / C_h)$ (pour $C_Y \ll C_h$ - sans cette condition l’expression est modifiée d’un facteur fonction de C_Y / C_h). D’autres géométries de réseaux sont aussi possibles, avec des îlots à 4 branches formant un réseau kagomé [30].

Cette réalisation du modèle de Rokhsar-Kivelson dans un système physiquement réalisable et contrôlable (i.e. les quantités $C_h, E_l^J, ..$ sont a priori ajustables à souhait) offre non seulement la possibilité de vérifier expérimentalement des propriétés de ce modèle, mais aussi d’utiliser certaines d’entre elles, notamment la protection topologique, assurée pour certaines valeurs de V/J où un fondamental désordonné possède une dégénérescence topologique [29], sur un système de topologie non simplement connexe (on peut réaliser un tel réseau avec un trou au milieu, le fondamental étant alors doublement dégénéré) - et un gap $\sim J$ aux excitations locales ; on pourrait ainsi fabriquer

et réaliser des opérations sur des bits quantiques (0 ou 1 correspondant à l'un ou l'autre de ces fondamentaux dégénérés), ce qui est une des versions actuellement discutées d'ordinateur quantique tolérant aux perturbations locales.

1.6 Interactions magnétiques frustrantes dans les structures de type pyrochlore

1.6.1 Composés à glace de spin et absence d'ordre magnétique à basse température

On revient ici à l'étude des matériaux à fortes corrélations électroniques, et on va voir que la physique des dimères intervient dans des composés à structure de type pyrochlore. Le réseau pyrochlore, constitué de tétraèdres se touchant par leurs sommets (les arêtes de tétraèdres voisins étant alignées 2 à 2) a une géométrie propice aux phénomènes de frustration : comme pour le réseau triangulaire, il est impossible de minimiser des interactions antiferromagnétiques d'Ising sur une unité (un tétraèdre ici). Parmi les composés possédant cette structure, certains sont dits dits à *glace de spin* de formule $A_2B_2O_7$, avec A un élément terre rare (où sont localisés les spins en question), et B un élément de transition. Dans ces composés on observe en général une absence d'ordre magnétique jusqu'à très basses températures, signalée par des mesures de chaleur spécifique C_s , avec un pic de C_s/T à basse température ($\sim 1.5K$ pour $Dy_2Ti_2O_7$). À T inférieure à celle du pic, le système physique ne semble pas magnétiquement ordonné : l'intégration de la chaleur spécifique autour du pic donne une variation d'entropie par spin $\delta S/k_B \sim \ln(2) - 1/2 \ln(3/2)$ [32, 31], qui indique une dégénérescence macroscopique des configurations de spin de basse énergie. Cette dégénérescence peut provenir si on considère que chaque spin d'un ion de terre rare, situé à la jonction de 2 tétraèdres, a un axe de facile aimantation joignant les centres des tétraèdres ; et que les spins ont des interactions d'Ising J_z ferromagnétiques, entre plus proches voisins. En réalité des interactions dipolaires, à plus longue portée, sont non négligeables par rapport à J_z (et à prendre en compte pour l'étude des monopôles magnétiques par exemple [33]) mais les interactions d'Ising, minimisées pour des configurations contraintes où sur chaque tétraèdre 2 spins pointent vers l'intérieur et 2 vers l'extérieur (*2 in- 2 out* : voir la figure 1.4-bas), suffisent à expliquer cette entropie à basses températures. La contrainte *2 in- 2 out* est appelée règle de la glace, en référence à la glace d' H_2O où les atomes O sont entourés par 4 H dont 2 sont relativement plus proches que les 2 autres, résultant en 6 arrangements possibles localement, et globalement en une entropie intensive finie à $T \rightarrow 0$ [34].

Les mêmes composés soumis à un champ magnétique suivant un axe de haute symétrie -plus exactement un axe "[111]" reliant des centres de tétraèdres voisins- ont également une entropie résiduelle à basse température mais faisant apparaître, dans une gamme d'amplitudes du champ comparable aux interactions, la contrainte de dimères [35]. L'extension (en fonction du champ) de ce régime et du plateau d'aimantation associé

dépendent de la nature exacte des interactions, mais le schéma général est le suivant : perpendiculairement au champ, on a un empilement de plans kagomé et de plans triangulaires ; si dans les seconds les spins sont orientés suivant le champ dans les plans kagomé on a une contrainte sur chaque triangle de type *2 in - 1 out* caractérisant des pavages de dimères du réseau hexagonal dual.

1.6.2 Modèle *XXZ* sur réseau pyrochlore : limite d'Ising

Pour comprendre le lien entre les phases de type glace de spin décrites précédemment et les modèles contraints, on considère ici sur un réseau de type pyrochlore un modèle *XXZ*, dans une limite de forte anisotropie de spin : $J_z \gg |J_{xy}|$. On a ici un axe de facile aimantation z uniforme, pour lequel des interactions ferromagnétiques serait évidemment non frustrantes, mais des interactions antiferromagnétiques conduisent aux mêmes règles que dans les composés à glace de spin : l'interaction entre 2 spins d'un même tétraèdre favorise ici une configuration $\uparrow\downarrow$ au lieu de (précédemment) une configuration *in-out*. Outre le réseau pyrochlore 3D, nous allons considérer un réseau similaire par sa structure en tétraèdres joints par les sommets, mais en 2 dimensions, le réseau *damier*. Dans les deux cas le modèle *XXZ* s'écrit, en présence d'un champ magnétique longitudinal :

$$H_{XXZ} = J_z \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z + J_{xy} \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y) - h_z \sum_i \sigma_i^z \quad (1.17)$$

Dans la limite d'Ising ($J_{xy} = 0$), il se réécrit à une constante additive près :

$$\begin{aligned} H_{XXZ} &= J_z/2 \sum_{tetra} \left(\sum_{i=1..4} \sigma_i^z \right)^2 - h_z \sum_i \sigma_i^z \\ H_{XXZ} &= J_z/2 \sum_{tetra} \left(\sum_{i=1..4} \sigma_i^z - \frac{h_z}{2J_z} \right)^2 \end{aligned} \quad (1.18)$$

Les configurations de basse énergie vérifient, en champ nul, une contrainte de type *2 in- 2 out* : la minimisation de l'énergie impose d'avoir, sur chaque tétraèdre, une des 6 configurations de σ_z total nul, donc 2 spins \uparrow et 2 spins \downarrow .

Pour $|h_z| > 3J_z$ la situation est moins originale : les configurations de basse énergie ont tous les spins polarisés suivant le champ. Mais pour des valeurs de champ intermédiaires, par exemple $-3J_z < h_z < -J_z$ la minimisation de $(\sigma_z - \frac{h_z}{2J_z})^2$ sur les tétraèdres impose une contrainte différente, celle d'avoir un seul spin \uparrow et 3 spins \downarrow par tétraèdre. En représentant un dimère sur le spin \uparrow , joignant les centres de ses 2 tétraèdres, on voit que les dimères ne se touchent pas. Le modèle de dimères résultant est sur le réseau dont les sites sont les centres des tétraèdres : réseau diamant en 3D, et réseau carré en 2D.

Pour résumer, on a un dans ce modèle générique un plateau d'aimantation $M_z = 1/2$ pour $J_z < h_z < 3J_z$, décrit par un modèle de dimères, et il est intéressant de voir une transition directe, pour $h_z = J_z$, entre 2 phases décrites par 2 modèles contraints distincts (donc d'entropies par site finies et distinctes) : modèle à 6 vertex et modèle de dimères (voir figure 1.6).

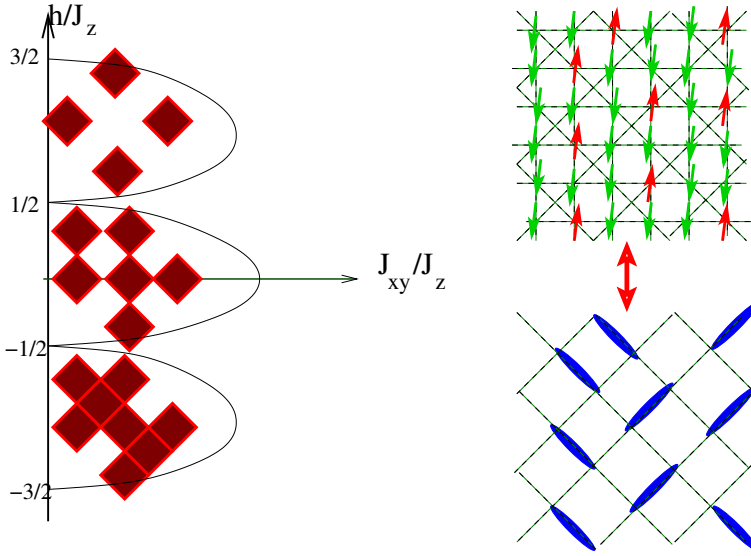


FIG. 1.6 – Allure schématique de phases à aimantation fixée dans un modèle XXZ en champ magnétique h sur réseau pyrochlore 2D : les spins \uparrow sont représentés par des dimères sur le réseau carré des tétraèdres (la correspondance est illustrée à droite). Les limites de ces phases, sont connues uniquement pour $|J_{xy}| \ll J_z$, l'allure de leur prolongation pour J_z fini est seulement hypothétique.

Dynamique pour $|J_{xy}| \ll J_z$ Les contraintes sur les tétraèdre qu'on a vues précédemment dans la limite d'Ising subsistent pour $|J_{xy}| \ll J_z$, mais ici le couplage J_{xy} induit une dynamique qu'on peut aborder perturbativement. Cette dynamique n'apparaît pas au premier ordre en J_{xy}/J_z : si on flippe 2 spins voisins dans une configuration vérifiant la contrainte, le tétraèdre commun aux spins flippés reste d'énergie minimale mais 2 tétraèdres voisins sont frustrés et donc la configuration est un état excité. Il faut donc considérer des termes d'ordre 2 (réseau damier) ou 3 (réseau pyrochlore) en J_{xy}/J_z qui consistent à flipper des spins en configuration alternée (i.e. $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots$) sur une boucle de 4 ou 6 arêtes respectivement, chaque tétraèdre impliqué dans la boucle voit son aimantation σ_z conservé. Dans le langage de dimères, la dynamique à l'ordre minimal en J_{xy}/J_z est donc gouvernée :

-sur le réseau damier, par le même type de mouvements que dans le modèle d'Ising frustré sur réseau carré, i.e. une résonance de 2 dimères sur une plaquette, carrée, d'amplitude $4J_{xy}^2/J_z$;

-sur le réseau pyrochlore, par un mouvement similaire à la résonance de 3 dimères sur une plaquette hexagonale (cas d'Ising antiferro sur le triangulaire), mais sur des hexagones distordus. Notons qu'en partant du même modèle sur réseau kagomé on aboutit à un modèle de dimères sur le réseau hexagonal (dont les sites sont les centres des triangles)

avec des flips sur les hexagones.

L'effet de ces interactions est d'ordonner le système dans une structure maximisant le nombre de plaquettes résonantes (représentées dans un diagramme schématique sur la figure 1.6, pour chaque phase ordonnée) ; la nature de ces phases dépend non seulement de la dimension mais du régime de champ considéré ($|h| < J_z$ [36] ou $J_z < |h| < 3J_z$). On reviendra sur ce type de phases dans le chapitre 4, dans le cadre d'un modèle de bosons de coeur dur en correspondance avec le modèle *XXZ*. Des interactions d'Ising J' antiferromagnétiques aux seconds voisins (i.e. sur le réseau damier, des spins sur la même plaquette non-croisée mais pas sur le même tétraèdre) se traduisent par des interactions entre dimères plus proches voisins, sur les plaquettes flippables. Il s'agit alors d'interactions à 2 dimères, qui favorisent ($J' < 0$ ferromagnétique) ou défavorisent ($J' > 0$) la présence de plaquettes flippables. Dans le cas 2D c'est une interprétation du modèle de Rokhsar-Kivelson qui fera l'objet du chapitre 3.

Conclusion partielle

Ce chapitre introductif avait essentiellement pour but de présenter différentes situations de la physique des électrons fortement corrélés qui se prêtent bien à une modélisation en termes de dimères. Le premier exemple d'un simple modèle d'Ising frustré où les configurations de basse énergie sont naturellement définies en termes de pavages de dimères. Dans ce contexte l'effet perturbatif d'un champ magnétique s'exprime en termes de *flips* de dimères qu'on retrouvera tout au long de cette thèse, et notamment dans le modèle de Rokhsar et Kivelson dont on a montré comment il est dérivé à partir d'un modèle de Heisenberg dans la base des singulets proches voisins. Les systèmes à plusieurs orbitales dégénérées par sites présentent également des phases dimérisées et on peut définir des modèles de dimères quantiques décrivant ces différentes phases, dont une phase de type liquide *RVB* dans des conditions proches de celles d'un système expérimental (*LiNiO₂*). Enfin, on a abordé le cas de composés à glace de spin qui présentent sous un champ magnétique des plateaux d'aimantation dans lesquels une entropie résiduelle subsiste à température nulle, qui s'explique en termes de pavages de dimères dans les plans orthogonaux au champ. On discute brièvement le cas un modèle *XXZ* qui présente les mêmes propriétés dans une limite d'anisotropie infinie mais s'ordonne magnétiquement en considérant des couplages transverses même perturbativement - ce type de mise en ordre sera retrouvé dans la suite de cette thèse.

Chapitre 2

Criticalité dans les modèles de dimères classiques bidimensionnels

Le chapitre qui vient traite des modèles de dimères bidimensionnels classiques : on commence par une présentation rapide des méthodes analytiques permettant de résoudre le problème sans interaction, avant de considérer un modèle à température finie, avec des interactions à courte portée. On verra que, sur les réseaux bipartites, une correspondance avec un modèle de hauteur permet de traiter l'effet des interactions comme une perturbation de ce modèle et d'expliquer l'existence d'une phase (ou ligne de points) critique avec des exposants prédits par cette théorie, jusqu'à une température finie de mise en ordre. L'effet de perturbations détruisant la bipartition du modèle est ensuite considéré, et motive la définition d'un modèle sur un réseau triangulaire anisotrope. Pour étudier ce modèle on utilise des techniques de matrice de transfert en se basant sur des arguments d'invariance conforme. L'extension de la phase critique en fonction des paramètres du modèle est ainsi déterminée, et on s'intéresse enfin à une transition directe entre des phases dites liquide et solide sur le réseau triangulaire isotrope.

2.1 Traitement exact du modèle sans interaction

Les contraintes définies au 1.1.1 définissent, sur un graphe donné, l'ensemble des configurations d'un modèle de dimères, aussi appelées *pavages de dimères*, et par conséquent l'entropie d'un modèle de dimères classiques sans interaction. On va voir que cette entropie dépend qualitativement du type de réseau considéré. Pour les réseaux bidimensionnels qu'on considérera (réseaux carré, triangulaire, hexagonal), et plus généralement pour tout graphe planaire, un modèle de dimères sans interaction, avec comme uniques variables la fugacité des liens du réseau, peut être traité par des méthodes analytiques développées par Kasteleyn [38], Fisher et Stephenson [1, 37]. Ces méthodes reposent sur l'utilisation d'une matrice de connectivité M , antisymétrique et de la taille du nombre

N de sites du graphe, et dont les éléments non nuls sont ceux correspondant à deux sites voisins (donc reliables par un dimère) de coordonnées respectives (i, j) et (i', j') et indexés respectivement par $s(= L(j-1)+i)$ et s' ; alors l'élément $M_{s,s'}$ vaut au signe près la fugacité du lien (1 pour un modèle isotrope), le signe dépendant d'une orientation des liens du graphe telle que le produit de ces signes sur tout parcours de longueur paire soit -1 . Pour un réseau carré de dimensions $N = L.L'$ on peut choisir :

$$\begin{aligned} M(s, s') &= (i' - i)z_{s,s'} & (|i' - i| = 1, j' = j) \\ M(s, s') &= (-1)^i(j' - j)z_{s,s'} & (|j' - j| = 1, i' = i) \\ M(s, s') &= 0 & (|i' - i| + |j' - j| \neq 1) \end{aligned} \quad (2.1)$$

Considérons ensuite le Pfaffien $Pf(M)$ de cette matrice, défini comme :

$$Pf(M) = \sum_p \delta_p \prod_{i \leq N/2} M(s_{2i-1}, s_{2i}) \quad (2.2)$$

où les permutations p des entiers $1 \leq i \leq N$ vers les entiers $(s_i)_i$ respectent les relations :

$$s_{2i-1} < s_{2i} \quad s_{2i-1} < s_{2i+1} (i < N/2) \quad (2.3)$$

La fonction de partition pour un graphe simplement connexe peut s'écrire à l'aide du Pfaffien de cette matrice : en effet, chaque terme non nul de la somme correspond à un appariement des N sites par paires de sites voisins - le terme $M(s_1, s_2)$ correspond au dimère reliant les sites $s_1 = 1$ et s_2 . Il y a donc pour s_1 donné z sites s_2 pour lesquels $M_{s_1, s_2} \neq 0$, et $Pf(M)$ est la somme de 4 termes produits de M_{s_1, s_2} par les Pfaffiens de M privée des lignes et colonnes s_1 et s_2 (et ainsi de suite). La convention de signe choisie dans la définition de M est telle qu'une configuration de référence (de type colonnaire) correspond à la permutation identité, et que les autres configurations entrent dans $Pf(M)$ avec le même signe. On peut le vérifier en décomposant les termes $\prod_i M(s_{2i-1}, s_{2i})$ correspondants en produits sur des boucles où l'occupation des liens est complémentaire de celle des mêmes liens dans la configuration de référence. La permutation correspondant à la configuration C peut se décomposer en permutations paires et en permutations correspondant à ces boucles, dont l'éventuel signe -1 est automatiquement compensé par un terme $M(s_{2i-1}, s_{2i}) < 0$.

Pour une surface connexe de topologie non triviale, mathématiquement parlant de genre $g \neq 0$ (par exemple $g = 2$ pour un tore) on peut choisir indépendamment 2^g conventions de signes de $M_{i,j}$ pour les liens (i, j) sur g lignes indépendantes et topologiquement non triviales. Le comptage des configurations par les Pfaffiens des 2^g matrices correspondantes fait apparaître autant de familles de configurations. Chaque famille de configurations est caractérisée par la parité du nombre de dimères croisant chacune des g lignes, invariante si on remplace cette ligne par une ligne topologiquement équivalente. Il s'agit donc d'un invariant topologique, qui permet de définir des *secteurs topologiques* (en fait, on verra que pour les réseaux bipartites on peut définir des invariants topologiques définissant un plus grand nombre de secteurs, qui sont des sous-ensembles des

2^g secteurs définis ci-dessus). Le nombre de configurations de chaque secteur est une combinaison linéaire des 2^g Pfaffiens calculés avec les différentes conventions de signes [38].

Même dans ce cas, l'énumération des pavages de dimères est ramenée par l'utilisation des Pfaffiens à un problème de complexité polynômiale (nombre d'opérations nécessaires $0(N^3)$) au lieu d'une complexité exponentielle a priori [39]. Chaque Pfaffien peut lui-même être obtenu à l'aide d'une intégrale sur des variables de Grassmann définies sur chaque site du graphe.

$$Z = \int [D\Psi] e^{-S} \tag{2.4}$$

$$S = \sum_{i,j} M_{i,j} \Psi_i \Psi_j \tag{2.5}$$

les variables de Grassmann vérifiant :

$$\int d\Psi_i \Psi_i^\alpha = \delta_{\alpha,1} \tag{2.6}$$

Lorsque, avec des conditions au bord périodiques, le graphe est invariant par les translations du réseau (i.e. les fugacités des liens ont la symétrie du réseau) cette formulation permet, par un passage en modes de Fourier, l'expression de S (de Z) comme une somme (un produit) sur les modes de Fourier, et donc une solution analytique du modèle ; de la même manière, les corrélations de positions des dimères, ou des fonctions de corrélations monomère-monomère, peuvent être obtenues à l'aide de Pfaffiens de matrices de connectivité modifiées au niveau des sites impliqués dans la fonction de corrélation en question - les corrélations dimère-dimère sont obtenues par le Pfaffien de la matrice de connectivité du graphe privé des 4 sites en jeu (où l'orientation du dimère sur chacun de ces sites étant fixée par hypothèse). Pour les corrélations de monomères, on utilise le même type de Pfaffien pour un graphe privé des 2 sites en jeu, mais on doit aussi modifier l'orientation des liens sur un chemin reliant les deux monomères considérés. Notons que si des corrélations de position d'un nombre fini de monomères dans un environnement de dimères peuvent ainsi être calculées, le modèle de dimères à densité non nulle de monomères n'est pas traitable par ces méthodes.

De telles techniques montrent que les corrélations connexes dimère-dimère décroissent exponentiellement vite avec la distance, sur le réseau triangulaire (et encore plus vite sur le réseau kagomé ou elles sont strictement nulles pour une distance $r \geq 2$ [40]), alors qu'elles décroissent en loi de puissance sur les réseaux carré et hexagonal. Inversement, les corrélations monomère-monomère tendent vers une valeur finie dans la limite de grandes distances (on parle alors de monomères déconfinés). Sur les réseaux carré et hexagonal, les deux types de corrélations décroissent vers 0 de manière algébrique :

$$C_{dd}(r) \sim |r|^{-2} \qquad C_{mm}(r) \sim |r|^{-1/2} \tag{2.7}$$

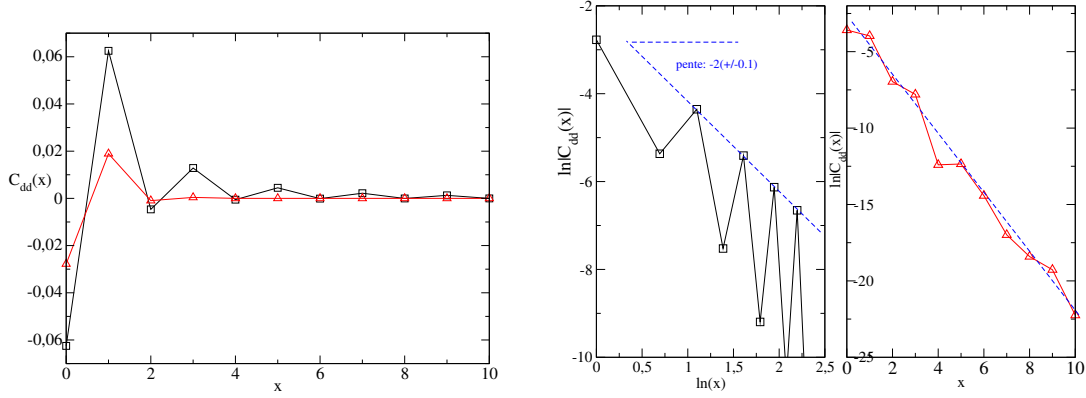


FIG. 2.1 – (a) : Corrélations de position de dimères verticaux, en fonction de la distance x sur l'axe horizontal (réseau carré : symboles carrés) ou incliné de $\pi/3$ (triangulaire). (b) : Représentation en log-log ou log-linéaire de ces corrélations, mettant en évidence, outre des effets de parité, une décroissance en $1/x^2$ ou exponentielle suivant le réseau.

On parle dans ce cas de *confinement algébrique* des monomères. On va voir dans le paragraphe suivant que (et pourquoi) cette criticalité (et donc les corrélations en loi de puissance) est conservée à température finie en présence d'interactions sur les plaquettes.

2.2 Interactions et ordres favorisés

On considérera aussi des modèles avec interactions à courte portée entre les dimères : typiquement il s'agira d'interactions attractives ou répulsives (suivant le signe de l'interaction u) entre dimères sur une même plaquette, agissant lorsque celle-ci est flippable. Dans ce cas l'énergie d'une configuration C est, pour le réseau carré :

$$E(C) = -u \sum_{i \in \square} (n_{i,||} + n_{i,=}) \quad (2.8)$$

Notons qu'il s'agit d'un terme à 3 dimères si les plaquettes sont des hexagones (réseaux hexagonal et Kagomé).

Pour $u \gg T$ les configurations favorisées sont celles maximisant le nombre de plaquettes flippables. Sur les réseaux carré et hexagonal ces configurations sont appelées *colonnaires*, par référence à leur allure pour le réseau carré - voir figure 2.2). Pour le réseau hexagonal, la phase correspondante a une structure plus complexe (voir figure 2.2). Dans les deux cas, il existe un nombre fini z (la coordinence du réseau) de configurations colonnaires, équivalentes par rotation autour d'un site fixé, et qui chacune brisent la symétrie de translation du réseau et sa symétrie de rotation autour d'un site.

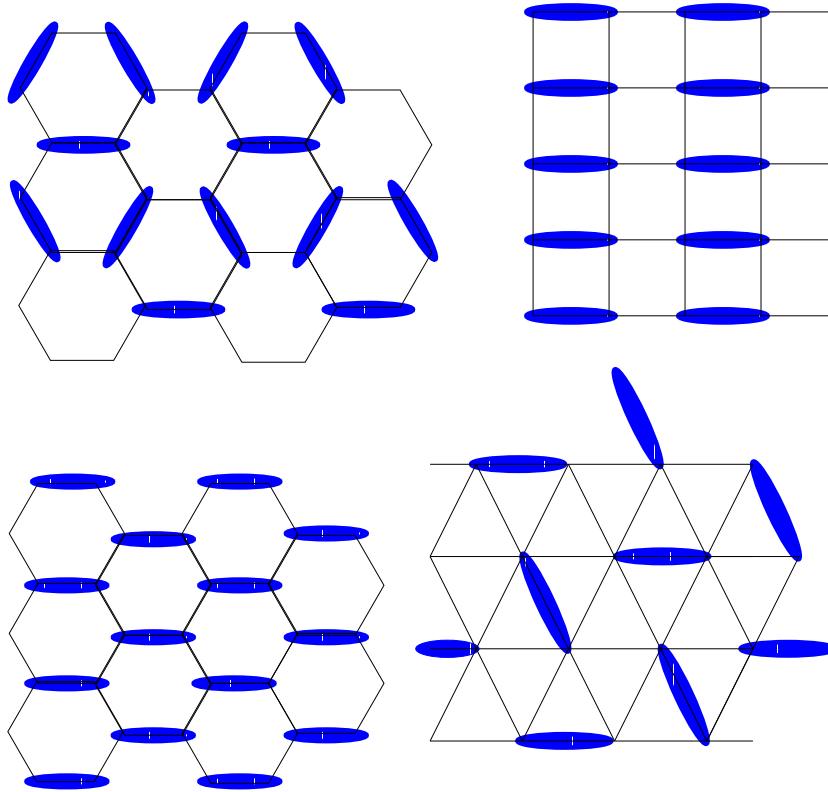


FIG. 2.2 – Au-dessus : états colonnaires, favorisés pour $T \ll u$, sur les réseaux hexagonal et carré. En-dessous : configurations alternés, favorisés pour $T \ll |u|$ ($u < 0$) sur les réseaux hexagonal et triangulaire.

Pour le réseau triangulaire, le cas $u \gg T$ est plus complexe : il existe un nombre macroscopique de configurations de plus basse énergie : les configurations de type colonnaire (analogues à celles du réseau carré, i.e. des colonnes dans une direction donnée de dimères orientés dans une des deux autres directions) mais aussi deux familles d'autres configurations obtenues à partir des premières par, pour les premières, un flip global des dimères d'une colonne ; et pour les secondes, un *shift* d'une ligne de dimères des colonnes occupées vers les colonnes vides. Cependant nous verrons plus loin que ceci est compatible avec une mise en ordre à basse température.

Pour des interactions répulsives ($u < 0$) les configurations favorisées à $|u| \gg T$ sont celles minimisant le nombre de plaquettes maximalelement occupées, ou encore de dimères plus proches voisins : on parle de configurations *alternées* (voir figure 2.2). Notons qu'ici c'est pour les réseaux bipartites qu'on trouvera un nombre macroscopique de configurations de basse énergie, obtenues à partir des configurations ordonnées (constituées de colonnes de dimères seconds voisins, toutes de même orientation) par des flips de ces

colonnes, ne créant pas de dimères plus proches voisins. Cependant il s'agit bien d'une phase ordonnée - si par exemple on fixe l'orientation des dimères aux bords d'un domaine, la contrainte de dimères associée à la minimisation du coût énergétique interdit des fluctuations thermiques locales à l'intérieur.

2.3 Dimères sur réseaux bipartites et criticalité

2.3.1 Notions sur les théories conformes bidimensionnelles

Une particularité de la physique statistique en 2 dimensions est que des systèmes à un point critique peuvent être décrits par une classe de théories appelées théories conformes [41]. Ces théories sont caractérisées par l'invariance conforme, c'est-à-dire l'invariance par un groupe de transformations conformes du plan, laissant la métrique invariante (à un facteur près). Le groupe de transformations conformes existe aussi en dimensions $D \geq 3$, mais a un nombre de générateurs finis, alors qu'en 2 dimensions toutes les fonctions analytiques du plan complexe sont conformes. Ceci impose des contraintes beaucoup plus fortes sur les propriétés physiques d'un point critique décrit par une théorie conforme : non seulement sur les fonctions de corrélations à 2 points, mais aussi sur les fonctions à 3 et plus de points ; les théories conformes permettent de faire apparaître des algèbres d'opérateurs. Sans entrer en détail dans ce vaste sujet, on va exposer les quelques résultats utiles dans le cas des modèles de dimères lorsqu'ils sont décrits par une telle théorie. L'invariance conforme signifie l'invariance de l'action $S = \int d\vec{r} A(\vec{r})$ par des transformations conformes ; pour des transformations infinitésimales du plan $z \rightarrow z + \alpha(z)$ (telles que $\delta_{\bar{z}}\alpha = 0$), la variation de S induite par cette transformation fait apparaître le tenseur énergie-impulsion $T_{\mu\nu}$ associé à A :

$$\delta S = -\frac{1}{2\pi} \int d\vec{r} \frac{\delta\alpha^\mu}{\delta r_\nu} T_{\mu\nu} \quad (2.9)$$

La nullité de δS pour des transformations infinitésimales impose des contraintes sur $T_{\mu\nu}$, notamment que sa trace $T_{xx} + T_{yy}$ soit nulle ; en termes des coordonnées complexes $z = x + iy$ et \bar{z} les composantes T_{zz} et $\bar{T}_{\bar{z}\bar{z}}$ sont respectivement holomorphe et antiholomorphe. Le tenseur d'énergie-impulsion intervient dans les variations des fonctions de corrélations d'opérateurs $\Phi_i(z, \bar{z})$ sous l'effet de $z \rightarrow z + \alpha(z)$, qui s'expriment à l'aide de développements en produits d'opérateurs (Operator Product Expansion, abrégé en OPE) [42]. En particulier, l'OPE de T_{zz} avec lui-même fait apparaître un nombre caractéristique d'une telle théorie, sa *charge centrale* c :

$$\langle T(z)T(z') \rangle = \frac{c/2}{(z-z')^4} + \frac{2}{(z-z')^2}T(z') + .. \quad (2.10)$$

Outre dans cette relation, la charge centrale intervient lorsqu'on étudie un tel système dans une géométrie cylindrique - le problème est alors équivalent à un problème quantique en $1D$, l'axe du cylindre correspondant à l'axe temporel τ . Une transformation du plan à un cylindre infini dans la direction τ et de circonférence $L : \omega = \tau + ix = \frac{L}{2\pi} \ln(z)$

est analytique sauf en $z = 0$. Elle permet de déterminer les valeurs propres Λ_0 du Hamiltonien H_L du problème $(1+1)D$, dont la plus basse donne l'énergie libre f_0 intensive du système, dans laquelle intervient c :

$$f_0(L) = -\frac{1}{L} \ln(\Lambda_0) = f^* - \frac{c\pi}{6L^2} + o\left(\frac{1}{L^2}\right) \quad (2.11)$$

On retrouvera cette expression plus loin, notamment dans l'analyse par matrice de transfert d'un modèle de dimères, où la mesure d'une charge centrale (finie) permettra de caractériser la phase critique.

2.3.2 Champ de hauteurs et secteurs topologiques sur un réseau bipartite

Une propriété des modèles de dimères sur un réseau bipartite et sans interaction ($u/T = 0$ - on verra plus loin le cas avec interactions) est qu'ils sont décrits par un modèle de hauteurs qui permet d'expliquer leur criticalité et les exposants des fonctions de corrélations citées précédemment. Au niveau microscopique, on peut établir une correspondance exacte [43] entre une configuration de dimères sur un réseau bipartite et un champ de hauteurs $h(\vec{r})$ sur le réseau dual associé (la hauteur à l'origine étant fixée : $h(\vec{r}_0) = 0$), par la règle suivante :

- (a) utilisant la bipartacité du réseau on sépare le réseau initial en deux sous-réseaux A et B , les sites de A ayant pour voisins des sites de B uniquement et réciproquement ;
- (b) lorsqu'on croise un dimère en allant d'un site du réseau dual à un site voisin en tournant autour d'un site de A dans le sens trigonométrique, la hauteur est incrémentée de $z - 1$ (z : coordonnée du réseau) ; sinon, elle varie de -1 (voir figure 3.4). Si c'est autour d'un site de B que l'on tourne, la variation de h est inversée. Grâce à la contrainte de coeur dur et en l'absence de défaut, le champ $h(r)$ est défini de manière univoque sur un graphe planaire (i.e. à conditions aux limites ouvertes).

Sur un système à conditions aux limites périodiques, si on définit $h(\vec{r})$ en partant de \vec{r}_0 , et en suivant une boucle topologiquement non-triviale on ne retombe pas nécessairement sur la même hauteur après un tour. La différence de hauteur W acquise en parcourant une telle boucle est, comme la parité du nombre de dimères sur cette boucle, invariante par déformation de la boucle (à condition qu'elle passe par \vec{r}_0). Pour une surface de genre g ($g = 2$ pour un tore, qu'on considère à présent), ce sont donc g invariants topologiques définissant 2^g secteurs topologiques. Les nombres W (après division par z) sont appelés nombres d'enroulement ou *winding numbers* : W_x et W_y correspondent à des lignes horizontales et verticales respectivement. On peut les interpréter comme les pentes moyennes, suivant les deux directions, du champ de hauteur correspondant.

Prenons l'exemple du réseau carré : on choisit des coordonnées entières pour les sites (donc demi-entières pour le réseau dual, par exemple $\vec{r}_0 = (1/2, 1/2)$) ; que le sous-réseau A correspond à $x + y$ pair ; et que $n^x(x, y) = 0, 1$ (respectivement $n^y(x, y)$) correspond à la présence ou à l'absence d'un dimère sur le lien reliant le site $(x, y) \in \mathbb{Z}^2$ à $(x + 1, y)$ (resp. à $(x, y + 1)$). Les différences de hauteur $W_{x,y}$, en parcourant les lignes $y = 1/2$ et $x = 1/2$, dans le sens des x et y croissants respectivement, peuvent se réécrire en

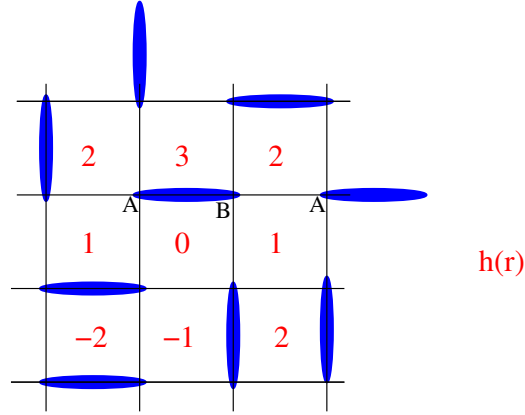


FIG. 2.3 – Définition microscopique d'un champ de hauteur dans le modèle de dimères sur le réseau carré

fonction des nombres d'occupations $n^{x,y}$:

$$\begin{aligned}
 W_x &= \sum_x (-1)^{x+1} n^y(x, 0) \\
 W_y &= \sum_y (-1)^y n^x(0, y)
 \end{aligned}
 \tag{2.12}$$

On définit des nombres similaires sur le réseau hexagonal (avec les mmes expressions si on fixe à $1/\sqrt{3}$ la longueur d'un lien et qu'on considère des lignes coupant les liens perpendiculairement). En tant que pentes moyennes, W_x et W_y sont définis de manière non-locale : la différence de hauteur obtenue en suivant un contour parallèle au contour initial est inchangée (l'expression 2.12 est à multiplier par -1 si la boucle est translatée de $(1, 0)$ ou $(0, 1)$, ce qui interchange les sous-réseaux). Contrairement à la parité du nombre de dimères sur une ligne, les *winding numbers* peuvent prendre un nombre de valeurs proportionnel à la taille du système- pour un système $L.L$ sur réseau carré, le maximum de $|W_x|$ ou $|W_y|$ est obtenu pour les configurations alternées : $|W_x| + |W_y| = L/2$. On remarque que les pentes maximales restreignent fortement le nombre de configurations correspondantes : par exemple, il n'y a qu'une configuration alternée telle que $(W_x, W_y) = (L/2, 0)$, alors que pour $(W_x, W_y) = (0, 0)$ le nombre de configurations est exponentiel en L^2 . Les configurations minimisant, à grande échelle, la pente moyenne du champ de hauteur, sont entropiquement favorisées - ceci est d'ailleurs vrai indépendamment des conditions aux limites périodiques ou non. Si l'on considère une version continue (*coarse-grained*) des champs $h(r)$ ainsi définis, elle doit donc être décrite par une action $S[h]$ favorisant les pentes minimales à grande échelle. Si pour cela on prend un modèle gaussien de hauteurs :

$$S_0[h] = g_0 \pi \int d\vec{r} |\nabla h|^2(\vec{r})
 \tag{2.13}$$

le paramètre g_0 caractérisant le coût entropique d'une déformation de la surface initialement plane (on l'appelle *stiffness*, ou rigidité, dans un tel modèle), le modèle gaussien prédit des corrélations de hauteurs variant logarithmiquement en fonction de la distance, plus exactement :

$$\langle (h(\vec{r}) - h(\vec{r}_0))^2 \rangle \sim C + \frac{1}{2\pi^2 g_0} \ln(|\vec{r} - \vec{r}_0|) \quad (2.14)$$

La correspondance entre champ de hauteurs microscopiques et configurations de dimères permet alors d'exprimer l'opérateur de dimère $n^{x,y}(\vec{r} = (x, y))$ à l'aide de $h(\vec{r})$ (\vec{r} sur le réseau dual) et de ses dérivés spatiales premières [44]. Pour le réseau carré,

$$n^x(\vec{r}) = 1/4 + (-1)^{x+y} \nabla_y h / 4 + (-1)^x \cos(\pi h / 2) \quad (2.15)$$

$$n^y(\vec{r}) = 1/4 + (-1)^{x+y+1} \nabla_x h / 4 + (-1)^y \cos(\pi(h + 1) / 2) \quad (2.16)$$

Ceci permet de retrouver la décroissance algébrique des corrélations dimère-dimère :

$$\begin{aligned} & \langle n^x(\vec{r}) n^x(\vec{r} + x\vec{e}_x) \rangle \\ & \sim \langle \cos(2\pi h(\vec{r})/z) \cos(2\pi h(\vec{r} + x\vec{e}_x)/z) \rangle \sim 1/2 |x|^{-\frac{1}{z^2 g_0}} \end{aligned} \quad (2.17)$$

obtenue avec les calculs de Pfaffiens [1, 38]. Une forme gaussienne pour $S[h]$ est donc raisonnable, et l'exposant 2 de ces corrélations fixe le préfacteur g_0 à $\frac{1}{2z^2}$. Si on considère une perturbation du modèle par un opérateur défini comme combinaison linéaire des $n^{x,y}$ (donc par exemple de type $\cos(2\pi h/z)$ en terme de hauteurs), l'exposant 2 de ses corrélations signifie qu'une telle perturbation serait pertinente, au sens du groupe de renormalisation, et entraînerait une mise en ordre des dimères. Le modèle gaussien est une théorie conforme de charge centrale $c = 1$, et les opérateurs $n^{x,y}$ sont naturellement appelés, dans le langage des théories conformes opérateurs de dimères ; ils sont de dimension 1. Néanmoins, un simple modèle gaussien ne suffit pas à rendre compte des caractéristiques microscopiques du modèle de dimères, et de sa mise en ordre à basse température dans le modèle avec interactions.

Types de perturbations autorisées par les symétries On peut chercher quels termes de perturbation, non relevant pour le modèle sans interaction et compatibles avec les symétries du modèle, peuvent être ajoutées pour tenir compte de ces interactions à température finie. Les symétries de rotation et de translation se traduisent en termes de hauteurs de la manière suivante : si on isole un domaine carré ou hexagonal dans le réseau correspondant, et qu'on considère les configurations où aucun dimère ne croise la frontière du domaine, on peut effectuer des rotations laissant la frontière invariante et des translations à l'intérieur du domaine, et considérer la modification résultante du champ de hauteur. Ainsi, pour le réseau hexagonal, une rotation de $\pi/3$ autour du centre d'un hexagone de côté L transforme le champ de hauteur $h(\vec{r})$ dans le domaine en h' tel que $h'(R_{\pi/3}(\vec{r})) = -h(\vec{r}) - L$. Ceci étant vrai pour toute taille $L \geq 1$, l'action du modèle de hauteurs dans la limite continue doit aussi vérifier :

$$\forall L \geq 1 : \quad S[-h - L] = S[h] \quad (2.18)$$

et par conséquent :

$$\begin{aligned} S[h] &= S[-h] \\ S[h] &= S[h + 1] \end{aligned} \quad (2.19)$$

On arrive à des contraintes similaires dans le cas du réseau carré. Notons qu'on peut retrouver le même résultat en considérant des domaines de hauteur constante et en appliquant des rotations et translations qui elles aussi doivent laisser S invariante [45].

Il résulte de cela que dans l'action décrivant les fluctuations de hauteur à longues distances, des termes supplémentaires (hypothétiques pour l'instant) doivent satisfaire les relations 2.19. Ces relations impliquent qu'on se restreigne à une fonction paire et 2π -périodique de h (en supposant un terme fonction de h et non de ses dérivées spatiales), dont le développement en série de Fourier fait intervenir uniquement des composantes de type $\cos(2p\pi h)$ (pour p entier).

Brisures de symétries impliquées par une mise en ordre et opérateurs associés

Les opérateurs traduisant des brisures des symétries élémentaires du réseau, et donc l'apparition d'un ordre à longue distance doivent être invariants par $h \rightarrow h + 4$. En excluant les fonctions de $\nabla^{(s)}h$ ($s \geq 1$) on peut se ramener aux puissances de $e^{\pm i\pi h/2}$ (ou les cosinus/sinus associés) non multiples de 4. On aura d'abord les opérateurs $e^{\pm i\pi h/2}$, ou encore $\cos(\pi h/2)$ (intervenant dans $n^x(\vec{r}) - n^x(r \vec{+} x)$) et $\sin(\pi h/2)$ (intervenant dans $n^x(\vec{r}) - n^x(r \vec{+} y)$) et donc les paramètres d'ordre colonnaire et alterné, associés aux phases du même nom (brisant les symétries de translation de \vec{x} et/ou \vec{y}) :

$$O_{col}(\vec{r}) = (-1)^x (n^x(\vec{r}) - n^x(r \vec{+} x)) + i(-1)^y (n^x(\vec{r}) - n^x(r \vec{+} y)) \quad (2.20)$$

$$O_{stag}(\vec{r}) = (-1)^{x+y} (n^x(\vec{r}) - n^x(r \vec{+} x)) + i(-1)^{x+y} (n^x(\vec{r}) - n^x(r \vec{+} y)) \quad (2.21)$$

d'autre part l'opérateur $e^{\pm i\pi h}$, ou de manière équivalente $\cos(\pi h)$, apparaît dans $(n^x(\vec{r}) - 1/4)^2 - (n^y(\vec{r}) - 1/4)^2$ et donc dans le paramètre d'ordre orientationnel : traduisant la brisure de symétrie de rotation (donc non nul dans les phases colonnaire et alternée) :

$$O_{rot}(\vec{r}) = n^x(\vec{r}) - n^y(\vec{r}) \quad (2.22)$$

traduisant la brisure de symétrie de rotation (donc non nul dans les phases colonnaire et alternée). Les opérateurs $e^{i\pm p\pi h/2}$ ($p = 1, 2$) vont donc intervenir pour caractériser les phases colonnaire et alternée (ou encore des modèles avec une fugacité de liens non uniforme), mais pas pour représenter l'effet des interactions u ayant la symétrie du réseau. Par contre, le terme $\cos(2\pi h)$ rend bien compte de l'effet de ces interactions, lorsqu'elles sont attractives : en effet, pour $u > 0$ les configurations favorisées, colonnaires, sont celles de pente minimale : pour chaque configuration colonnaire, la hauteur $\langle h \rangle$ moyennée sur tout carré de côté 2 est la même. Si on fixe $h_0 = 0$ sur une plaquette de référence, chaque configuration colonnaire correspond à une valeur de $\langle h \rangle$ demi-entière de entre

$-3/2$ et $3/2$ (réseau carré) ou entière entre -1 et 1 (hexagonal). L'effet des interactions les favorisant est donc bien traduite par une action du type :

$$S_u[h] = g\pi \int d\vec{r} |\nabla h|^2(\vec{r}) + \lambda \cos(2\pi h) \quad (2.23)$$

où $\lambda \geq 0$ pour le réseau carré et $\lambda \leq 0$ pour le réseau hexagonal. Or il se trouve que ce terme (et a fortiori les termes $\cos(2\pi p h)$ pour $p \geq 2$) est non pertinent au point fixe de température infinie, de stiffness g_0 : la dimension de l'opérateur $\cos(2p\pi h)$ est $\frac{p^2}{2g_0} = (zp)^2 > 2$.

Phase critique et transitions vers des états ordonnés à T finie Au vu de la dimension du terme $\cos(2\pi h)$ de l'action 2.23, à T finie les interactions sur plaquettes u sont non pertinentes pour u/T est suffisamment petit : le système reste critique sans mise en ordre colonnaire ($\langle \cos(2\pi h) \rangle = 0$) et le flot de renormalisation se fait de $(g = g_0, \lambda_0)$ vers $(g(u/T), \lambda = 0)$. La transition vers un ordre colonnaire se fait lorsque $g((u/T)_{col}) = g_{col} = 1/4$: dans ce cas et pour des valeurs supérieures de couplage, $(g(u/T), 0)$ n'est plus un point fixe et le flot de renormalisation se fait vers $\lambda \rightarrow \infty$. Le comportement de la chaleur spécifique dans la région de transition (avec, pour des systèmes de différentes tailles L un maximum de c_v ne divergeant pas avec L et à une position $(u/T)_L$ proche de $(u/T)_{col}$ mais ne tendant pas vers celle-ci pour $L \rightarrow \infty$) est caractéristique d'une transition de Kosterlitz-Thouless, sans ordre. Ce type de transition se trouve d'ailleurs dans le modèle XY en 2 dimensions, ou bien le modèle de sine-Gordon en dimension $(1 + 1)$, caractérisés par le même flot de renormalisation. Une analyse plus détaillée de ce flot de renormalisation est donnée dans la référence [45]. La transition vers l'état colonnaire a été mise en évidence numériquement, sur le réseau carré, par différentes techniques : d'une part, des simulations Monte-Carlo (évaluation de paramètres d'ordre traduisant la brisure d'invariance par rotation, la mise en ordre colonnaire, et les susceptibilités et cumulants de Binder associés) ; et d'autre part, des techniques de matrice de transfert, que nous allons détailler, donnent accès à la charge centrale c du système et aux exposants des corrélations dimère-dimère (expressions 2.4), directement reliés à $g(u)$ dans le modèle de hauteur. Les différentes études sur ce modèle [45, 46] concordent pour situer la transition critique-colonnaire à $(T/u)_{col} = 0.65(1)$. Sur le réseau hexagonal, l'analyse par matrice de transfert (voir figure 2.4 à gauche) montre une situation similaire, avec une charge centrale $c = 1$ mettant en évidence la criticalité pour $u/T \leq 1.00(5)$, jusqu'au point où la dimension d_e de l'opérateur $\cos(2\pi h/3)$ vaut $2/9$, donc le terme $\cos(2\pi h)$ dans l'action 2.23 devient pertinent.

Dans le cas d'interactions répulsives entre dimères ($u < 0$), la phase de basse température est caractérisée par un ordre alterné des dimères évitant toujours la double occupation des plaquettes (ou triple pour des plaquettes hexagonales). Sur les réseaux bipartites,

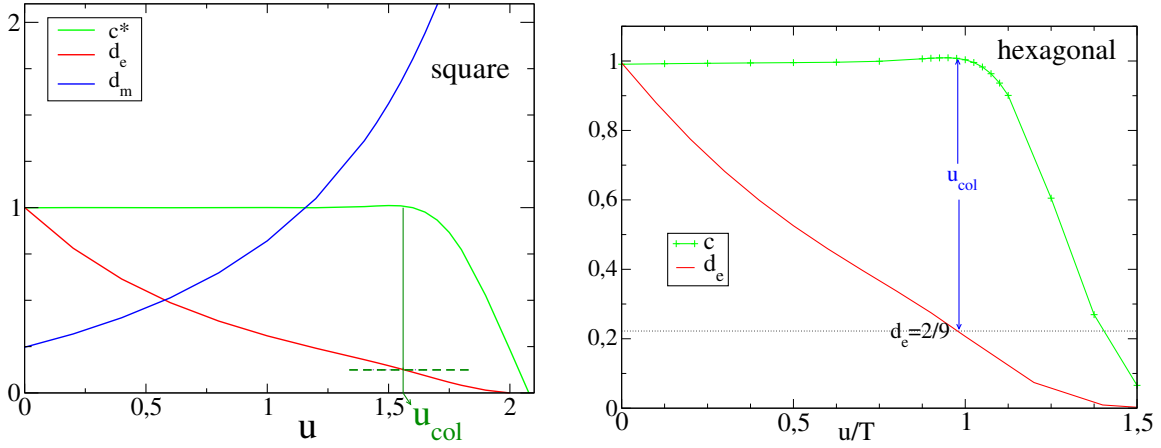


FIG. 2.4 – A gauche : charge centrale c et exposants d_e et d_m des corrélations dimère-dimère et monomère-monomère, évaluées par matrice de transfert, sur le réseau carré avec des interactions sur plaquettes, en fonction de u/T . A droite : c et d_e sur le réseau hexagonal avec des interactions u favorisant également l'ordre colonnaire.

cet ordre, où tous les dimères sont orientés dans une direction donnée, se traduit dans le modèle de hauteur par une pente maximale perpendiculairement à cette direction. La transition de la phase critique vers l'ordre alterné s'interprète donc différemment que dans le cas $u > 0$: ici ce ne sont pas des valeurs de $\cos(2\pi h)$ qui sont favorisées mais le terme $|\nabla h|$ qui est maximisé pour $-u \gg T$. Il existe néanmoins une phase critique à hautes températures, où l'effet des interactions est de diminuer la stiffness $g(u/T)$. La transition intervient lorsque $g((u/T)_{stag}) = 0$, où toutes les profils de hauteur (à grandes longueur d'onde) deviennent équiprobables, puis pour des plus basses températures les configurations alternées, à pente maximale, dominent la fonction de partition. Cette discontinuité dans la pente favorisée se traduit par une transition du premier ordre, ce qui a été également retrouvé numériquement par comparaison d'estimants de la charge centrale et de $g(u/T)$, cette dernière s'annulant à la limite de la phase critique, pour $(T/u)_{stag} \sim -0.72$ [46].

2.3.3 Approche perturbative la non-bipartité

On a vu que la situation est totalement différente sur un réseau non bipartite comme le réseau triangulaire, avec une phase de type liquide pour $|u| \ll T$ et une phase ordonnée à basses températures ; on va maintenant chercher à relier les deux situations, en considérant une perturbation brisant la bipartité du réseau.

Pour commencer, analysons l'effet de l'insertion d'une paire de monomères, dans une configuration de dimères, sur le champ de hauteurs associé. D'après les règles définissant le champ $h(\vec{r}')$ sur le réseau dual, en partant de $h(\vec{r}_0) = h_0$ et faisant un tour autour d'un monomère on ne retrouve plus la même hauteur mais $h_0 \pm z$. L'effet d'un monomère est celui d'un vortex de flux magnétique $2\pi m z$ (en unités de $\Phi_0 = hc/e$), tel que

$\int_{\theta=0\dots 2\pi} \vec{A} \cdot d\vec{l} = 2\pi m z \Phi_0$ - ici, l'analogie du potentiel vecteur est le gradient de h . L'entier m vaut -1 si le monomère est sur le sous-réseau A et $+1$ sur B . Notons que les monomères étant insérés par paires, un sur chaque sous-réseau, en parcourant un contour englobant une telle paire on ne voit pas leur effet, le flux total entouré étant nul. On interprète donc les monomères comme des charges magnétiques $m = \pm 1$, dans une représentation de gaz de Coulomb [47]. Dans cette approche, l'équivalent des charges électriques élémentaires sont les opérateurs $e^{\pm i\pi h/2}$ intervenant dans la définition des opérateurs de dimères (et le terme $\cos(2\pi h)$ lié aux interactions correspond à un opérateur de charge électrique $e = 4$). Ceci implique que l'effet des monomères dans la version continue du modèle de hauteurs, nécessairement perturbatif puisqu'une fraction finie de monomères rend $h(\vec{r}')$ non défini, se traduit par une fonction du champ $h^*(\vec{r})$ dual de h et défini sur les sites du réseau original, de sorte que sa dérivée suivant x (en version continue) est déterminée localement par la dérivée de h suivant y et vice-versa [47]. Les charges magnétiques correspondant aux monomères insérés sont représentées par des opérateurs $e^{imz h^*}$; comme les monomères sont insérés par paires de charges opposées, leur effet est traduit, dans l'action du modèle perturbé, par une combinaison de ces opérateurs, symétrique en $m \rightarrow -m$, donc :

$$S'_u[h, h^*] = g\pi \int d\vec{r} |\nabla h|^2(\vec{r}) + \lambda \cos(2\pi h) + C_1 \cos(zh^*) \quad (2.24)$$

Dans l'approche du gaz de Coulomb, l'expression générale de la dimension d'un opérateur de charges électriques et magnétiques e et m est :

$$d_{e,m} = \frac{e^2}{2z^2g} + \frac{g(mz)^2}{2} \quad (2.25)$$

On voit que le terme $\cos(zh^*)$ de dimension $gz^2/2$ est une perturbation pertinente du modèle de hauteurs, non seulement pour $u = 0$ ($g_0 = 1/(2z^2)$) mais pour toute situation où $g \leq 1/4$ en l'absence de monomères. Par conséquent l'introduction de monomères dans un système critique, avec des interactions u telles que $g(u) \leq 1/4$, détruit la criticalité et entraîne une mise en ordre du champ dual h^* , ce qui se traduit dans le modèle microscopique par une prolifération des monomères, et une phase à corrélations de dimères à courte portée).

Un autre type de perturbation brisant la bipartition consiste à introduire dans le modèle microscopique des liens entre sites du même sous-réseau : un dimère occupant un tel lien est équivalent à deux monomères, confinés l'un à l'autre et de même charge magnétique. La charge magnétique d'un dimère sur un lien diagonal est alors $m = \pm 2$ - notons que comme pour les monomères, sur un système périodique il doit exister autant de dimères sur les nouveaux liens du sous-réseau A que sur ceux du sous-réseau B . Du point de vue du modèle de hauteur l'effet de cette perturbation se traduit par un opérateur en $\cos(2zh^*)$:

$$S'_{u,\mu}[h, h^*] = g\pi \int d\vec{r} |\nabla h|^2(\vec{r}) + \lambda \cos(2\pi h) + C_2(\mu) \cos(2zh^*) \quad (2.26)$$

La dimension $d_{0,2} = 2z^2g$ de cet opérateur vaut 1 si l'on part du modèle sans interaction : ceci signifie qu'une concentration même infinitésimale de dimères diagonaux introduits sur le réseau carré rend la phase non critique (et donc un liquide de dimères). Ceci a été vérifié, en l'absence d'interactions, par des calculs de Pfaffiens [48]. Par contre, dans un modèle avec l'énergie d'interaction 2.8 du réseau initial, la condition sur la stiffness $g(u)$ pour que les deux opérateurs $\cos(2\pi h)$ et $\cos(2zh^*)$ soient non pertinents est :

$$\frac{1}{z^2} < g(u) < \frac{1}{4} \quad (2.27)$$

Cette condition est remplie pour une amplitude d'interactions u/T suffisante mais inférieure à celle de la transition colonnaire ; dans ce cas on a une situation originale où des dimères sur un réseau désormais non-bipartite se trouvent dans une phase critique.

2.3.4 Modèle de dimères en interactions sur un réseau triangulaire anisotrope

L'approche précédente motive l'idée (à l'origine de la publication [1]) de retrouver ce comportement au niveau microscopique en perturbant un modèle de dimères sur réseau bipartite. On choisit de partir du réseau carré : en introduisant des liens diagonaux, d'une orientation donnée (par exemple $-\pi/4$ par rapport aux liens horizontaux), on rend le réseau topologiquement équivalent au réseau triangulaire, à cela près que les liens d'une orientation donnée sont $\sqrt{2}$ fois plus longs que les autres et à $\pm\pi/4$ d'eux. Ces liens diagonaux sont introduits en perturbation par rapport au modèle initial, en assignant un potentiel chimique $\mu \gg T$ aux dimères sur les liens diagonaux. Pour pouvoir interpoler le modèle 2.8 du réseau carré avec son analogue du réseau triangulaire, on a besoin de définir un deuxième type d'interactions, sur les plaquettes du réseau triangulaire impliquant des liens diagonaux (plaquettes en losanges) d'amplitude $v \neq u$ (voir l'équation 2.33 et la figure 2.5). Si en l'absence d'interactions ($u = v = 0$) la théorie 2.26 prédit que les liens diagonaux introduits avec un potentiel chimique $\mu \gg T$ détruisent la criticalité, pour $u \neq 0$ (ou $v \neq 0$), la méthode des Pfaffiens ne s'applique plus et le traitement du modèle microscopique nécessite une approche numérique qu'on va maintenant exposer, basée sur l'utilisation de matrices de transfert.

2.4 Méthodes de matrices de transfert pour les dimères classiques

On va voir ici des méthodes numériques qui permettent de traiter les modèles de dimères classiques lorsqu'une solution analytique, notamment par calculs de Pfaffiens, n'est plus possible, c'est à dire en présence d'interaction ou de défauts brisant la contrainte de dimères (par exemple des monomères). Bien que les simulations de Monte-Carlo classiques sont un outil de choix pour ces modèles, grâce à des algorithmes utilisant des changements non locaux de configurations, elles ne donnent pas accès à la charge centrale du système qui est une quantité essentielle pour caractériser sa criticalité. Au contraire,

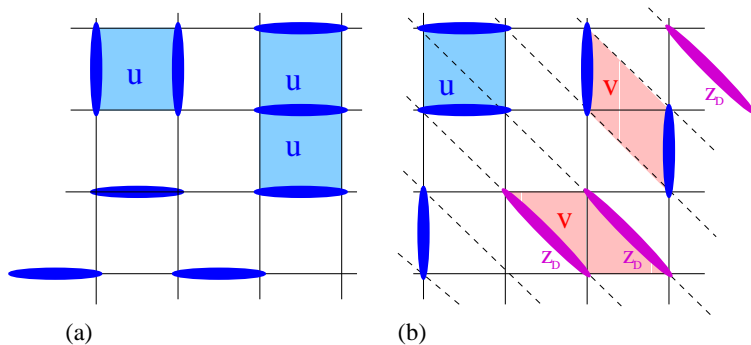


FIG. 2.5 – En partant du modèle de dimères sur réseau carré avec interactions u (à gauche) l'introduction de liens diagonaux avec une fugacité $z_D = e^{-\mu/T}$ pour les dimères sur ces liens conduit à un modèle sur réseau triangulaire anisotrope ; des interactions v sur les nouvelles plaquettes en losanges sont également définies.

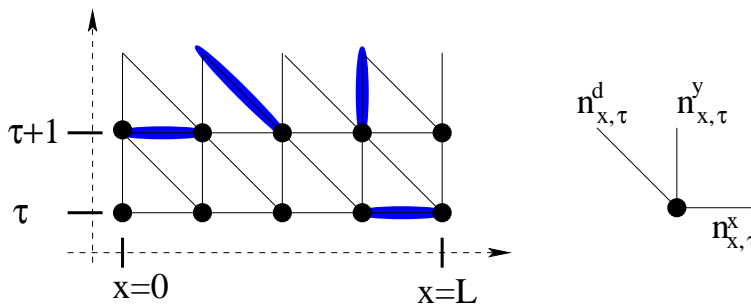


FIG. 2.6 – Deux rangées consécutives (à τ et $\tau+1$ respectivement) reliées par la matrice de transfert \mathbf{T} . Pour un site (x, τ) les nombres d'occupations $n_{x,\tau}^{x,y,d}$ des 3 liens indiqués à droite valent 1 ou 0 suivant la présence ou non d'un dimère.

la matrice de transfert du système y donne accès, ainsi qu'à diverses autres quantités qu'on verra après un bref exposé de cette méthode.

2.4.1 Définition de la matrice de transfert

Dans un modèle classique sur réseau en 2 dimensions, avec des interactions à courte portée (entre des mailles élémentaires voisines), considérons un système infini dans une direction (verticale, notée τ) et de taille L dans l'autre, avec des conditions aux limites périodiques. La matrice de transfert \mathbf{T} , qui est l'analogue sur réseau du Hamiltonien H_L vu au paragraphe 2.3.1 (générateur de translations infinitésimales sur l'axe τ) relie les configurations définies sur deux rangées voisines, horizontales, de L mailles élémentaires chacune. Si sur chaque rangée le modèle définit N_c configurations possibles (par exemple $N_c = 2^L$ pour un modèle d'Ising), la matrice de transfert est de taille $N_c \cdot N_c$. Son itération donne accès à la fonction de partition et aux quantités thermodynamiques dérivées ; pour cela, un élément $T_{i,j}$ connectant la configuration i sur la rangée à la position τ à la configuration j sur la rangée $\tau + 1$ contient les termes d'interaction internes à la rangée τ ainsi que ceux entre les deux rangées. De cette manière, sur un système de dimensions $L_\tau \cdot L$, la fonction de partition s'écrit :

$$Z(L_\tau, L) = \sum_{C_1, C_2 \dots C_{L_\tau}} \mathbf{T}_{C_1, C_2} \dots \mathbf{T}_{C_{L_\tau}, C_1} \quad (2.28)$$

Numériquement parlant, la somme à calculer implique L_τ produits de matrice $L \cdot L$, donc un temps de calcul linéaire en L_τ et une mémoire nécessaire indépendante de L_τ , ce qui permet pour L suffisamment petit de s'affranchir des effets de taille finie suivant τ et donc de traiter un système infini dans cette direction.

De plus, en utilisant le fait que \mathbf{T} est une matrice positive (plus exactement à coefficients positifs ou nuls) on sait par le théorème de Perron-Frobenius que sa valeur propre dominante (maximale en valeur absolue) est réelle positive : $\Lambda_0 > 0$; sauf cas pathologiques, elle est non dégénérée et les autres valeurs propres $\Lambda_i (i \geq 1)$ sont strictement inférieures en valeur absolue. Par conséquent, pour $L_\tau \rightarrow \infty$ la fonction de partition ne dépend que de cette valeur propre :

$$Z(L, L_\tau) \sim_{L_\tau \rightarrow \infty} \Lambda_0^{L_\tau} \quad (2.29)$$

ce qui signifie que l'énergie libre (par exemple par maille élémentaire, f_0) d'un système $L \cdot \infty$ est aussi fonction de cette valeur propre :

$$f_0(L) = - \lim_{L_\tau} \frac{T}{LL_\tau} \ln(Z) = - \frac{T}{L} \ln(\Lambda_0) \quad (2.30)$$

Illustrons ceci pour un modèle de dimères, en partant du réseau carré. Ici le nombre de configuration augmente en $(\sqrt{2} + 1)^L$. N_c est alors fixé par les nombres d'occupation sur les $2L$ liens de la rangée : $n_{x,\tau}^x$ sur les liens horizontaux à droite de $x = 0..L - 1$ et $n_{x,\tau}^y$ sur les liens verticaux connectant les rangées τ et $\tau + 1$) et par N contraintes qui s'écrivent :

$$\forall x = 1 \dots L \quad n_{x-1,\tau}^x + n_{x,\tau}^y + n_{x,\tau}^x \leq 1 \quad (2.31)$$

la périodicité suivant x impliquant $n_{L,\tau}^{x,y} = n_{0,\tau}^{x,y}$. Ceci donne $N_c \sim_L (\sqrt{2}+1)^L$ sur le réseau carré, ce qu'on peut trouver par récurrence sur L . Si on ajoute les liens diagonaux du réseau triangulaire anisotrope (voir figure 2.6), une rangée contient toujours L mailles élémentaires mais $3L$ liens ; par rapport aux liens horizontaux et verticaux $n_{x,\tau}^{x/y}$, les dimères sur les liens diagonaux ont un potentiel chimique μ , les nombres d'occupations correspondants étant $n_{x,\tau}^d$. Pour deux configurations i et j sur les rangées τ et $\tau + 1$, $T_{i,j}$ est non nul seulement si la contrainte de dimères est respectée sur tous les sites communs :

$$\forall x = 1 \dots L \quad n_{x-1,\tau+1}^x + n_{x,\tau+1}^d + n_{x,\tau+1}^x + n_{x,\tau+1}^y + n_{x-1,\tau}^d + n_{x,\tau}^y = 1 \quad (2.32)$$

Les paramètres d'interaction u/T , v/T (positifs pour des interactions attractives) et $z_D = e^{-\mu/T}$ entrent dans \mathbf{T} de la manière suivante : pour deux configurations i et j compatibles,

$$T \ln(T_{i,j}) = \sum_{x=1 \dots L} \left[u(n_{x,\tau}^x n_{x,\tau+1}^x + n_{x,\tau}^y n_{x+1,\tau+1}^y) - \mu n_{x,\tau}^d + v(n_{x,\tau}^d n_{x+1,\tau}^d + n_{x,\tau}^d n_{x,\tau+1}^d + n_{x,\tau+1}^x n_{x+1,\tau}^x + n_{x,\tau+1}^y n_{x+1,\tau}^y) \right] \quad (2.33)$$

La détermination de N_c se fait par récurrence sur L , en séparant les configurations en 3 groupes, suivant qu'aucun dimère de la rangée ne touche le site $i = L$ (w_L configurations), ou qu'il soit touché par un dimère du triangle à gauche, entre $x = L$ et $x = 1$ (u_L configurations) ou à droite, entre $L-1$ et L (v_L configurations). La relation de récurrence est obtenue en considérant l'insertion d'un $L + 1$ ème triangle en ce site, et s'écrit :

$$\begin{aligned} u_{L+1} &= u_L + 2w_L \\ v_{L+1} &= v_L + 2w_L \\ w_{L+1} &= u_L + v_L + w_L \end{aligned} \quad (2.34)$$

Sachant que pour la matrice de récurrence ainsi définie, le vecteur $(1, 1, 1)$ est un vecteur propre de valeur propre 3, et que pour $L = 2$ on a $u_2 = v_2 = w_2 = 3$, on en déduit que $u_L = v_L = w_L = 3^{L-1}$ et le nombre de configurations total est simplement $N_c(L) = 3^L$. Elle augmente donc plus vite avec L que pour le réseau carré (donc la taille limite L_{max} des systèmes qu'on peut traiter est plus petite, à puissance de calcul égale. Par contre, par rapport à un modèle de spins non contraint, comme le modèle d'Ising, on peut tirer parti de la nature creuse de \mathbf{T} : seul un petit nombre de configurations sur la rangée $\tau + 1$ sont compatibles avec une configuration donnée sur la rangée τ , donc le nombre d'éléments $T_{i,j} \neq 0$ est très inférieur à N_c^2 . En conséquence, des méthodes itératives telles que la méthode des puissances permettent d'accéder à la plus grande valeur propre pour des valeurs de N_c (donc de L) bien plus grandes que par une diagonalisation totale.

2.4.2 Principe de la méthode des puissances

On va voir que la méthode des puissances permet d'accéder non seulement à la plus grande valeur propre de la matrice de transfert mais aussi, grâce aux invariants du

modèle, à d'autres valeurs propres renseignant sur le système. Le principe de la méthode des puissances est relativement simple : on part d'un vecteur initial $|X_0\rangle$ de taille N_c , qu'on multiplie itérativement par \mathbf{T} ce qui donne $|X_\tau\rangle = \mathbf{T}^\tau |X_0\rangle$. Si le vecteur initial $|X_0\rangle$ a une composante non nulle c_0 sur un vecteur propre $|V_0\rangle$ associé à Λ_0 (ceci dans une base orthonormale donnée comportant $|V_0\rangle$), en faisant tendre τ vers l'infini, le vecteur $|X_\tau\rangle$ est équivalent à sa composante sur le vecteur $|V_0\rangle$:

$$|X_\tau\rangle \sim_\tau c_0 \Lambda_0^\tau |V_0\rangle \quad (2.35)$$

la composante sur le sous-espace orthogonal à $|V_0\rangle$ étant négligeable puisque se comportant en $o(\Lambda_1^\tau)$ avec $|\Lambda_1/\Lambda_0| < 1$. On préfère travailler sur des vecteurs $|X_\tau\rangle$ normés à chaque itération, pour éviter des problèmes d'*infinis numériques* ; alors Λ_0 est donnée par $\lim_\tau |\mathbf{T}X_\tau|$. Dans les cas étudiés ici, la convergence en double précision (à une précision d'ordre 10^{-15}) intervient après quelques centaines d'itérations.

2.4.3 Apports de l'utilisation des invariances du modèle

Pour avoir des informations complémentaires sur le système, comme des longueurs de corrélation, on a besoin des valeurs propres sous-dominantes de \mathbf{T} . Précisons que pour un système $L.\infty$, il n'y a pas d'ordre à longue distance et les corrélations suivant τ d'un opérateur donné décroissent exponentiellement vers 0 avec la distance sur l'axe τ , avec donc une longueur de corrélation finie, fonction d'une valeur propre sous-dominante associée à l'opérateur. La détermination de ces valeurs propres sous-dominantes est facilitée par les invariances du problème, qui peuvent être : les symétries spatiales (ici, les translations suivant l'axe x mais pas les réflexions) ; et les invariants topologiques : ici, avec un réseau triangulaire et un système cylindrique (surface de genre $g = 1$) on a 2 secteurs topologiques distincts, caractérisés par des nombres d'enroulement (parité du nombre de dimères croisant la ligne $\tau = 1/2$) $W_x = 0, 1$.

On voit déjà que \mathbf{T} est diagonale par blocs dans chacun de ces secteurs, chacun de taille $\sim (3^L)/2$, ce qui réduit l'effort numérique (c'est encore mieux sur les réseaux bipartites avec des blocs de W_x fixé tels que $N_x(W_x) \sim N_c/L$). Si W_x est conservé en l'absence de monomère (et pour des tailles L paires, auxquelles on se restreint), donc dans l'itération de \mathbf{T} , on peut considérer l'insertion d'un monomère en $\tau_0 = 0$, qui correspond à un changement de secteur $W_x \rightarrow W_x \pm 1$. Sur un système périodique cette insertion serait suivie de celle d'un autre monomère en $\tau_1 > 0$. Si Λ_0 est dans le secteur $W_x = 0$ et Λ_m est la valeur propre dominante du secteur $W_x = 1$, la contribution d'un tel processus à Z est en $(\Lambda_m/\Lambda_0)_1^\tau$, ce qui donne la longueur de corrélation monomère-monomère du système $L.\infty$: $\xi_m(L) = \ln(\Lambda_0/\Lambda_m)$.

Les corrélations dimère-dimère, elles, dépendent du rapport à Λ_0 de la valeur propre sous-dominante du même secteur topologique Λ_e (de vecteur propre $|V_e\rangle$) : si la partie connexe des corrélations, carré d'une valeur moyenne $\langle n_x^\alpha \rangle$ (indépendante de τ), ne dépend que de $|V_0\rangle$ et donc de Λ_0 , les corrélations connexes $\langle n_{x,0}^\alpha n_{x,\tau}^\alpha \rangle$ sont dominées par un terme $\langle V_0 | n_x^\alpha | V_e \rangle^2 \cdot \Lambda_e^\tau$, d'où une longueur de corrélation dimère-dimère

$\xi_e(L) = \ln(\Lambda_0/\Lambda_e)$. L'obtention de $\xi_e(L)$, donc de Λ_e , est a priori plus compliquée par la méthode des puissances que celle de Λ_0 . On peut éventuellement, à chaque itération, multiplier un second vecteur $|Y_\tau\rangle$ par \mathbf{T} puis l'orthogonaliser par rapport au vecteur $X_{\tau+1}\rangle$, et la suite $(|Y_\tau\rangle)_\tau$ converge vers $|V_e\rangle$ (à une phase près) ; mais pour l'étude présente où on est intéressé surtout par la phase critique, on gagne à utiliser le fait que dans cette phase le vecteur $|V_e\rangle$ est de symétrie différente de $|V_0\rangle$: alors que $|V_0\rangle$ est sans noeud (d'après le théorème de Perron-Frobenius, donc indépendamment de la phase), et s'écrit dans une représentation de vecteur d'onde $k_x = 0$, on peut vérifier numériquement que, dans une phase critique, $|V_e\rangle$ est dans une représentation $k_x = \pi$.

Utilisation des translations et matrice de transfert réduite Précisons ici à quoi correspondent ces représentations et comment on les utilise en pratique : le modèle étant invariant par les translations $t_x = t_1^x$ ($1 \leq x \leq L$) , il existe une base de vecteurs propres $|V_j\rangle$ de \mathbf{T} , chacun d'une représentation de vecteur d'onde $k_x(j)$ donnée, tel que :

$$\forall x = 1 \dots L \quad t_x(V_j) = e^{ixk_x(j)} V_j \quad (2.36)$$

Ceci spécifie l'écriture de $|V_j\rangle$ dans la base des N_c (où $N_c(W_x)$ à W_x fixé) configurations : en classant celles-ci en sous-ensembles de 1 à L configurations équivalentes à une translation près, on peut choisir dans chaque sous-ensemble une configuration représentative r , ou représentant. Pour le choisir on peut utiliser une écriture des configurations j en mots $word(j)$ binaires, et définir les représentants par :

$$\forall x = 1 \dots L \quad word(r) \leq word(t_x(r)) \quad (2.37)$$

Si toutes les configurations j n'étaient invariantes par aucune symétrie, on aurait L configurations par représentant et un nombre de représentants $N_r = N_c/L$. En fait un représentant invariant par $deg(r)$ translations ne représente que $L/deg(r)$ configurations distinctes. La proportion de ce type de configurations parmi les N_c configurations initiale étant négligeable, la dimension de la base réduite est alors légèrement supérieure à N_c/L mais de cet ordre de grandeur. Ceci permet de définir pour chaque représentation k_x une matrice de transfert réduite $\mathbf{T}(k_x)$ de dimension N_r (donc bien plus facilement calculable et stockable que \mathbf{T}). Dans une représentation donnée, la condition 2.36 implique que chaque représentant r sur lequel agit $\mathbf{T}(k_x)$ correspond à un vecteur $g(r) = \sum_{x=1 \dots L/deg(r)} e^{ixk_x} t_x(r)$ sur lequel agit \mathbf{T} . La matrice de transfert réduite $\mathbf{T}(k_x)$ est correctement définie avec les éléments de matrice :

$$T_{r,r'}(k_x) = \sum_{x=1 \dots L/deg(r')} T_{r,t_x(r')} e^{ixk_x} \quad (2.38)$$

Le nombre d'éléments de matrice non nuls (et la taille des boucles les définissant) sont donc réduits d'un facteur $\sim L$, ce qui permet outre l'obtention de valeurs propres supplémentaires d'accéder à des systèmes plus grands ($L = 14$ dans notre exemple, alors que la matrice \mathbf{T} initiale n'est traitable que pour $L \leq 12$). Notons que le nombre

d'itérations (donc le temps) nécessaire à la convergence d'une valeur propre $\Lambda_0(k_x)$ est généralement plus grand pour une valeur propre sous-dominante de \mathbf{T} (donc $\Lambda_0(k_x \neq 0)$) que pour Λ_0 , mais du même ordre.

Conséquences de l'invariance conforme On a vu que la plus grande valeur propre Λ_0 était reliée, par le comportement avec L de l'énergie libre, à la charge centrale c pour une théorie conforme; et d'autre part que les valeurs propres sous-dominantes permettent d'obtenir des longueurs de corrélation sur le système considéré, un cylindre $L\infty$. Ceci peut paraître contradictoire si l'on étudie une phase critique avec des corrélations algébriques, en loi de puissance. En fait, la contradiction vient du fait que les corrélations sont algébriques dans un plan infini, mais pas sur le cylindre. Pour relier les deux, il faut considérer la transformation conforme du plan au cylindre $\omega = \tau + ix = \frac{L}{2\pi} \ln(z)$ reliant les coordonnées complexes $z = z_x + iz_y$ du plan à celles, ω , du cylindre. Si la phase critique est décrite par une théorie conforme, comme ici, l'invariance conforme stipule que les corrélations s'expriment en loi de puissance en fonction des coordonnées *du plan*, avec un exposant $2d$: ainsi, les corrélations suivant l'axe du cylindre se comportent avec τ comme :

$$\begin{aligned} C(x=0, \tau) &\sim K \cdot |z|^{-2d} = K(e^{2\pi\tau/L} - 1)^{-d} \\ C(x=0, \tau) &\sim K \cdot |2\pi\tau/L|^{-d} && (\tau \ll L) \\ C(x=0, \tau) &\sim K \cdot e^{-2\pi d\tau/L} && (\tau \gg L) \end{aligned} \quad (2.39)$$

Si dans la limite d'un cylindre infiniment large, ou $\tau \ll L$, les corrélations sont en loi de puissance (remarquons que cela se généralise à des corrélations suivant x ou suivant une direction arbitraire [41]), pour $\tau \gg L$ la décroissance est bien exponentielle, et la relation 2.39 donne l'exposant d en fonction de la longueur de corrélation, connue d'autre part en fonction de la valeur propre Λ ($\Lambda_{e/m}$ suivant le type de corrélations) :

$$d_{e/m} = \frac{L}{2\pi\xi_{e/m}(L)} = \frac{L}{2\pi} \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\Lambda_{e/m}}\right) \quad (2.40)$$

On a ainsi un deuxième outil de caractérisation d'une théorie conforme, outre la charge centrale c accessible via $f_0(L)$. Si cette dernière nécessite l'obtention de Λ_0 pour au moins 2 valeurs de L , la détermination des exposants $d_{e/m}$ est a priori faisable avec une seule taille. En fait, ceci donnerait une détermination très grossière en général, pour $d_{e/m}$ comme pour c . On améliore ceci en tenant compte des termes en $o(1/L^2)$ dans l'expression 2.11; similairement, l'équation 2.40 néglige des corrections en $o(1)$. Toujours dans le cadre des théories conformes, on connaît un scaling plus complet des valeurs propres de \mathbf{T} [49, 46] :

$$\begin{aligned} f_0(L) &= -\frac{1}{L} \ln(\Lambda_0) = f^* - \frac{c\pi}{6L^2} + \frac{A}{L^4} + o\left(\frac{1}{L^4}\right) \\ \frac{1}{L} \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\Lambda_{e/m}}\right) &= \frac{2\pi d_{e/m}}{L^2} + \frac{C_{e/m}}{L^4} + o\left(\frac{1}{L^4}\right) \end{aligned} \quad (2.41)$$

En tenant compte de ces termes en $1/L^4$ on a besoin des valeurs propres de \mathbf{T} pour 2 et 3 tailles de L , pour $d_{e/m}$ et c respectivement. Grâce à la séparation en secteurs topologiques de $W_x = 0, 1$ et à l'utilisation des représentations $k_x = 0, \pi$, on accède à Λ_0, Λ_e et Λ_m pour $L \leq 14$ (les dimensions $N_r(W_x)$ des matrices de transfert réduites sont alors d'environ $1, 7 \cdot 10^5$). On définit alors un estimant de la quantité x (c ou $d_{e/m}$) comme la valeur de x obtenue d'après l'expression 2.41(bas) avec le minimum (2 ou 3) de tailles distinctes : ainsi l'estimant $c(10, 14)$ est obtenu par les valeurs de Λ_0 pour $L = 10, 12, 14$, ou encore $d_m(8, 10)$ est obtenu par les valeurs de Λ_0 et Λ_m pour $L = 8, 10$. Les estimants $c(10, 14)$ et $d_{e/m}(12, 14)$ sont plus fiables que ceux obtenus en se limitant à des tailles plus petites (où les termes en $o(1/L^4)$ dans les formules 2.41 sont moins négligeables) ; on s'affranchit encore plus des effets de taille finie en extrapolant ces estimants, d'après une loi semi-empirique (justifiée par les mêmes arguments de théorie conforme que les expressions 2.41) :

$$\begin{aligned} c(L, L+4) &= c^* + \frac{K}{L^2} \\ d_{e/m}(L, L+2) &= d_{e/m}^* + \frac{K'}{L^2} \end{aligned} \quad (2.42)$$

On peut ainsi en utilisant plusieurs estimants obtenir des valeurs c^* de charge centrale et $d_{e/m}^*$ d'exposants, dont on analysera l'évolution suivant les paramètres u, v, z_D . Sauf mention contraire, dans la suite du chapitre les extrapolations c^* sont obtenues à partir des estimants $c(8, 12)$ et $c(10, 14)$ et celles des exposants, $d_{e/m}^*$, à partir de $d_{e/m}(8, 10)$, $d_{e/m}(10, 12)$ et $d_{e/m}(12, 14)$. Cette méthode en deux étapes se révèle plus fiable qu'une extrapolation de c et des exposants en une étape utilisant les formules 2.41 et un plus grand nombre de tailles L , notamment des tailles $L \leq 6$ pour lesquelles les effets de taille finie sont trop sensibles.

2.4.4 Utilisation de la matrice de transfert hors d'une phase critique

La démarche qu'on vient de décrire ne s'applique qu'au cas où le système est critique et invariant conforme ; pour peu que les estimants $c(L, L+4)$ de charge centrale donnent une valeur nulle ou trop sensible à la taille L , on sait juste qu'on n'est pas ou plus dans une phase critique et les exposants $d_{e/m}$ n'ont plus aucun sens. Par contre on peut toujours utiliser \mathbf{T} pour caractériser le système :

premièrement, on a vu que certaines valeurs propres sous-dominantes étaient, indépendamment de la criticalité, reliées à des corrélations de dimères ou de monomères. En fait, on a même accès aux corrélations elles-mêmes sur un système périodique de taille $L.L_\tau$ fini : la corrélation d'un objet (dimère ou monomère ou objet plus complexe) associé à un opérateur P , à une position relative $(x, \tau \neq 0)$ sur le tore $L.L_\tau$ est évaluée par la quantité :

$$C(x, \tau) = \frac{\text{Tr}(\mathbf{P}\mathbf{T}^\tau \mathbf{T}_x \mathbf{P}\mathbf{T}^{L_\tau - \tau})}{\text{Tr}(\mathbf{T}^{L_\tau})} \quad (2.43)$$

Pour des corrélations dimère-dimère, l'opérateur \mathbf{P} compte simplement les configurations avec un dimère d'une orientation donnée à une abscisse x_0 sur la rangée $\tau = 0$,

puis à l'abscisse $x_0 + x$ sur la rangée τ . De la quantité obtenue on soustraira le carré de la valeur moyenne de \mathbf{P} pour obtenir les corrélations connexes. Pour les corrélations monomère-monomère, \mathbf{P} insère un monomère aux positions $(x_0, 0)$ puis $(x + x_0, \tau)$. Cela revient à interdire dans les rangées $0, 1, \tau$ et $\tau + 1$ la présence de dimères touchant les sites en question, ou encore à remplacer à ces positions la matrice de transfert \mathbf{T} par une matrice de transfert échangeant les secteurs topologiques (ou changeant W_x de ± 1 sur un réseau bipartite) Si Λ_0 est dans le secteur $W_x = 0$, entre les deux monomères il faut utiliser la matrice de transfert de $W_x = 1$.

Les corrélations ainsi obtenues sont bien sûr propres au un système fini $L.L_\tau$; si on peut facilement s'affranchir des effets de L_τ fini en itérant suffisamment \mathbf{T} , on est beaucoup plus limité par la taille transverse L , encore plus que pour l'obtention de Λ_0 , puisqu'on doit faire les L_τ itérations non plus en partant d'un seul vecteur mais de chacune des N_c configurations. Pour des dimères sur réseau triangulaire, on est limité à $L = 6$ - la taille paire suivante, $L = 8$ est accessible en terme de mémoire mais demandant des temps de calcul de l'ordre de la semaine, pour un intérêt supplémentaire limité. Alternative-ment, on peut calculer les corrélations entre sites d'une même rangée, plus rapides (car n'impliquant pas le calcul de la trace) mais limitant la distance des corrélations à $L/2$. On mesure des longueurs de corélations physiques (i.e. celles du système bidimensionnel) uniquement si celles-ci, et donc les longueurs $\xi_{e/m}$ calculées par matrice de transfert, sont nettement inférieures à L . Sinon, le contexte peut ou non laisser supposer une divergence de $\xi_{e/m}$ dans la limite $L \rightarrow \infty$, comme pour les phases critiques invariantes conformes où on peut tirer de systèmes finis les exposants de corrélations; ou plutôt des longueurs de corrélations finies mais non négligeables devant L .

Une autre quantité qu'on peut facilement évaluer est l'énergie moyenne du système, et par suite la chaleur spécifique. L'énergie moyenne, comme les corrélations intra-rangée, est plus facilement calculable que les corrélations inter-rangée : on n'a en effet pas besoin de calculer les traces de la formule 2.43. Sur un système fini il faut a priori calculer l'énergie moyenne sur tout le système : à chaque étape $\tau \rightarrow \tau + 1$ on itère non seulement un vecteur $|X_{\tau+1}\rangle = \mathbf{T}|X_\tau\rangle$ mais aussi un deuxième vecteur donnant, schématiquement, l'énergie moyenne du système $L.\tau$. Celle-ci est définie par :

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{C^{2D}} E_C e^{-E_C/T}$$

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \sum_{C_1, C_2, \dots, C_{L_\tau}} \prod_{\tau} T_{C_\tau, C_{\tau+1}} \ln \left(\prod_{\tau} T_{C_\tau, C_{\tau+1}} \right) \quad (2.44)$$

La linéarité du terme logarithmique par rapport à τ (physiquement, l'extensivité de l'énergie) et l'invariance par translation suivant τ permettent de ne calculer que l'énergie moyenne d'une rangée; pour L_τ suffisamment grand, i.e. lorsqu'on a obtenu le vecteur propre $|V_0\rangle$, on évalue la valeur moyenne de l'énergie par rangée (donc du terme de l'équation 2.33) par $\langle V_0|E|V_0\rangle$. On accède ainsi à la chaleur spécifique $c_v = d\langle E \rangle/dT$ en calculant $\langle E \rangle$ pour températures T et $T + dT$ proches (à paramètres d'interaction fixés). Notons qu'on pourrait aussi obtenir c_v par double dérivation de l'énergie libre par

site (divisée par T), mais ceci est plus sujet à des imprécisions (dus à la discrétisation de la dérivée); ou par le calcul des corrélations de l'énergie, mais celles-ci sont moins facilement calculables par matrice de transfert.

D'autres quantités sont accessibles en utilisant la matrice de transfert; on n'a mentionné que des corrélations à deux points mais on pourrait éventuellement étendre ce type de calcul à des corrélations à 3 points et plus (ce sans coût numérique supplémentaire, que ce soit en terme de temps de calcul ou de mémoire). D'autre part, le calcul d'un paramètre d'ordre associé à un opérateur O défini localement (sur une seule rangée), est relativement aisé: comme avec $\langle E \rangle$, pour $L_\tau \rightarrow \infty$ le calcul de $\langle V_0 | O | V_0 \rangle$ suffit. On est, dans tous les cas, limité à des tailles transverses assez modestes ($L_{max} \sim 10 - 15$) par rapport à des simulations Monte-Carlo, mais qui offrent un complément intéressant puisque les effets de taille finie ne jouent ici que dans une direction.

2.5 Criticalité sur le réseau triangulaire anisotrope

On va maintenant appliquer les techniques de matrice de transfert pour confirmer la présence d'une phase critique dans le modèle de dimères sur réseau triangulaire anisotrope, lorsque les liens diagonaux de fugacité $z_D \ll 1$ peuvent être vus comme une perturbation du réseau carré; et plus généralement, pour une fugacité finie, examiner les domaines de stabilité des phase critique, liquide de dimères (à haute température) et ordonnée (à basse température) et leurs transitions respectives. Dans la suite, sauf mention contraire, pour simplifier les notations on fixera la température $T = 1$ et on variera plutôt les paramètres u et z_D (puis v).

2.5.1 Effets de l'introduction des liens diagonaux à interactions u finie

On sait déjà que sans interactions entre dimères, la phase critique n'existe que sur le réseau carré non perturbé (fugacité des liens diagonaux z_D strictement nulle); mais qu'avec une fugacité $z_D \ll 1$ les arguments du modèle de hauteurs perturbé (d'action 2.26) prédisent une phase critique pour une gamme finie d'interactions u . Partant de la limite $z_D \ll 1$ il est intéressant de vérifier que les limites de la phase critique correspondent aux valeurs de $g(u)$ prédites (action 2.27), plus exactement aux valeurs d'exposants de dimère $d_e = \frac{1}{32g}$ et de monomère $d_m = 8g$ correspondantes. Si on calcule des estimants, puis leurs extrapolations, de c et de ces exposants, pour $z_D \ll 1$ fixé et u variable, l'effet de z_D sur la valeur propre Λ_0 , pour L fixé - et donc sur les estimants de taille finie de c - est très faible. On peut par contre vérifier que les valeurs de d_e et d_m concordent l'une avec l'autre à la transition vers la phase liquide pour $g(u) = 1/16$ (alors $d_e = d_m = 1/2$) - et que, comme sur le réseau carré non perturbé, elles valent respectivement $1/8$ et 2 (voir figure 2.4) à la transition vers la phase colonnaire.

Pour une fugacité finie $z_D \leq 1$, on répète cette procédure pour savoir comment la phase critique est réduite par le poids croissant des liens non diagonaux. Pour $z_D = 0.4$ et u variable, les estimants $c(10, 14)$, $d_e(12, 14)$ et $d_m(12, 14)$, et les extrapolations des

2.5. CRITICALITÉ SUR LE RÉSEAU TRIANGULAIRE ANISOTROPE

mêmes quantités sont montrés sur la figure 2.7 à gauche. On voit bien un régime de charge centrale $c = 1$ (c^* et $c(10, 14)$ étant très proches, ce qui montre la validité des hypothèses d'invariance conforme (cf. expressions 2.41) encadré par une phase de haute températures $u < u^*$, avec u^* la position de la transition à la phase liquide) et une phase ordonnée pour $u > u_{col}$. Dans ces deux régimes les estimants et extrapolations de c ne sont pas nuls mais concordent mal entre eux; des estimants pour des tailles bien supérieures tendraient bien vers 0 en fonction de L (mais bien plus lentement que vers 1 dans la phase critique). Les exposant extrapolés $d_e^*(u)$ et $d_m^*(u)$ sont aussi modifiées par rapport au cas $z_D = 0$. Dans la phase critique les estimants de d_e sont très peu sensibles aux effets de taille finie, décroissent avec u et prennent les valeurs attendues 1/2 et 1/8 aux bords du plateau de charge centrale $c = 1$ - les estimations de d_m sont un peu plus sensibles aux effets de taille finie (d'autant plus que u est grand) mais globalement en accord avec les autres données. On utilise les extrapolations d_e^* et d_m^* pour repérer la transition vers la phase liquide : des deux points $u_{e/m}$ où $d_{e/m}^* = 1/2$ on estime $u^* = (u_e + u_m)/2$, et l'incertitude sur u^* à $\delta u^* = (u_e - u_m)/2$. A la transition colonnaire, $d_m \sim 2$ mais ses estimants sont trop sensibles aux effets de taille finie pour permettre repérer la transition. On repère donc u_{col} par $d_e^* = 1/8$, plus précisément que par la limite du plateau de c ; l'écart entre les estimations de u_{col} par $d_e^* = 1/8$ et par le maximum de c^* permet d'évaluer l'incertitude δu_{col} . Hors de la phase critique, les estimants d'exposants d_e et d_m dépendent plus fortement de la taille, et n'ont à vrai dire plus de sens. Il est cependant logique qu'on obtienne $d_m^* \ll 1$ dans la phase liquide, où les monomères sont corrélés à longue portée, et de même $d_e^* \ll 1$ dans la phase colonnaire; les grandes valeurs de d_e^* dans la phase liquide et d_m^* en phase colonnaire sont cohérentes avec des corrélations à courte portée de dimères et de monomères respectivement. Plus z_D augmente, plus la transition vers la phase liquide est décalée vers les basses températures (u^* augmente en unités de T), alors que u_{col} reste à peu de chose près égale à la valeur du réseau carré. L'étendue de la phase critique est donc réduite, mais subsiste jusque sur le réseau triangulaire isotrope $z_D = 1$ pour une gamme finie et non négligeable d'interactions (voir figure 2.7). Cette criticalité sur le réseau triangulaire est a priori étonnante et en contradiction avec les arguments de modèle de hauteurs, associant la criticalité à la possibilité de définir un tel modèle et donc à la bipartité. En fait la phase critique pour $z_D = 1$ est permise par des interactions sur les plaquettes du réseau carré, favorisant la présence d'un maximum de dimères sur ces liens et non sur les liens diagonaux. On peut parler ici de restauration de la bipartité par des interactions suffisamment fortes, ayant la symétrie du réseau carré.

2.5.2 Effets des interactions frustrantes v

On va maintenant analyser le cas où les dimères interagissent sur toutes les plaquettes du réseau triangulaire avec une amplitude d'interaction v . On considèrera $0 \leq v \leq u$, toujours dans l'idée d'interpoler continûment les modèles 2.8 des réseaux carré et triangulaire. Voyons d'abord le cas où $z_D = 0$: sans liens diagonaux, les interactions v sont déjà actives, entre deux dimères parallèles à position respective $(1, -1)$. $v > 0$ favorise

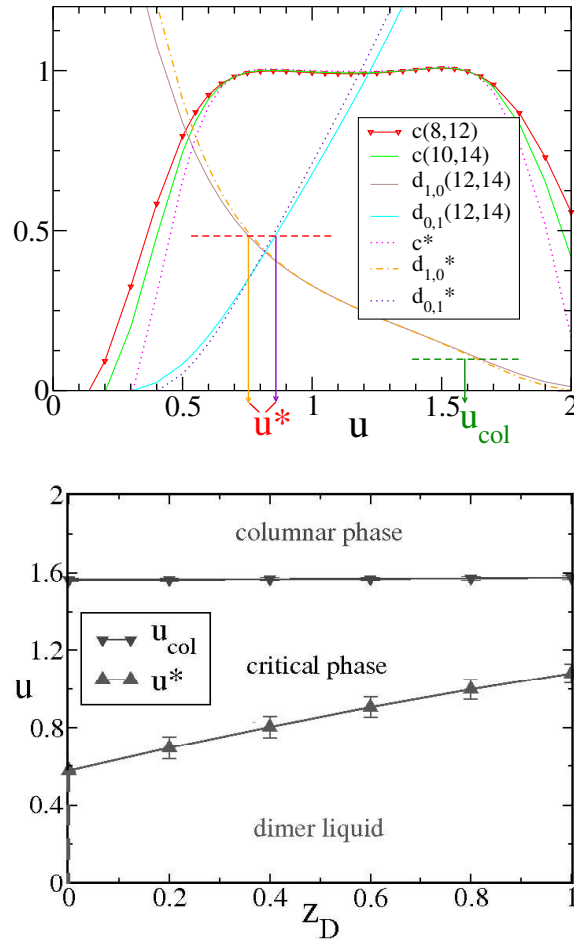


FIG. 2.7 – Haut : Estimations et extrapolations de charge centrale et des exposants d_e et d_m , en fonction de u , pour $T = 1$, $z_D = 0.4$ et $v = 0$. Les points u^* et u_{col} signalent la transition de la phase critique (caractérisée par $c = 1$) vers, respectivement, les phase liquide de dimères et colonnaire. Bas : Evolution de u^* et u_{col} en fonction de z_D , i.e. diagramme de phase du modèle dans le plan $v = 0$.

un ordre alterné de dimères (voire un cas similaire mais avec des interactions aussi à position relative $(1, -1)$ [46]), à la différence de u favorisant un ordre colonnaire. Tant qu'il existe une phase critique, les deux types d'interactions ont des effets opposés sur $g(u)$, qui est globalement augmentée par rapport au cas sans interactions puisque $u > v$, mais moins que pour $v = 0$ à u égal. La phase critique existe donc entre le point u_{col} (où $g(u) = 4$) de la transition colonnaire, croissant (légèrement) avec v , et le point $u = v = 0$. Considérons désormais le cas général $0 < z_D < 1$ et $0 < u < v$: ici, l'effet des liens diagonaux est amplifié par rapport au cas $v = 0$: en termes de hauteur, les liens diagonaux et les interactions v défavorisent un champ de hauteur sans dislocation et à variations

minimales, donc à la fois l'ordre colonnaire et la phase critique sont déstabilisées. Les méthodes précédentes permettent d'estimer c , d_e et d_m en faisant varier $u(1/T)$, à z_D et v/u fixés. Pour v/u faible, on a toujours un plateau de $c = 1$ entre les phases liquide et colonnaire, et aux points des transitions les exposants d_e et d_m valent toujours les valeurs prédites par 2.26. On peut comparer par exemple le cas $(z_D, v/u) = (0.4, 0.2)$ (voir figure 2.8 à gauche) à $(z_D, v/u) = (0.4, 0)$: u_{col} est légèrement augmenté, mais u^* l'est plus sensiblement. Notons que les effets de taille finie sur les différents estimants, au voisinage de u^* surtout, sont aussi accrus, ce qui résulte en une plus grande imprécision δu^* sur la transition. On peut ainsi déterminer un diagramme de phase en fonction des paramètres $u, v/u, z_D$, dont des coupes pour différentes valeurs de v/u sont montrées sur la figure 2.9. Plus les interactions sont frustrées (avec v/u grand, et d'autant plus que les liens diagonaux sont occupés avec z_D croissant) plus l'extension de la phase critique est réduite. Pour $v/u = 0.5$ (voir la figure 2.8 à droite) les points u^* et u_{col} sont très rapprochés ; d'autre part, si les courbes d'estimants de c en fonction de u montrent toujours un plateau traduisant une phase critique, la valeur extrapolée c^* est légèrement abaissée par rapport à 1, sauf à proximité de u_{col} où elle est réhaussée (cette bosse est déjà présente dans le cas du réseau carré $(z_D, v/u) = (0, 0)$ mais amplifiée par ces paramètres). L'allure de ces résultats ne signifie pas qu'il y ait deux phases (ou lignes de points) critiques avec des charges centrales distinctes, mais une plus grande importance des termes $o(1/L^2)$ dans la formule de scaling 2.41. Il en va de même pour les exposants de dimère et de monomère. Pour des valeurs plus grandes de v/u il devient difficile de parler d'une phase critique : les estimations de c ne donnant plus à proprement parler un plateau en fonction de u , les points de transitions u^* et u_{col} devenant très rapprochés, mais une bosse avec un maximum $c_{max} > 1$. L'imprécision sur les estimations de c et $d_{e/m}$, et donc sur les points de transition (δu_{col} et δu^*) deviennent comparables à $|u_{col} - u^*|$; d'autre part, il faut noter que dans le domaine de températures où (au vu de la bosse des estimants de charge centrale) on pourrait parler de criticalité, la valeur propre sous-dominante du secteur topologique $W_x = 0$ n'est plus dans une représentation $k_x = \pi$ mais est la deuxième plus grande valeur propre dans la représentation $k_x = 0$. Ainsi, la détermination du diagramme de phase par cette méthode adaptée à l'existence d'une ligne de points critiques devient caduque.

2.6 Transition directe entre les phases liquide et ordonnée

2.6.1 Stabilisation d'une phase ordonnée à basses températures

On a vu précédemment (au paragraphe 2.2) que les interactions $u > 0$ sur les plaquettes du réseau triangulaire, avec des interactions u de même amplitude sur toutes les plaquettes (cas $v/u = z_D = 1$ dans les notations précédentes), sélectionnent, à basse températures $T \ll u$, un nombre macroscopique de configurations de basse énergie : non seulement les configurations colonnaires, mais aussi toutes configurations différant d'une configuration colonnaire par un flip global d'une ou plusieurs colonnes (voir figure 2.10

2.6. TRANSITION DIRECTE ENTRE LES PHASES LIQUIDE ET ORDONNÉE

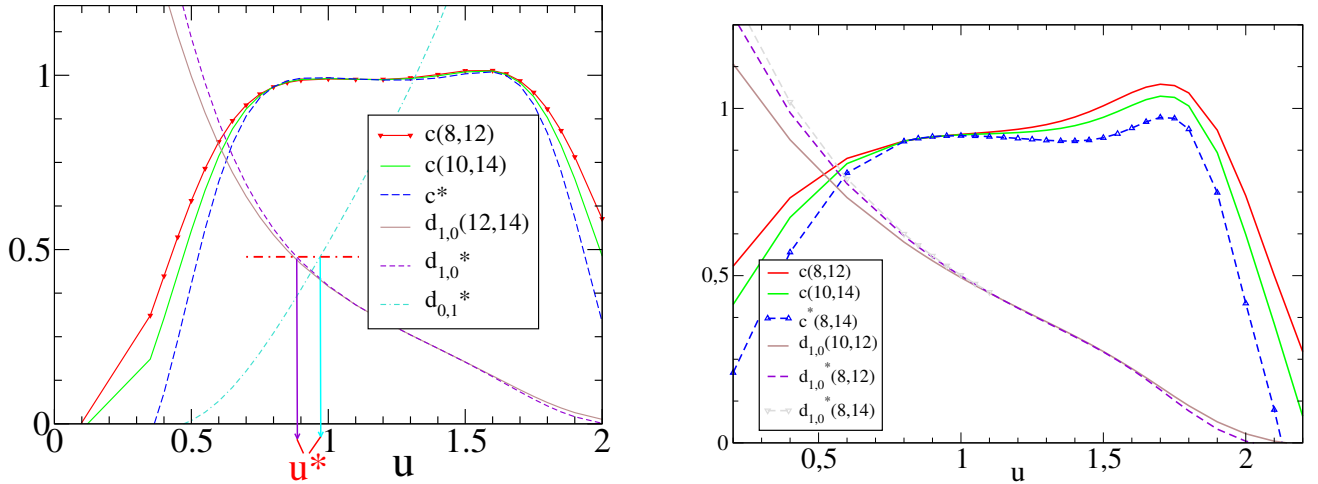


FIG. 2.8 – Estimants de charge centrale c et d'exposants de dimère (d_e) et de monomère (d_m) en fonction de u pour des valeurs de paramètres $(z_D, v/u) = (0.4, 0.2)$ (à gauche) et $((z_D, v/u) = (0.2, 0.5))$ (à droite). Le plateau de charge centrale bien défini dans le premier cas existe aussi dans le deuxième, mais les limites de la phase critique sont alors moins précisément définies.

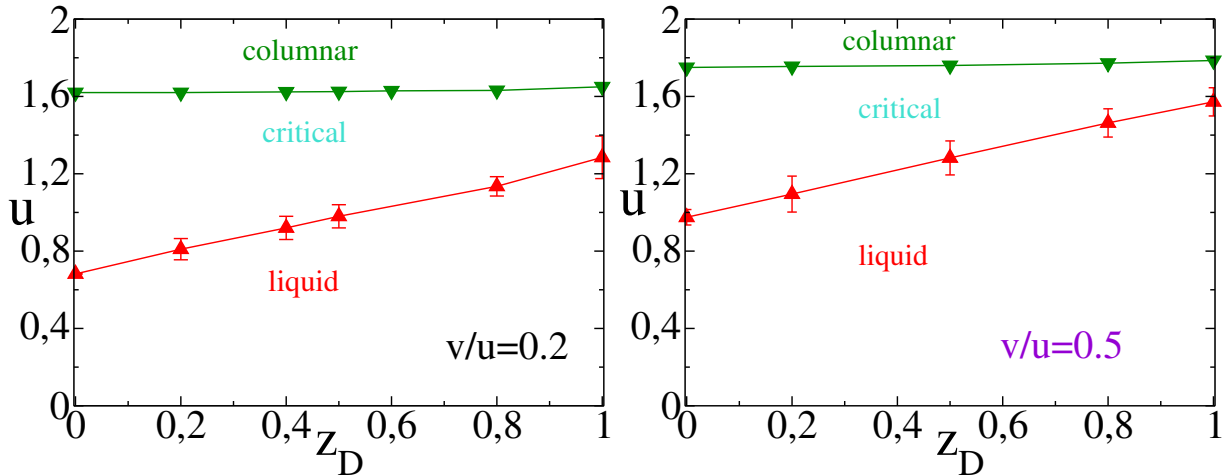


FIG. 2.9 – Sections du diagramme de phases du modèle $u - v - z_D$ pour des valeurs d'anisotropie d'interactions $v/u = 0.2$ (à gauche) et $v/u = 0.5$ (à droite). On voit que l'extension de la phase critique est fortement réduite par la frustration croissante des interactions (qui accroît d'autre part l'incertitude sur les points de transition vers les phases liquide et colonnaire.)

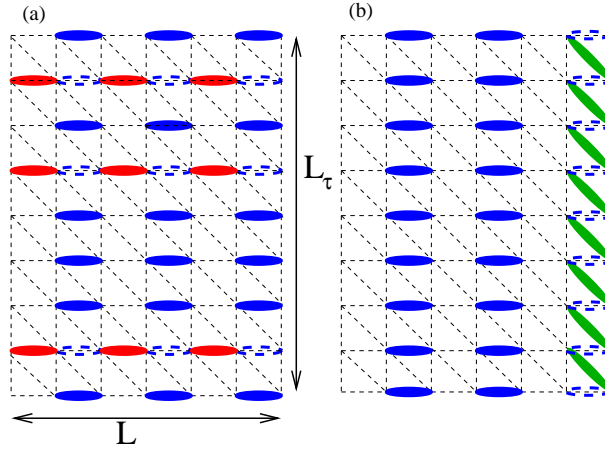


FIG. 2.10 – Les configurations de basse énergie du modèle 2.8 sur réseau triangulaire (l'élongation des liens diagonaux est sans importance), pour $T \ll u$: à partir des configurations colonnaires, un flip d'une colonne (à gauche) ou une translation d'une ligne (à droite) de dimères ne change pas le nombre de plaquettes doublement occupées.

à droite), OU par une translation d'une unité de réseau suivant l'axe d'orientation des dimères d'une ou plusieurs lignes (figure 2.10 à gauche) ne change pas l'énergie.

Sur un système de dimensions (L, L_τ) à conditions aux bords périodiques, les deux types de mouvements représentés sur la figure 2.10 résultent en un nombre macroscopique de configurations de basse énergie ($2^{L/2}$ et $2^{L_\tau/2}$ respectivement), dont on peut penser à première vue qu'ils empêchent l'ordre colonnaire. En fait, on peut remarquer que ces deux types de mouvements s'auto-excluent : si à partir d'une configuration colonnaire on a flipé une colonne, on ne peut plus traduire une ligne et vice-versa, à moins de

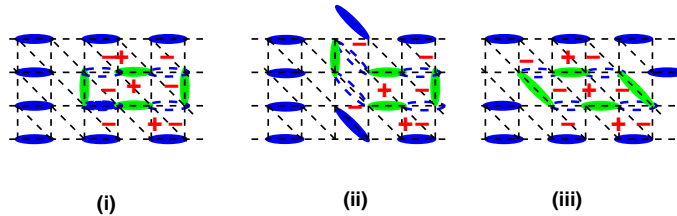


FIG. 2.11 – Fluctuations locales sur des boucles de 8 liens, à partir de configurations de basse énergie : d'une configuration colonnaire (i), d'une configuration à colonnes parallèles de dimères (cf. figure 2.10) (ii), ou à lignes de dimères parallèles (iii). Les plaquettes rendues non flippables (coût u) sont marquées par un $-$ rouge et les plaquettes rendues flippables par un $+$.

créer un défaut d'énergie $O(u)$; localement, les dimères peuvent donc s'ordonner soit en colonnes (l'orientation des dimères dans chaque colonne étant indépendante des autres colonnes), soit en lignes (la position des dimères sur chaque ligne étant indépendante des autres lignes). Il semble par contre que l'ordre colonnaire ne peut s'étendre à longue distance à $T = 0$ (à moins d'être forcé par des conditions aux limites spécifiques). Par contre, indépendamment des conditions au bord du système, les fluctuations thermiques locales sélectionnent certaines configurations de basse énergie par rapport à d'autres et peuvent induire une mise en ordre à basses températures, par un phénomène dit d'Ordre par le Désordre [50]. Plus précisément, on peut considérer les fluctuations locales sur des boucles de $2n$ liens, coûtant une énergie $k.u$, et correspondant à faire passer n dimères des liens initialement occupés aux liens initialement vides dans une configuration de basse énergie. Les fluctuations d'énergie minimale ($2u$) sont les flips sur une plaquette flippable, et ne départagent pas les différentes configurations de basse énergie puisqu'elles ont le même nombre de plaquettes flippables. À une énergie supérieure $3u$, on trouve des fluctuations stabilisant pour $T/u > 0$ les configurations colonnaires (cas (i) sur la figure 2.11 et celles en lignes de dimères (cas (iii)), par rapport aux configurations en colonnes de type (ii) pour lesquelles des fluctuations similaires ont une énergie supérieure $4u$. À cette échelle d'énergie les configurations en lignes de dimères (colonnaires ou non) sont donc favorisées par rapport aux configurations de type (ii), par des fluctuations locales rendant exactement 3 plaquettes non flippables, pour $0 < T \ll u$. Pour savoir si les configurations colonnaires sont favorisées par rapport aux autres configurations en lignes (de type (iii)), il faudrait considérer des fluctuations de plus haute énergie à partir de ces configurations. Deux scénarii sont possibles : soit les configurations colonnaires sont effectivement stabilisées par effets entropiques, soit le système s'ordonne partiellement à basses températures, avec un ordre orientationnel des dimères (configurations en lignes de dimères) qu'on pourrait qualifier d'ordre *nématique*, mais sans ordre positionnel (colonnaire). Sans trancher entre ces possibilités, pour désigner la phase de basses températures on parlera néanmoins de phase colonnaire par la suite.

2.6.2 Estimation de la transition de mise en ordre

Si, par matrice de transfert, on considère un système de ratio d'aspect $L_\tau/L \gg 1$, à basses températures les $2^{L_\tau/2}$ configurations en lignes de dimères horizontaux dominant, dans la fonction de partition $Z(L, L_\tau)$, les $2^{L/2}$ configurations en colonnes verticales. L'ordre induit à $u/T \rightarrow \infty$ est donc partiel : sur une ligne (horizontale) chaque lien est occupé avec une probabilité $1/2$, mais sans corrélation de position entre différentes lignes. Un paramètre d'ordre judicieux, pour un calcul de matrice de transfert, est donc fonction de P_- , la probabilité qu'un lien horizontal soit occupé ; sachant que $P_-(T/u = 0) = 1/6$ et $P_-(T/u \rightarrow \infty) = 1/2$ on peut le définir comme :

$$\langle m \rangle = 3(P_- - 1/6) \tag{2.45}$$

L'estimation de ce paramètre d'ordre sur des systèmes accessibles par matrice de transfert permet alors d'estimer la température de mise en ordre colonnaire. On le définit

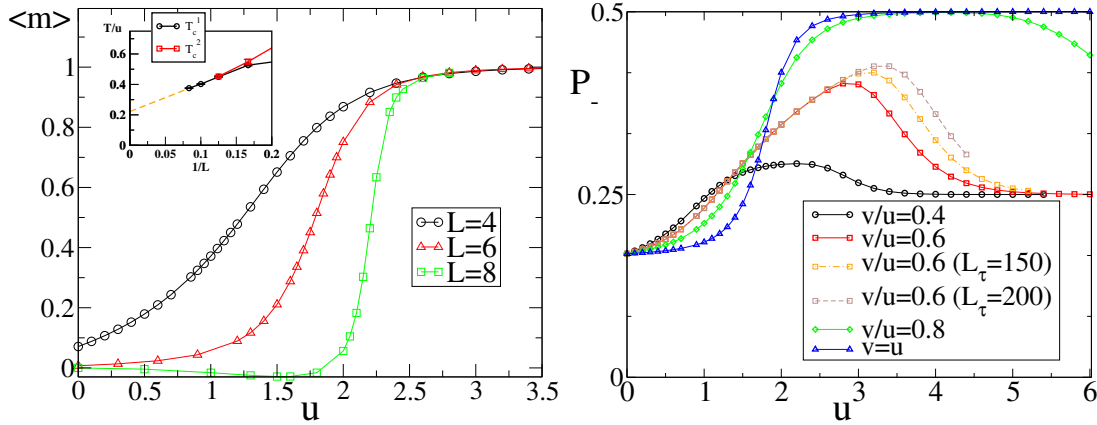


FIG. 2.12 – A gauche : paramètre d'ordre $\langle m \rangle$ calculé par matrice de transfert sur des systèmes de largeur $L = 4, 6, 8$, en fonction de u/T dans le modèle isotrope ($u = v$). L'insert montre les températures $T_c^1(L)$ et $T_c^2(L)$ ($/u$) correspondant aux maxima respectifs de $d\langle m \rangle/dT$ et de c_v , et qui tendent vers une même limite pour $L \rightarrow \infty$. A droite : $\langle m \rangle$ en fonction de u/T , pour différentes valeurs de v/u (et différentes longueurs L_τ pour $v/u = 0.6$), et $L = 6$. Le dépassement à T finie de la valeur $\langle m \rangle(T = 0) = 1/4$ met en évidence les fluctuations favorisant les configurations (d'énergie minimale pour $v = u$) illustrés sur la figure 2.10 à droite.

comme le nombre moyen de dimères horizontaux sur une rangée donnée, divisé par L (en quelque sorte le facteur de structure 1D, en $k_x = 0$, du paramètre d'ordre localement défini sur un lien). Il est calculé pour des tailles $L = 4, 6, 8$ en fonction de u/T (voir 2.12). On voit bien deux régimes différents, séparés par un saut de P_- de plus en plus abrupt quand L augmente. Dans la phase basse température, i.e. suffisamment loin de la zone de saut, $\langle m \rangle$ dépend très peu de L , ce qui indique que l'ordre est bien établi. On peut estimer une température de mise en ordre $T_c^1(L)$ par le point de pente maximale de la courbe $\langle m \rangle(u/T)$. Une extrapolation à partir des 3 tailles considérées indique que T_c^1 tend vers une valeur finie $\sim 0.2u$ pour $L \rightarrow \infty$. Il est intéressant de comparer ce paramètre d'ordre dans le cas isotrope et dans le modèle anisotrope à $u > v$ (mais v/u tel qu'on n'ait pas de phase critique à T intermédiaires) : dans le deuxième cas, à $T \rightarrow 0$ les configurations de basse énergie sont les 4 configurations colonnaires du réseau carré, d'où $\langle m \rangle = 1/4$, mais à des températures de l'ordre de $u - v$, le paramètre d'ordre dépasse largement cette valeur ; si pour $v/u = 0.6$ il reste nettement inférieur à $1/2$ il est d'autant plus important que L_τ (donc le nombre de configurations à dimères horizontaux) est grand ; pour $v/u = 0.8$, $\langle m \rangle$ atteint pratiquement la valeur maximale $1/2$ du cas isotrope, pour $u - v \leq T \leq 2(u - v)$ environ. On voit bien ici l'importance des fluctuations thermiques pour stabiliser les configurations à dimères en ligne, cette mise en ordre intervenant à température finie par des effets entropiques. Revenons au cas isotrope $u = v$: on peut mettre en évidence plus clairement la transition de mise en ordre colonnaire par l'ana-

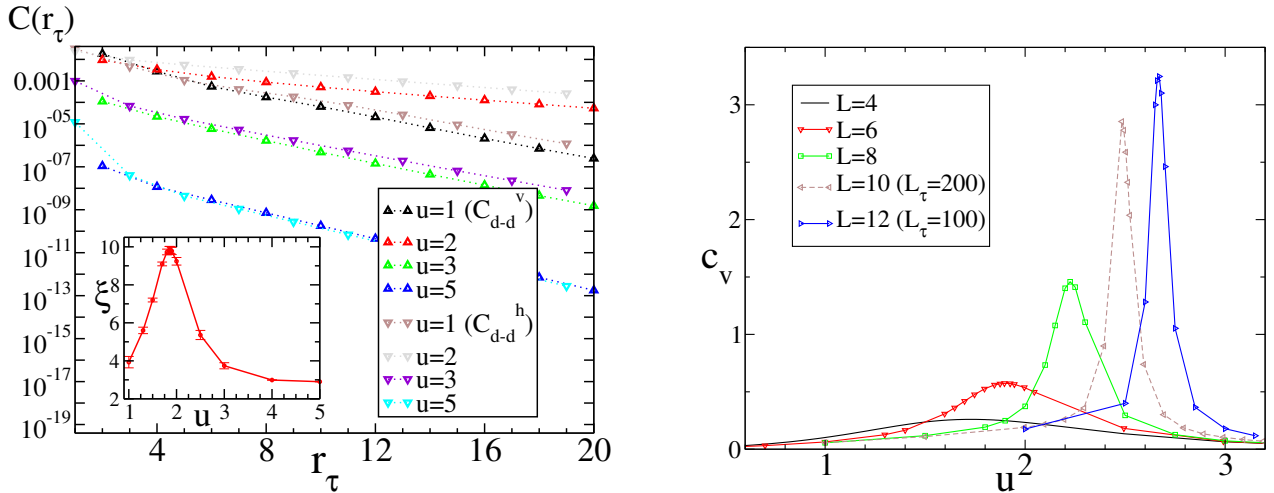


FIG. 2.13 – A gauche : Corrélations de dimères horizontaux (C_{dd}^h) et verticaux (C_{dd}^v) à distance r_τ le long du grand axe d'un tore de dimensions $(L, L_\tau) = (6, 60)$, en fonction de $u(T)$ dans le modèle isotrope sur réseau triangulaire. La longueur de corrélation $\xi(u)$ est extraite de la décroissance exponentielle de ces corrélations. A droite : chaleur spécifique c_v par site ($d\langle E \rangle / dT / (LL_\tau)$) en fonction de u/T pour différentes tailles transverses L .

lyse d'autres quantités : les corrélations de dimères suivant l'axe τ (associées à celles de $\langle m \rangle$), et la chaleur spécifique. Pour les premières, on peut se restreindre aux corrélations entre liens parallèles, à la même position x sur l'axe du cylindre (en fait du tore, les corrélations étant calculées avec $L_\tau \gg L$ fixé). Les corrélations (connexes) C_{dd}^v entre dimères verticaux à distance r_τ paire (plus importantes qu'à distance impaire du fait de la contrainte de dimères), et C_{dd}^h entre dimères horizontaux à r_τ pair, sont montrées sur la figure 2.13 à gauche pour diverses valeurs de u/T . Leur décroissance exponentielle avec r_τ donne une longueur de corrélation ξ bien définie, identique pour les deux types de corrélations ; en fonction de u/T , ξ montre un maximum pour $u/T \sim 1.9(1)$ (pour $(L, L_\tau) = (6, 60)$; une taille L_τ supérieure ne modifie pas les longueurs de corrélations). La longueur de corrélation maximale $\xi_{max} \sim 10 \ll L_\tau/2$ ne diverge pas avec L_τ , ce qui peut être attribué à la finitude de L mais est aussi cohérent avec une transition du premier ordre.

D'autre part, la chaleur spécifique $c_v(u/T)$, qui elle peut être calculée pour des tailles plus grandes ($L \leq 12$), est a priori un bon outil pour repérer la transition et indiquer son ordre. Pour une transition de Kosterlitz-Thouless, $c_v(T)$ ne présente pas de divergence quand $L \rightarrow \infty$ (et la température du maximum ne tend pas nécessairement vers T_c au point de transition). Pour une transition du second ordre, les exposants α et ν (associés respectivement aux scalings de $c_v(T)$ et $\xi(T)$ au voisinage de T_c) déterminent le scaling

de c_v^{max} (maximum de c_v à L fixé) en fonction de L pour un système $L.L$: $c_v^{max} \sim L^{\alpha/\nu}$ (sachant que l'invariance d'échelle donne $\alpha = 2 - 2\nu$ en $2D$). Pour une transition du premier ordre associée à un croisement de niveau donc à une non-dérivabilité (par rapport à T) de l'énergie libre dans la limite thermodynamique, ceci se traduit par une divergence de $c_v^{max}(L)$ en L^2 (L^d en dimension d , avec un pic de largeur $\sim 1/L^d$, approximation continue d'un pic de Dirac). Sur un cylindre $L.\infty$ la situation peut être différente, parce qu'un croisement de niveau entre deux valeurs propres dominantes de la matrice de transfert d'un système fini peut avoir lieu, et on a alors un pic de Dirac à une température $T_c^2(L)$ tendant vers T_c [51]. Le croisement de niveau peut aussi être évité et on a alors une situation similaire au cas $L.L$.

Dans le cas présent, un croisement de niveau pour u/T croissant peut intervenir sur des cylindres de largeur finie : à $u \ll T$ la valeur propre dominante peut être dans le secteur $W_x = 1$ suivant la taille (c'est le cas pour $6 \leq L \leq 10$), tandis que dans la limite $u \gg T$ elle est dans $W_x = 0$. \mathbf{T} étant diagonale bar bloc dans chaque secteur, à L fixé on a nécessairement un tel croisement et une divergence de c_v à une température $T_t(L)$. Si par contre on se restreint au secteur topologique $W_x = 0$, on n'a pas de divergence de c_v sur un système fini ; par contre la courbe $c_v(u/T)$ a un maximum de plus en plus piqué au fur et à mesure que L augmente et d'amplitude croissante avec L . Il est difficile pour si peu de tailles, et compte-tenu de la géométrie particulière associée à la matrice de transfert (on a ici un ratio d'aspect infini), d'effectuer un scaling précis de l'amplitude du pic mais la courbe 2.13 (à droite) semble nettement plus en accord avec une transition du premier ordre qu'avec une transition Kosterlitz-Thouless (comme celle observée à la mise en ordre colonnaire sur le réseau carré). La position du pic, $T_c^2(L)$, représentée dans l'insert de la figure 2.12, est sensiblement identique à $T_c^1(L)$ pour L suffisant, les deux tendant, avec une correction de taille finie $\sim 1/L$, vers une température de transition $T_c \sim 0.20(5)u$ dans la limite thermodynamique.

Conclusion partielle

L'analyse des modèles de dimères classiques en interaction a mis en évidence trois types de phases : les phases colonnaires et alternées sont des prototypes de phases VBC et la phase liquide de dimère d'autre part sont des prototypes de phases VBC et RVB respectivement (du moins en termes de symétries et de corrélations à longues distances). Le troisième type d'état : les phases (ou lignes de points) critiques, dont on comprend l'existence dans les phases de haute température sur des réseaux bipartites (lorsqu'on peut établir une correspondance avec un modèle de hauteurs), est en fait possible sur un réseau non bipartite, le réseau triangulaire, à condition que des interactions suffisamment fortes et anisotropes restaurent une *bipartité effective*. L'utilisation combinée des théories conformes et des techniques de matrices de transfert se révèle alors particulièrement efficace. Sur le réseau triangulaire avec des interactions isotropes attractives, on a une situation doublement originale : premièrement, le nombre de configurations de basse énergie croît exponentiellement avec la taille du système, ce qui laisse penser à la possibilité d'un état désordonné à toutes températures ; deuxièmement on a mis en

évidence une mise en ordre du système par un mécanisme d'ordre par le désordre. Cette mise en ordre au moins partiel (i.e. un ordre orientationnel des dimères, les techniques utilisées ici ne nous permettant pas de dire s'il est accompagné d'un ordre positionnel) est probablement une transition du premier ordre et en tout cas avec une température de transition nettement plus basse que sur les réseaux carré et hexagonal (bipartites, et sans frustration géométrique). Il serait intéressant de considérer l'analogie de ce modèle sur un réseau frustré comme le réseau kagomé, où des interactions favorisant les plaquettes flipables (au sens classique : plaquettes maximalelement occupées) ne permettent pas un ordre colonnaire similaires à celles rencontrées ici.

Chapitre 3

Modèles de dimères quantiques

Nous abordons maintenant les modèles de dimères quantiques, principalement le modèle - ou modèles si on en distingue un par réseau - de Rokhsar et Kivelson [17], introduit par ceux-ci afin de modéliser un état *Short-Ranged Resonating Valence Bond* susceptible d'exister entre autres dans les cuprates à dopage fini. On va d'abord définir le modèle et des concepts génériques associés - spécificité d'un point dit de Rokhsar-Kivelson, rôle des secteurs topologiques, existence d'excitations visoniques. On analysera ensuite les diagrammes de phases du modèle sur les différents réseaux, en faisant ressortir les similarités et différences entre ces derniers. On abordera finalement le sujet des excitations de spin et de charge, motivant l'étude d'un modèle de dimères quantiques dopés en trous de statistique bosonique.

3.1 Définition et particularités du modèle de Rokhsar-Kivelson

3.1.1 Définitions

Le modèle de Rokhsar et Kivelson est défini dans l'espace de Hilbert constitué par les pavages du réseau par des dimères entre sites premiers voisins. Le Hamiltonien est constitué de deux termes : un terme H_J *cinétique*, i.e. non diagonal dans la base des pavages de dimères, qui flippe des dimères sur une boucle de taille minimale pour aboutir à une autre configuration ; et un terme potentiel H_V , qui est simplement l'énergie classique définie au paragraphe 2.2. Plus formellement l'expression du Hamiltonien correspondant est (explicitée ici pour le réseau carré et illustrée plus généralement sur la figure 3.1) :

$$H_{RK} = -J \sum_{\square} (| \Rightarrow \rangle \langle || | + c.c.) + V \sum_{\square} (| \Rightarrow \rangle \langle = | + || | \rangle \langle || |) \quad (3.1)$$

et se généralise en fait aux autres réseaux considérés, en interprétant $| \Rightarrow \rangle \langle || |$ comme un terme de flip sur une boucle de longueur L paire minimale, occupée par $L/2$ dimères : $L = 4$ pour les réseaux carrés et triangulaire et $L = 6$ sur les réseaux hexagonal et kagomé. Le terme potentiel $| \Rightarrow \rangle \langle = | + || | \rangle \langle || |$ vaut 1 si une telle plaquette flippable et 0 sinon.

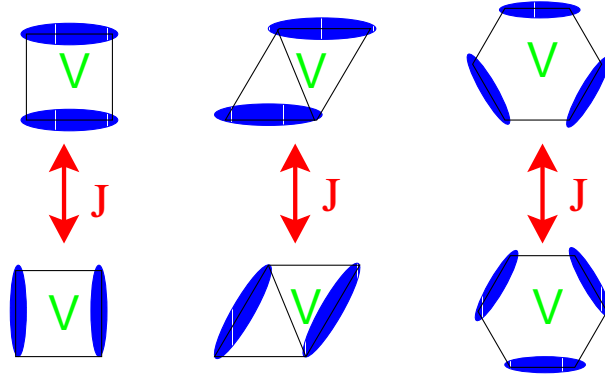


FIG. 3.1 – Les plaquettes élémentaires *flipables* du modèle de Rokhsar et Kivelson et les flips associés (d’amplitude $-J$), sur les réseaux carré, triangulaire, et hexagonal. Le terme d’interaction d’amplitude V compte le nombre de plaquettes flipables.

3.1.2 Point de Rokhsar-Kivelson - correspondance classique-quantique

Une propriété essentielle de ce modèle apparait au point $V = J$ dit de Rokhsar et Kivelson (*point RK*). Dans ce cas, et plus généralement pour peu que $J > 0$, le théorème de Perron-Frobenius (cf par ex. [52]) assure que dans chaque sous-espace où le Hamiltonien est ergodique (i.e. où tous les éléments sont connectés de proche en proche par les termes non diagonaux) le fondamental est non dégénéré. Or, on peut remarquer que H_{RK} s’écrit comme une somme de projecteurs associés aux différentes plaquettes :

$$H_{RK}(J = V) = J \sum_{\square} (| \Rightarrow - || \rangle) (\langle - < || |) = J \sum_{i=1..N} P_i^+ P_i \quad (3.2)$$

ce qui implique que les états propres, et en particulier le fondamental, soient d’énergie positive ; d’autre part, une fonction d’onde particulièrement simple, avec une amplitude égale pour toutes les configurations (dans un sous-espace où H_{RK} est ergodique, qu’on appellera provisoirement *secteur d’ergodicité*),

$$| \Psi_{RK} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_c |c\rangle \quad (3.3)$$

est un état propre de H_{RK} en ce point, d’énergie nulle. C’est donc un fondamental, unique dans son secteur d’ergodicité, et la dégénérescence du fondamental du modèle au point $V = J$ est simplement le nombre de secteurs d’ergodicité. Cette propriété relie le point *RK* au modèle classique sur le même réseau : en effet, $| \Psi_{RK} |^2$ est une somme sur les configurations avec un poids égal pour chaque, comme la fonction de partition du modèle classique - ce en tout cas pour des conditions aux limites ouvertes (supprimant la dégénérescence du fondamental), et donc dans la limite thermodynamique - et la valeur moyenne d’une observable diagonale A dans le fondamental correspond à

sa valeur moyenne dans le modèle classique sans interaction :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_{V=J} &= (1/N_c) \sum_c \langle c|A|c \rangle \\ &= (1/Z) \sum_c A(c) = \langle A \rangle_{cl}(T = \infty) \end{aligned} \quad (3.4)$$

On peut aussi interpréter l'équation de Schrödinger comme une équation maîtresse en temps imaginaire (et discret) ; le fondamental donne les probabilités des différentes configurations à l'équilibre et les énergies d'excitations (resp. états propres) comme les taux de transition et modes propres d'un processus stochastique associé [43].

3.1.3 Correspondance quantique-classique à température finie ; phase critique quantique

On a vu la correspondance, sur un réseau arbitraire, entre le fondamental du modèle de Rokhsar-Kivelson au point $V = J$ et le modèle classique, sans interaction et à fugacités de liens uniformes (i.e. à $T = \infty$). Cette correspondance est généralisable à des fugacités non-uniformes, dans un modèle classique à $T < \infty$ sans interaction (à condition de multiplier les termes potentiels (resp. cinétiques) de H_{RK} par les fugacités des liens en jeu (resp. par les racines carrées de ces fugacités). Pour des fugacités différentes suivant l'orientation des liens, le fondamental est partiellement ordonné (avec un ordre orientationnel à longue distance), et la criticalité des modèles bipartites et isotropes est brisée ainsi que la symétrie du réseau, mais cette brisure de symétrie n'est pas spontanée.

Indépendamment, on peut définir un modèle quantique dont le fondamental est en correspondance avec le modèle classique avec interactions ; dans ce modèle quantique l'énergie d'une configuration est la somme de termes correspondant à ses plaquettes flip-pables, et dépendant de la variation d'énergie classique δE_{cl} résultant d'un flip sur une de ces plaquettes [53]. Plus exactement, le Hamiltonien du modèle quantique est construit de manière à vérifier simultanément le théorème de Perron-Frobenius (dans chaque secteur d'ergodicité du modèle RK) et la positivité du spectre, en s'écrivant comme somme de projecteurs P_i associés aux plaquettes, d'expression :

$$P_i/V = e^{\frac{\delta E_{cl}(= \rightarrow ||)}{2T}} \left| \begin{array}{c} = \rangle \langle = \\ \hline \end{array} \right| + e^{\frac{\delta E_{cl}(|| \rightarrow =)}{2T}} \left| \begin{array}{c} || \rangle \langle || \\ \hline \end{array} \right| - \left| \begin{array}{c} = \rangle \langle || \\ \hline \end{array} \right| - \left| \begin{array}{c} || \rangle \langle = \\ \hline \end{array} \right| \quad (3.5)$$

De cette manière, la correspondance classique-quantique est étendue au modèle classique avec les interactions d'expression 2.8. Le fondamental de ce modèle quantique a les mêmes propriétés que le modèle classique : en particulier, les corrélations dimère-dimère y sont critiques pour toute la gamme de u/T comprise entre les transitions vers les phases alternée et colonnaire ($T/u_{stag} \sim -0.72$ et $T/u_{col} \sim 0.65$ respectivement). On a donc une phase critique étendue pour un modèle avec les flips du modèle de Rokhsar-Kivelson ; par contre l'énergie potentielle pour $u \neq 0$ est constituée de termes d'interaction à, sur le réseau carré, 6 dimères (les 2 d'une plaquette doublement occupée et les 4 dimères

possiblement présents et interagissant avec les 2 premiers, avant ou après leur flip). Cependant on peut remarquer que pour $0 < u/T \ll 1$ et $V = J$ le développement de l'énergie potentielle (i.e. des termes diagonaux des P_i) au premier ordre en u/T donne un terme constant (correspondant au terme en V du modèle RK) et un terme d'amplitude $V_2 = \frac{u}{2T}$, où l'interaction à 6 dimères est découplée en termes à 3 dimères sur des rectangles de longueur 2. On peut ainsi prédire qu'un modèle avec ces deux types d'interactions, et les flips sur plaquette, possède une phase critique pour une amplitude V_2 variable du terme à 3 dimères, mais avec la condition restrictive $V = J$. Or, la dérivation du Hamiltonien de Rokhsar-Kivelson à partir d'un modèle de spins 1/2 donne a priori une valeur différente de V/J (1/2 pour un modèle de Heisenberg et au plus bas ordre en paramètre de recouvrement x); on préférera étudier dans la suite ce modèle pour des valeurs génériques de V/J .

3.1.4 Secteurs topologiques et secteurs d'ergodicité

Pour un système à conditions aux bords périodiques (i.e. un tore), le fondamental possède une dégénérescence due à la non-ergodicité du terme de flip (donc de H_{RK}) dans l'espace des configurations. Sur les réseaux bipartites, les secteurs d'ergodicité (trivialement orthogonaux 2 à 2 et dont l'espace de Hilbert est la somme directe) sont nécessairement inclus chacun dans un secteur topologique, de nombres d'enroulement W_x et W_y donnés. Ces nombres sont en effet conservés par H_{RK} : si un flip fait apparaître ou disparaître deux dimères sur des liens coupant la ligne $y = y_0 + r$, les facteurs $(-1)^{x+y_0}$ de ces liens sont opposés. On peut en fait vérifier que les secteurs d'ergodicité sont identifiables aux secteurs topologiques; il en résulte au point RK exactement autant de fondamentaux que de secteurs topologiques, donc une dégénérescence extensive (de l'ordre de la surface du système).

Sur le réseau triangulaire ou le réseau kagomé, il n'existe pas un tel nombre de secteurs topologiques, mais seulement les 2^g secteurs caractérisés par la parité du nombre de dimères sur g contours indépendants. Contrairement aux réseaux bipartites, le nombre de secteurs topologiques n'est alors pas le nombre de fondamentaux du point RK : par exemple les configurations alternées, au nombre de 12, constituent autant de secteurs d'ergodicité, mais chaque secteur topologique contient des configurations non-alternées (donc flippables) entraînant l'existence d'au moins un autre fondamental. Il y a donc au moins 16 fondamentaux dégénérés au point RK , mais vraisemblablement pas plus et en tout cas un nombre borné dans la limite thermodynamique. Cette différence entre réseaux bipartites et non-bipartites est en lien avec comportement des corrélations dimère-dimère du modèle classique : leur décroissance algébrique sur un réseau bipartite indique que le point RK est un point critique quantique, dont on va voir qu'il sépare deux phases de symétries différentes et situées dans des secteurs topologiques distincts.

3.1.5 Un autre modèle de dimères quantiques sur réseau kagomé

Avant de se focaliser sur le diagramme de phases du modèle de Rokhsar et Kivelson, on va décrire brièvement ici un autre modèle de dimères quantiques qui présente des similarités avec le premier, mais aussi l'avantage d'être exactement soluble, et dans lequel des excitations appelées visons apparaissent naturellement. Ce modèle [18, 54] est défini dans l'espace des pavages de dimères premiers voisins sur le réseau kagomé ; il est également inspiré de la dérivation d'un modèle effectif à partir du modèle de Heisenberg dans la base des singulets premiers voisins. La différence est qu'on considère ici non seulement le terme de flip sur une boucle de taille minimale $l = 6$, mais tous les termes de flip sur des boucles n'entourant qu'un hexagone - ceux listés dans le tableau 1.3. Pour un hexagone h et une configuration $|C\rangle$ donnés, les p dimères ($3 \leq p \leq 6$) touchant l'hexagone appartiennent à une et une seule de ces 32 boucles, le terme de flip correspondant donnant une configuration $|\bar{C}\rangle$, déterminée de manière unique par h et $|C\rangle$. Ainsi, l'opérateur :

$$\sigma^x(h) = \sum_C |C\rangle \langle \bar{C}| \quad (3.6)$$

est un opérateur de symétrie (pas spatiale mais dans l'espace de Hilbert) vérifiant $\sigma^x(h)^2 = 1$. De plus, les opérateurs $\sigma^x(h)$ de deux hexagones différents commutent entre eux. Il est plus facile de s'en convaincre à l'aide d'une représentation des configurations $|C\rangle$ en termes de flèches [55] : sur chaque site, on place une flèche joignant les deux triangles qui s'y joignent, et orientée vers le centre du triangle sur lequel est le dimère touchant le site (voir figure 3.2 à gauche). Le terme de flip $\sigma^x(h)$ retourne toutes les flèches des 6 sites touchant l'hexagone, mais laisse les autres flèches inchangées ; par l'action de deux flips sur des hexagones voisins h et h' seul une flèche est retournée deux fois, indépendamment de l'ordre des flips ; 11 flèches sont retournées une seule fois et les autres 0. D'autre part sur chaque hexagone un opérateur $\sigma^z(h)$ peut être défini [55, 18], en fixant une configuration de référence $|C_O\rangle$ et un hexagone h_0 de référence ; $\sigma^z(h)$ a une valeur ± 1 pour chaque configuration $|C\rangle$, qui est la parité du nombre de boucles traversées de h_0 à h dans le graphe de transition de $|C_O\rangle$ et $|C\rangle$. On a donc une correspondance entre l'ensemble des configurations $|C\rangle$ et celui des configurations de pseudospin $\sigma^z(h)$ (en fait cette correspondance est 2-à-1 sur un système fermé et 1-à-1 sur un tore dans le secteur topologique de $|C_O\rangle$, ce qui fait qu'on doit choisir une configuration de référence par secteur). Les opérateurs ainsi définis vérifient (sauf en h_0 mais on verra que cela ne pose pas de problème) : $\sigma^z(h)\sigma^x(h) = -\sigma^x(h)\sigma^z(h)$ et pour $h \neq h'$ $[\sigma^z(h'), \sigma^x(h)] = 0$, ce qui justifie l'appellation d'opérateurs de pseudospin. Les relations de commutation des $\sigma^x(h)$ assurent que le Hamiltonien :

$$H_{KDM} = - \sum_h \Gamma \sigma^x(h) \quad (3.7)$$

est diagonalisable dans une base propre commune à tous les $\sigma^x(h)$; le fondamental $|\Psi_0\rangle$ est la somme de toutes les configurations (dans un secteur topologique - comme pour le Hamiltonien H_{RK} , celui-ci ne connecte pas différents secteurs puisque les flips sont

locaux) d'égale amplitude. C'est donc le même état que le fondamental du point $V = J$ de H_{RK} (sur le réseau kagomé), mais déterminé de manière différente; on sait par la correspondance classique-quantique que les corrélations de dimères y sont à courte portée (même nulles à distance ≥ 2 [40]), ce qui en fait un état liquide de dimères analogue à celui du réseau triangulaire. D'autre part ici on connaît tout le spectre d'excitations : les excitations locales de plus basse énergie sont caractérisées par des valeurs propres -1 de 2 opérateurs $\sigma^x(h)$ et $\sigma^x(h')$ sur des hexagones voisins, et sont d'énergie 4Γ . Ces excitations correspondent en fait à $\sigma^z(h)\sigma^z(h')|\Psi_0\rangle$; elles sont indépendantes de h_0 puisqu'elles correspondent à inverser le signe des amplitudes des configurations $|C\rangle$ pour chaque boucle, dans le graphe correspondant à $\langle C|C_0\rangle$, croisée sur un chemin de h à h' . Elles sont d'ailleurs indépendantes du chemin exact qu'on choisit de h à h' . (N.B. Pour considérer une excitation $\sigma^z(h_0)\sigma^z(h)$ on change simplement d'hexagone de référence). On appelle les excitations σ^z des *visons* (des termes vortex et Ising) puisque l'application de $\sigma^z(h)$ correspond à retourner un spin $\sigma^x(h) \rightarrow -\sigma^x(h)$ comme le ferait un vortex passant par cet hexagone. Elles sont clairement non locales : leur définition est indépendante de la distance de h à h_0 , qu'on peut faire tendre vers l'infini (ou placer h_0 en un bord du plan avec des conditions au bord ouverte (voir figure 3.2)). Ce sont néanmoins les excitations élémentaires, d'énergie 2Γ (mais existant seulement par paires sur un système sans bord), dans une phase liquide en termes de dimères. Le gap de visons peut s'annuler si on rajoute au Hamiltonien 3.7 un terme favorisant la configuration de référence, qui peut être exprimé en termes d'opérateurs locaux $\sigma^z(h)\sigma^z(h')$ pour des hexagones voisins. En effet, si avec cette modification le fondamental a des dimères essentiellement localisés (comme dans $|C_0\rangle$), des visons peuvent être insérés sans coût d'énergie.

3.2 Les différentes phases du modèle de Rokhsar-Kivelson

Lorsqu'on s'éloigne du point RK , différents types de cristaux quantiques (certains pouvant être définis de manière classique) sont à considérer, en fonction de (V, J) ou du rapport V/J - les cas $J < 0$ et $J > 0$ sont a priori distincts mais, en l'absence de défauts mobiles, équivalents car une transformation canonique (par exemple, sur les réseaux carré et triangulaire, consistant à fixer une configuration alternée $|C_0\rangle$ et à multiplier par -1 l'amplitude d'une configuration $|C\rangle$ chaque fois qu'un dimère de $|C\rangle$ coïncide avec un dimère de C_0) permet d'inverser le signe de J (sans modifier celui de V). On peut donc fixer $J > 0$ et parcourir le diagramme de phase en variant V/J .

3.2.1 Phases alternées et dégénérescence entre secteurs topologiques

On peut commencer par la limite $V \gg J$, où le terme dominant du Hamiltonien fait que le fondamental doit minimiser le nombre de plaquettes flippables et donc correspondre à une phase alternée, comme dans le modèle classique pour $T \ll -u$. En fait, les états sans plaquette flippable sont des états propres triviaux de H_{RK} , d'énergie nulle, et donc sont des fondamentaux (dégénérés) dès que $V > J$: en écrivant

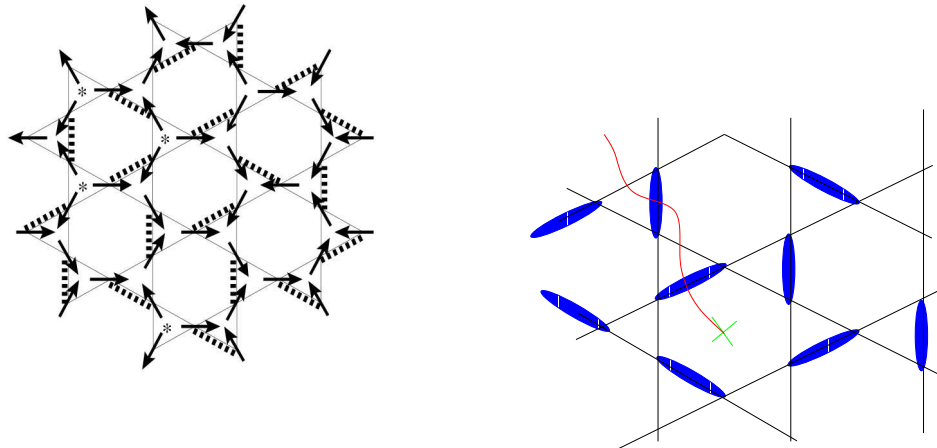


FIG. 3.2 – A gauche : représentation en flèches d’une configuration de dimères (qui sont en pointillés.) Issu de [18]. A droite : image schématique d’un vison inséré par un opérateur $\sigma^z(h)$ sur l’hexagone h marqué d’une croix verte : pour chaque dimère croisant la ligne rouge de h au bord du système l’amplitude de $|C\rangle$ est multipliée par -1 .

$H_{RK}(V, J) = H_{RK}(J, J) + \delta H$, on voit que chaque terme de la somme est un opérateur Hermitien et à valeurs propres positives. Par conséquent les états non-flippables sont des fondamentaux de H_{RK} ; d’autre part tout état propre d’énergie nulle doit être un fondamental de $H_{RK}(J, J)$, dans un secteur topologique donné si on considère un tore, et doit être non-flippable pour être annulé par δH également. La dégénérescence du fondamental est donc le nombre de configurations dans tous les secteurs topologiques non-flippables. Sur le réseau carré, ces secteurs ont pour nombres d’enroulement :

$$(W_x, W_y) = (\pm n, \pm(L/2 - n)) \quad n = 0..L/2 \quad (3.8)$$

Les secteurs $(0, \pm L/2)$ et $(\pm L/2, 0)$ ne contiennent qu’un état chacun (avec une orientation uniforme des dimères et un ordre alterné sur tout l’espace). Dans les autres secteurs, par exemple du type $(n, L/2 - n)$, les configurations comportent n lignes de défauts, i.e. n lignes diagonales de dimères verticaux, tous flippés par rapport à la configuration alternée de $(0, L/2)$ (ce flip est global, un flip local ne connecterait pas deux secteurs différents) et $L/2 - n$ lignes diagonales de dimères horizontaux. Le choix des n lignes de défauts parmi $L/2$ donne $C_{L/2}^n$ états dans ce secteur. Au total le nombre de fondamentaux dégénérés du modèle est :

$$N_f = 4 \sum_{n=1..L/2} C_{L/2}^n = 4(2^{L/2} - 1) \quad (3.9)$$

Ceci implique que la phase alternée est moins ordonnée que la phase colonnaire - l’argument d’ordre par le désordre ne s’applique pas ici, les termes de flips étant inactifs

sur toutes les configurations de basse énergie. Elle est par contre, et c'est une propriété originale, d'énergie insensible au paramètre V/J du modèle (à la condition que $V/J > 1$).

3.2.2 Phases colonnaires

Dans la limite opposée, $V \ll -J$, le terme potentiel en V favorise les mêmes configurations *colonnaires* que dans le modèle classique correspondant pour $u \gg T$. On a donc pour $V \ll -J$, un fondamental z fois dégénéré sur les réseaux hexagonal ($z = 3$) et carré ($z = 4$), brisant les invariances par translation et par rotation autour d'un site du réseau. Pour le réseau triangulaire, le cas $V \ll -J$ est plus complexe : il existe en plus des configurations colonnaires un nombre macroscopique de configurations moins ordonnées mais maximisant aussi le nombre de plaquettes flippables, obtenues à partir des premières par, par exemple, un flip global des dimères d'une colonne [29]. Cependant les configurations colonnaires sont favorisées à un ordre fini en perturbation en J/V par rapport aux configurations moins ordonnées (à l'ordre 4 pour cet exemple). Ainsi, par un phénomène qu'on peut qualifier d'Ordre Quantique par le Désordre, l'ordre colonnaire est favorisé pour $V \ll -J$ sur le réseau triangulaire.

3.2.3 Phases à plaquettes résonantes

On sait que dans tous les cas cités, le point RK n'est caractérisé par aucun ordre de position ou d'orientation de dimères contrairement à la limite $V \ll -|J|$. Pour des valeurs intermédiaires de V/J , la nature de la ou des phases rencontrées n'est pas triviale. Cette question a fait l'objet de plusieurs études, sur différents réseaux ; dans tous les cas, on s'intéresse à une phase ordonnée, mais gagnant de l'énergie de résonance (due au terme de flip) par rapport à la phase colonnaire. Il est donc naturel d'envisager des phases dont la cellule élémentaire comporte un nombre minimal de dimères en résonance sur une plaquette : on parle alors d'une phase *plaquette*. Pour le réseau carré une fonction d'onde variationnelle ayant cette forme serait :

$$|\Psi_{plaq}\rangle = \prod_{p=1..N/4} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \parallel \right\rangle + \left| = \right\rangle \right)_p \right) \quad (3.10)$$

où l'indice $p = 1 \dots N/4$ correspond à $N/4$ plaquettes aux coordonnées $(2x_p, 2y_p)$ ($x_p, y_p = 1 \dots L/2$). Cette phase possède la symétrie de rotation de $\pi/2$ du réseau mais brise une autre symétrie par rapport à la phase colonnaire : la symétrie de translation suivant les colonnes. L'analogue de cette phase sur le réseau hexagonal a pour unités résonantes des plaquettes hexagonales (non connexes les unes aux autres et occupées par 3 dimères) [56]. Sur le réseau triangulaire, l'analogue de la phase plaquette a une cellule élémentaire plus large, de 12 sites (d'où le nom de "*phase $\sqrt{12}$* ") et possède une symétrie de rotation de $2\pi/3$ absente de la phase colonnaire.

Réseau carré : phases plaquette et mixte Une première série d'études [57, 58] a indiqué l'existence d'une phase *plaquette* sur le réseau carré, dans des domaines détendue

significative du diagramme de phase. La première étude s'est basée, par diagonalisation exacte du Hamiltonien pour des systèmes périodiques de taille $L = 4, 6, 8$, sur l'analyse du paramètre d'ordre rotationnel O_{rot} , ou encore de $M_{|-} = (N_{|} - N_{-})/L^2$ (où N_{-} et $N_{|}$ sont les nombres de dimères horizontaux et verticaux respectivement). Une valeur non nulle de $\langle M_{|-}^2 \rangle$ à la limite thermodynamique traduit a priori une brisure de symétrie de rotation, mais cet outil est peu probant pour des systèmes de tailles $L \leq 8$. L'analyse [57] des ratios de Binder $g = \langle |M|^4 \rangle / \langle |M|^2 \rangle^2$ de ces paramètres d'ordre ($g = 3$ si, pour une mesure de M dans l'état fondamental, $p(M)$ suit une loi Gaussienne) tend à conclure que la symétrie de rotation était restaurée pour environ $V/J \geq -0.2$. Une autre étude [58] se basant sur des simulations de Monte-Carlo quantique permettant d'atteindre des tailles beaucoup plus grandes ($L \leq 32$), et analysant à la fois $\langle M_{|-}^2 \rangle$ et le ratio de Binder correspondant, a indiqué que la transition colonnaire-plaquette se situerait plutôt pour $V_c/J = 0.6 \pm 0.05$.

Une étude ultérieure [59] basée également sur des simulations de Monte-Carlo quantique a inclus la possibilité d'une phase jusqu'alors non prise en compte : il s'agit d'une phase brisant simultanément les symétries de translation brisées dans la phase plaquette et la symétrie de rotation brisée dans la phase colonnaire ; on appellera cette phase *mixte colonnaire-plaquette* ou *mixte*. Par des méthodes que nous détaillerons dans le chapitre 4, basées sur l'analyse du spectre de basse énergie et des corrélations d'opérateurs de plaquette définis localement (à la plaquette en \vec{r}) par :

$$P_{\pm}(\vec{r}) = n_{||}(r) \pm n_{=}(r)$$

cette étude a mis en évidence, vers le point $V/J = 0$ un brisure de symétrie, par rapport à la phase colonnaire, de la translation suivant l'axe des colonnes - ce sans que la symétrie de rotation qui caractériserait une phase plaquette soit restaurée. On peut en fait définir deux types de phases mixtes : *mixte 1* et *mixte 2*, suivant le caractère $+1$ ou -1 de la translation d'une colonne à l'autre. Les nombres quantiques des différentes phases autorisées sur le réseau carré sont listées dans le tableau 3.1. Pour les définir on doit se donner non seulement les axes x et y (les translations élémentaires suivant ces axes étant notées T_x et T_y) mais aussi un centre de symétrie O associé au groupe ponctuel C_{4v} du réseau ; on choisit O au centre d'une plaquette. Les nombres quantiques de chaque phase se déterminent en considérant d'abord une fonction d'onde $|\Psi_1\rangle$ simplifiée dont les symétries brisées sont celles de la phase en question, puis on recherche les différentes combinaisons linéaires de $|\Psi_1\rangle$, $T_x|\Psi_1\rangle$, $R_{\pi/2}|\Psi_1\rangle$, etc.. ayant un nombre quantique défini, i.e. un caractère déterminé pour chaque opération de symétrie. Notons que pour certains nombres quantiques, ceux de vecteurs d'onde \vec{k} non-invariants par des éléments de C_{4v} , les fonctions d'onde correspondantes n'ont pas de caractère (ne sont pas états propres) desdits éléments. Dans l'exemple de la phase plaquette : on peut prendre $|\Psi_1\rangle = |\Psi_{plaq}\rangle$ et définir 3 autres fonctions d'ondes par des opérations de symétrie : $|\Psi_2\rangle = T_x|\Psi_1\rangle$; $|\Psi_3\rangle = T_y|\Psi_1\rangle$; $|\Psi_4\rangle = T_xT_y|\Psi_1\rangle$. Les fonctions d'onde

symétrisées définissant les nombres quantiques de la phase plaquette sont :

$$\begin{aligned}
 |\Psi(A1, \vec{k} = (0, 0))\rangle &= 1/2(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle + |\Psi_3\rangle + |\Psi_4\rangle) \\
 |\Psi(A1, \vec{k} = (\pi, \pi))\rangle &= 1/2(|\Psi_1\rangle - |\Psi_2\rangle - |\Psi_3\rangle + |\Psi_4\rangle) \\
 |\Psi(A'1, \vec{k} = (\pi, 0))\rangle &= 1/2(|\Psi_1\rangle - |\Psi_2\rangle + |\Psi_3\rangle - |\Psi_4\rangle) \\
 |\Psi(A'1, \vec{k} = (0, \pi))\rangle &= 1/2(|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle - |\Psi_3\rangle - |\Psi_4\rangle)
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Pour les deux dernières combinaisons (nombres quantiques $A'1, (\pi, 0)$ et $A'1, (0, \pi)$) les vecteurs d'onde ne sont pas invariants par $R_{\pm\pi/2}$ (ni les réflexions par rapport aux diagonales $y = \pm x$), le groupe ponctuel définissant le bon nombre quantique est alors C'_{2v} (réflexions droites R_x et R_y , et rotation R_π).

Pour une phase mixte 1, la fonction d'onde $|\Psi_1\rangle$ doit être non-invariante par $R_{\pi/2}$; on peut prendre par exemple :

$$|\Psi_1^{mixte1}\rangle = \prod_{p=1..N/4} \left(\cos(\alpha) (| \! \! \! \rangle + \sin(\alpha) | \! \! \! \rangle_p) \right) \tag{3.12}$$

où α est un angle quelconque mais non multiple de $\pi/4$. Le produit étant sur les mêmes plaquettes p que pour la phase plaquette ; puis $|\Psi_2\rangle, |\Psi_3\rangle$ et $|\Psi_4\rangle$ définies comme ci-dessus, et $|\Psi_{i+4}\rangle = R_{\pi/2}|\Psi_i\rangle (i \leq 4)$. Sans lister toutes les combinaisons linéaires symétrisées de ces 8 fonctions d'onde, on peut donner l'exemple de celles de nombre quantique $[A'1, (\pi, 0)]$:

$$\begin{aligned}
 |\Psi(A'1, \vec{k} = (\pi, 0))^{(1)}\rangle &= 1/2(|\Psi_1\rangle - |\Psi_2\rangle + |\Psi_3\rangle - |\Psi_4\rangle) \\
 |\Psi(A'1, \vec{k} = (\pi, 0))^{(2)}\rangle &= 1/2(|\Psi_5\rangle + |\Psi_6\rangle - |\Psi_7\rangle - |\Psi_8\rangle)
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Ainsi les nombres quantiques des différentes phases ordonnées du modèle sont déterminés, et listés dans le tableau 3.1. Ils permettent d'identifier une phase grâce aux dégénérescences du fondamental correspondant dans la limite thermodynamique.

Méthode variationnelle pour les phases plaquette et mixtes On peut dans un premier temps décrire cette transition dans une approche variationnelle décrivant une phase (plaquette ou mixte) ordonnée en plaquettes résonantes, invariante par les translations $T_{2,0}$ et $T_{0,2}$, et qu'on peut donc décrire qualitativement par :

$$\begin{aligned}
 |\Psi[\phi]\rangle &= \prod_{p=1..N/4} |\Psi_p(\phi)\rangle \\
 |\Psi_p(\phi)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos(\phi)| \! \! \! \rangle + \sin(\phi)| \! \! \! \rangle_p)
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

L'énergie variationnelle $E(\phi) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle(\phi)$ (par plaquette résonante) est :

$$H_1(\phi) = -2J \sin(\phi) \cos(\phi) + V(1 + \cos^4(\phi) + \sin^4(\phi)) \tag{3.15}$$

Phase →	Mixte1	Mixte2	Plaquette	Colonnaire
$(A1, q = (0, 0))$	X	X	X	X
$(B1, q = (0, 0))$	X	X	0	X
$(A1, q = (\pi, \pi))$	X	0	X	0
$(A'1, q = (\pi, 0))(1)$	X	X	X	X
$(B1, q = (\pi, \pi))$	X	0	0	0
$(A'1, q = (\pi, 0))(2)$	X	0	0	0
$(A', q = (\pi/2, \pi))$	0	X	0	0

TAB. 3.1 – Nombres quantiques des phases attendues pour $V \leq J$: phases mixtes (*mixte1* et *mixte2*), colonnaire et plaquette. Une croix indique la compatibilité du nombre quantique avec la phase. Les représentations $A1$ et $B1$ sont celles du groupe C_{4v} , $A'1$ est celle du groupe C_{2v} ($1, R_\pi, R_x$ et R_y) et A' du groupe C_v (1 et R_y). Les nombres quantiques de vecteurs $(\pi, 0)$ (resp. $(\pi/2, \pi)$) en impliquent autant de vecteurs $(0, \pi)$ (resp. $(-\pi/2, \pi)$ et $\pi, \pm\pi/2$).

L'interaction entre plaquettes résonantes est comprise uniquement dans le terme $V(\cos^4(\phi) + \sin^4(\phi))$, pour lequel $\phi = \pi/4$ (qui correspond à un état symétrique par rotation de $\pi/2$ maximisant la résonance de plaquettes isolées) est un extrémum, maximum pour $V < 0$. La minimisation de $E(\phi)$ par rapport au paramètre variationnel ϕ (qu'on peut restreindre à $[0 : \pi]$) donne une valeur ϕ_0 qui, si elle est différente de $\pi/4$, indique une brisure de symétrie de rotation de $\pi/2$ (NB : le signe de ϕ_0 est celui de J , or on se restreint ici à $J > 0$). Notons aussi qu'on doit rigoureusement considérer une fonction d'onde symétrisée, du type :

$$(\mathbf{1} + T_{1,0} + T_{0,1} + T_{1,1})|\Psi[\phi]\rangle$$

pour une fonction d'onde $q = (0, 0)$, ou une expression adaptée pour d'autres représentations. Ceci dit, les produits scalaires croisés du type $\langle \Psi | T_{1,0} | \Psi \rangle$ ou $\langle \Psi | HT_{1,0} | \Psi \rangle$ disparaissent dans la limite thermodynamique (sur un système fini, par exemple le premier terme ne fait intervenir que les configurations où les dimères de toutes les plaquettes résonantes ont la même orientation, donc un terme en $\cos(\phi)^{N/4}$).

Pour $V/J < -1$, cette méthode conduit à :

$$\begin{aligned} \sin(2\phi_0) &= -J/V \\ E_1(\phi) &= \frac{J^2}{2V} + 2V \end{aligned} \tag{3.16}$$

tandis que pour $V/J > -1$,

$$\begin{aligned} \phi_0 &= \pi/4 \\ E_1(\phi) &= 3V/2 - J \end{aligned} \tag{3.17}$$

La même approche permet de considérer un autre type de phase mixte (*mixte 2*), qui se distingue de la première par un shift d'une rangée de plaquettes résonantes sur deux,

et donc la brisure de l'invariance par translation suivant $2\vec{e}_y$. Dans cette structure l'interaction entre plaquettes est moindre ; en conséquence la phase *mixte 2* apparaît, pour $0 < V < J$, comme la plus stable des phases à plaquette résonantes dans cette approche variationnelle, avec une énergie $E_2 = 5V/4 - J$. Cependant cette approche néglige totalement les corrélations de positions à des distances impaires et les corrélations d'orientation des dimères entre différentes plaquettes résonantes, et est d'autant moins valide qu'on se rapproche du point de Rokhsar-Kivelson où l'image de résonances localisées sur 1/4 des plaquettes perd son sens. En fait, la comparaison des énergies variationnelles précédentes avec l'énergie par plaquette (qu'on peut aussi qualifier de variationnelle) E_{RK} de la fonction d'onde $|\Psi_{RK}\rangle$ indique que cette dernière est plus basse que $E_1(\phi)$ et E_2 : en effet, $E_{RK} = \langle \Psi_{RK} | H_V + H_J | \Psi_{RK} \rangle$ est la somme de deux termes proportionnels à la *flippabilité* n_{fl} d'une plaquette (probabilité qu'elle soit flippable) dans l'état $|\Psi_{RK}\rangle$ ou de manière équivalente dans le modèle classique sans interactions. Cette quantité est simplement le double de la fonction de corrélation de position (non connexe) de deux dimères d'orientation donnée sur une plaquette, soit $n_{fl} = 2 \cdot (1/8)$, et il s'ensuit $E_{RK} = (V - J)n_{fl} = (V - J)/4$. Le diagramme de phase variationnel (figure 3.3) ne laisse donc pas de place à la phase *mixte 2* mais une transition entre la phase plaquette et une *phase RK* qui s'étendrait de $V = 0$ à $V = J$.

Résultats d'une approche numérique Dans une approche plus exacte, l'étude numérique [59] ne trouve pas de domaine de stabilité de la phase *mixte 2*, ni de la *phase RK* (hormis au point critique $V = J$) mais par contre une phase *mixte 1* pour un large domaine de l'espace des phases ($0 < V/J < 0.9(1)$). Pour $V < 0$, la stabilisation de la phase colonnaire par rapport à la phase mixte, non retrouvée dans cette approche variationnelle, est explicable par un phénomène d'ordre par le désordre quantique (les fluctuations quantiques dues au terme de flip étant maximisées dans la phase colonnaire).

Il est intéressant de remarquer le lien entre le paramètre ϕ_0 et la hauteur moyenne de la phase ordonnée correspondante : en effet, une phase colonnaire est caractérisée par $\phi_0 = n\pi/2$ et des hauteurs demi-entières tandis qu'une phase plaquette ($\phi_0 = (2n + 1)\pi/4$) correspond à des hauteurs moyennes entières - un champ de hauteurs moyennes, introduit précédemment pour les dimères classiques, peut être défini localement pour un état quantique comme la moyenne sur les configurations de dimères (pondérée par leurs coefficients au carré) des hauteurs classiques. Pour des phases ordonnées invariantes par translations de $2\vec{e}_x$ et $2\vec{e}_y$, un calcul sur une cellule de dimensions $2 * 2$ est suffisant et donne une hauteur (moyennée sur cette cellule) à valeurs entières (phase plaquette), demi-entières (phase colonnaire) et intermédiaires (phases mixtes). L'approche variationnelle indique donc une variation continue de la hauteur sur l'axe V/J . Ce scénario peut être décrit par un modèle de hauteurs en dimension $2 + 1$, avec une action (en temps Euclidien) [60] :

$$S = \int d\vec{r}d\tau [(\delta_\tau h)^2 + \rho_2(\nabla h)^2 + \rho_4(\nabla^2 h)^2 + \lambda \cos(2\pi h) + \mu \cos(4\pi h)] \quad (3.18)$$

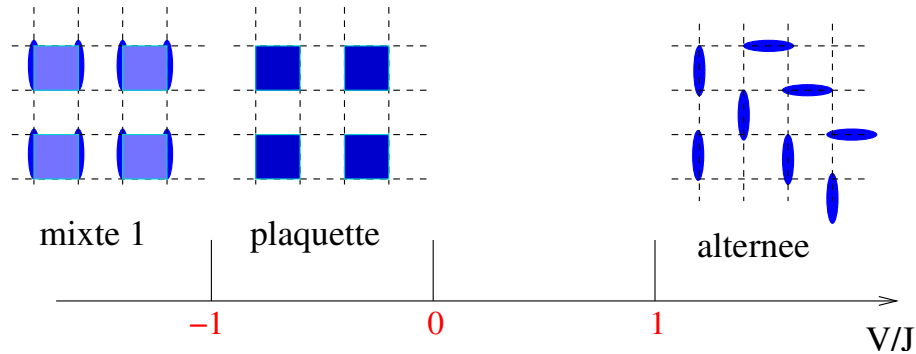


FIG. 3.3 – Diagramme de phase du modèle de Rokhsar-Kivelson sur le réseau carré, obtenu par l’approche variationnelle. Pour $0 \leq V \leq J$ l’approche variationnelle ne prédit pas d’état plus stable que le fondamental du point RK, et n’est pas concluante. Pour $V < 0$ elle prédit 2 phases á plaquettes résonantes : phase plaquette ($-J < V$) et *mixte 1* ($V < -J$).

Concentrons nous d’abord sur le point $V = J$, où on va voir le lien avec l’action classique 2.23. On peut déjà noter qu’en ce point ρ_2 doit s’annuler (ρ_4 étant supposé positif) ; en effet, pour $V > J$, les pentes maximales (i.e. la phase alternée) sont favorisées, tandis que pour $V < J$ toutes les phases en compétition ont un champ de hauteurs uniforme. Au point *RK*, l’action peut être traduite par une équation de Schrödinger pour une fonctionnelle du champ de hauteurs, $\Psi[h]$; la solution $\Psi_0[h]$ correspondant au fondamental doit être, comme au niveau microscopique, en correspondance avec le modèle classique sans interaction décrit par l’action 2.23. En fait on peut remarquer [60] que l’équation de Schrödinger associée à l’expression 3.18 peut se réécrire à l’aide d’opérateurs conjugués $Q(\vec{r})$ et $Q^+(\vec{r})$, sous une forme positive au point $V = J$ - (de la même manière que H_{RK} s’écrit comme une somme sur les plaquettes $i = 1 \dots N$ de projecteurs $P_i^+ P_i$) :

$$Q^{(+)}(\vec{r}) = \pm \frac{d}{dh} + \sqrt{\rho_4} \nabla^2 h + 2\pi(\lambda \sin(2\pi h) + 2\mu \sin(4\pi h)) \quad (3.19)$$

Le fondamental correspond alors à un champ de hauteurs $h[\vec{r}]$ annihilé en tout point \vec{r}_0 par $Q(\vec{r}_0)$, et est donc de forme :

$$\Psi_0[h] = K e^{-S_{cl}[h]/2} \quad (3.20)$$

où S_{cl} l’action du champ classique 2.23, pour $g_0 \sim \sqrt{\rho_4}$ (les termes en $\cos(2\pi p h)$ sont inclus a priori mais non pertinents ici). Pour des valeurs arbitraires de V/J , le terme ρ_2 n’est pas nul et sélectionne des fondamentaux de pente minimale ou maximale, suivant le signe de $V - J$; pour $V < J$, les termes en $\cos(2\pi p h)$ déterminent le type d’ordre (plat en terme de hauteurs) du fondamental. Pour $\lambda > 0$ et $\mu < 0$ les valeurs demi-entières de h sont favorisées par les 2 termes correspondants et donc décrivent une phase colonnaire.

Pour λ et μ négatifs, les valeurs entières de h sont favorisées, et correspondent aux 4 fondamentaux dégérés de la phase plaquette. Par contre si $\mu > 0$ le terme $\cos(4\pi h)$ défavorise les états plaquette ou colonnaire, au profit d'un autre type de phase ordonnée (puisque le terme $\cos(2\pi h)$ n'en est pas moins relevant que dans les cas précédents).

Sachant que pour $V \ll -|J|$ on a une phase colonnaire décrite par $\lambda > 0 > \mu$, on peut considérer qu'en augmentant J/V , soit λ soit μ change de signe. Dans le premier cas on aboutit à ($\lambda < 0, \mu < 0$) ce qui se traduirait par une transition directe colonnaire-plaquette, du premier ordre vu les symétries brisées distinctes de chaque phase - cette transition n'est pas observée numériquement. Par contre si $\mu \geq |\lambda|/4$, la minimisation de $\lambda \cos(2\pi h) + \mu \cos(4\pi h)$ (sur l'intervalle $0 \leq h < 4$ auquel on peut se restreindre grâce à l'invariance par $h \rightarrow h + 4$) donne 8 minima dégénérés (tels que $\lambda + 4\mu \cos(2\pi h_i) = 0$) correspondant au fondamental 8 fois dégénéré d'une phase mixte brisant simultanément les symétries de rotation et de translation brisées séparément dans les phase plaquette et colonnaire. On peut donc interpréter le diagramme de phase trouvé dans [59] de la manière suivante : la phase colonnaire est décrite par une action de hauteur telle que $\lambda > 0$ et $\mu \leq \lambda/4$, favorisant les hauteurs demi-entières ; lorsque J/V augmente, μ augmente également et la transition à une phase mixte intervient à $\mu = \lambda/4$; dans cette phase, la hauteur favorisée dans chaque intervalle $n/2 \leq h < (n+1)/2$ évolue continûment avec μ/λ , d'une valeur demi-entière jusqu'à une valeur entière correspondant à la transition mixte-plaquette, si celle-ci intervient avant la transition du point RK . Comme ces 2 transitions font intervenir des paramètres indépendants (μ/λ et ρ_2 respectivement) rien ne permet de prédire si la symétrie de rotation de $\pi/2$ est effectivement restaurée avant le point RK - les résultats numériques actuels donnent les deux situations également possibles (phase mixte jusqu'au point RK ou phase plaquette dans un intervalle très réduit de V/J).

Réseau triangulaire : phase résonante dite *phase* $\sqrt{12}$ Sur le réseau triangulaire, l'analogue de la phase *plaquette* a ici une cellule élémentaire de 12 sites et possède une symétrie de rotation de $2\pi/3$ absente de la phase colonnaire. L'analyse précédente n'est pas valide ici, en l'absence de modèle de hauteur associé. Des études numériques ont confirmé l'argument d'ordre par le désordre prouvant la stabilité de la phase colonnaire pour $V \ll -|J|$, jusqu'à environ $V/J = 0.7(1)$ - la transition vers la phase $\sqrt{12}$ à ce point est repérable par une analyse des croisements de niveaux entre fondamentaux des différents secteurs topologiques sur des clusters toriques [61].

Pour comprendre l'existence de cette phase $\sqrt{12}$, analogue à la phase plaquette du réseau carré mais de structure plus complexe, on peut remarquer que les plaquettes associées aux flips de dimères, i.e. des losanges, n'ont pas la symétrie de rotation de $\pi/3$ du réseau ; ainsi une phase plus ordonnée, à base de plaquettes en losanges résonants, serait plus déstabilisée par des défauts shiftant des lignes de plaquettes résonantes que sur le réseau carré. Il en irait de même pour une phase de type *mixte* - la brisure de symétrie de translation dans les colonnes ne s'accompagnerait pas d'une cohérence inter-colonne, du fait de ces défauts. Ceci explique qualitativement que, lorsque les effets du

terme de résonance l'emportent sur les interactions, la phase favorisée est la phase $\sqrt{12}$.

3.2.4 Phase liquide du réseau triangulaire et condensation de visons

Dans le modèle sur réseau triangulaire, en approchant du point RK , on trouve une transition de la phase $\sqrt{12}$ à une phase plus particulière : il s'agit d'une phase sans brisure de symétrie du réseau, liquide au sens où les corrélations dimère-dimère décroissent exponentiellement avec la distance (comme on l'a déjà vu dans le modèle classique sans interaction, correspondant au fondamental du point RK) ; de plus les monomères y sont déconfinés, ce qu'on caractérise par l'absence de gap topologique (la différence entre les énergies des fondamentaux dans les différents secteurs topologiques est exactement nulle au point RK , et dans le reste de cette phase elle décroît en e^{-cL} avec la taille L du système). Une manière de repérer la transition entre les phases $\sqrt{12}$ et liquide est donc le calcul (sur des tores de dimensions finie, suivi d'un size-scaling) de ce gap topologique en fonction de V/J . L'analyse d'un paramètre d'ordre adapté à la phase $\sqrt{12}$, s'annulant à l'entrée dans la phase liquide, confirme ceci, et situe la transition vers $V/J \approx 0.82(2)$; mais une quantité plus caractéristique est le gap correspondant à un type d'excitations non locale, les *visons*. Ceux-ci peuvent être définis, comme sur le réseau kagomé (mais sur les centres de triangles ici), par un opérateur comptant, dans le graphe de transition d'une configuration $|C\rangle$ avec une configuration de référence $|C_0\rangle$, la parité du nombre de boucles sur un chemin allant d'un triangle donné à l'infini. [62]. Si dans une phase liquide comme ici au point $V = J$ les visons sont les excitations élémentaires, on peut les considérer pour décrire une transition de cette phase vers un isolant de Mott [64] : les excitations visoniques sont gappées dans le premier cas et ce gap s'annule à la transition (on parle alors de condensation de visons).

On a vu qu'on ne peut pas définir d'excitation à un vison (ou un nombre impair de visons) sur un système torique, ou généralement sans bords. En diagonalisation exacte, le gap d'une excitation à un vison peut néanmoins être évalué par l'énergie E_v du fondamental d'un Hamiltonien où par rapport au Hamiltonien 3.1 le signe du flip sur une plaquette a été inversé, comparée à E_0 du fondamental initial. Alternativement, par des méthodes de Monte-Carlo, on peut obtenir les corrélations spatio-temporelles à 2 visons, dont la décroissance exponentielle avec le temps t donne le gap de vison [63]. Sur le réseau triangulaire, les excitations visoniques, bien que n'étant pas produites par les termes (locaux) J et V de l'Hamiltonien, sont les excitations élémentaires dans la phase liquide, plus basses en énergie que les excitations de dimères. Il est donc cohérent qu'à la transition de la phase liquide de dimères vers la phase $\sqrt{12}$, le gap des visons s'annule, d'où la condensation, et l'opérateur de vison acquiert une valeur moyenne non nulle dans la phase cristalline. Pour en avoir une interprétation imagée on peut considérer que dans la phase ordonnée de type $\sqrt{12}$ représentée par un état $|\Psi_0\rangle$ brisant la symétrie de translation, un vison peut être créé en \vec{r}_0 entre deux régions résonantes (de 12 sites chacune) voisines, sans modifier $|\Psi_0\rangle$ puisqu'il existe une ligne allant de \vec{r}_0 à l'infini sans croiser de dimère.

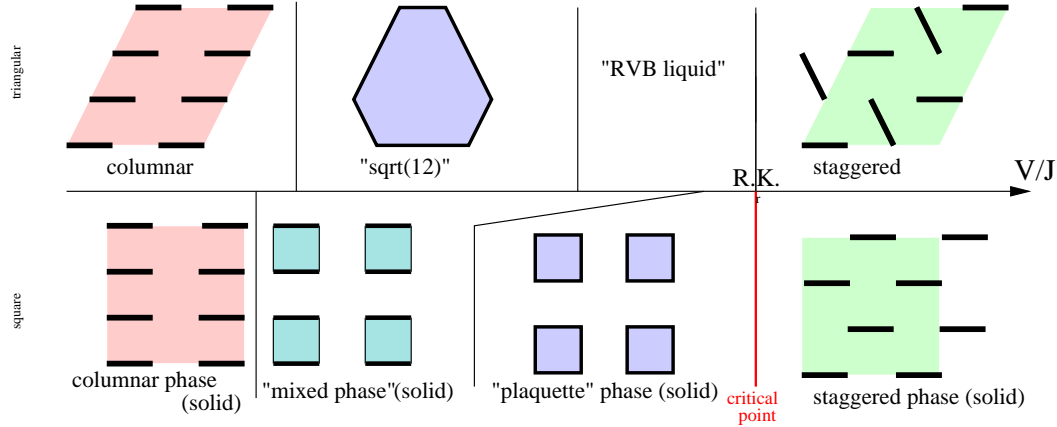


FIG. 3.4 – Diagramme de phases du modèle de Rokhsar-Kivelson en fonction de V/J , sur les réseaux carré et triangulaire.

3.3 Excitations de vortex et de trous dans les modèles de dimères quantiques

3.3.1 Interprétation physique des trous et statistiques fermionique et bosonique

Comme pour les modèles classiques, on peut considérer dans un modèle de dimères quantiques la présence de trous, i.e. de sites dont les z liens attenants sont dépourvus de dimère. Le rôle des trous a été considéré dès la définition du modèle de Rokhsar et Kivelson [17], qui représentaient ainsi les charges positives ($+e$) ou *holons* résultant du dopage en trous d'un isolant de Mott présentant à remplissage commensurable (1 électron par site) une phase *RVB*. Cela dit, dans ce contexte, les trous peuvent aussi bien modéliser des spinons, issus d'une excitation magnétique brisant un singulet pour former 2 spinons, intrinsèquement non appariés. Une question essentielle concernant ces excitations est celle de leur confinement et de la possibilité d'un appariement de trous - dans une phase *RVB*, des trous appariés et stables par rapport à la séparation de phase (formation de paires de trous) peuvent constituer des paires de Cooper dont la condensation constitue la transition vers une phase supraconductrice.

Partons de considérations basées sur les corrélations de position de 2 monomères, calculées en considérant l'insertion de 2 trous statiques dans le fondamental du modèle de Rokhsar-Kivelson (donc initialement sans monomère). On a vu qu'au point $V = J$, 2 monomères sont algébriquement confinés sur les réseaux carré et hexagonal, mais déconfinés sur le réseau triangulaire. En fait, sur ce réseau ils sont déconfinés dans toute la phase liquide ($0.82(2) < V/J \leq 1$). Par contre, puisqu' une plaquette possédant un trou n'est pas flippable, les phases cristallines de type colonnaire ou plaquette tendent à confiner des trous, pour minimiser le nombre de plaquettes non flippables [65]. Un cas particulier

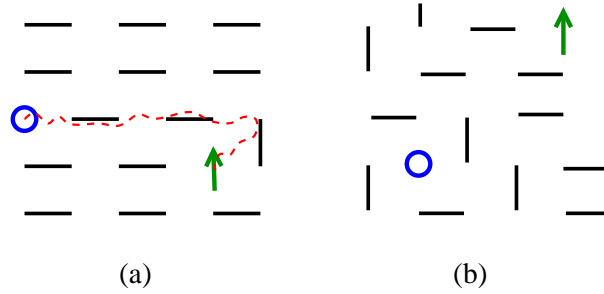


FIG. 3.5 – L'éloignement d'un spinon par rapport à un holon (ou l'inverse) dans une phase colonnaire sur le réseau carré est défavorisé par la diminution résultante du nombre de plaquettes flippables, au contraire d'une phase alternée où deux monomères peuvent se déplacer sans coût énergétique. Issu de [72].

est celui des phases alternées, où les trous sont déconfinés : 2 trous à distance arbitraire dans une direction donnée peuvent se déplacer sans créer aucune plaquette flippable (défavorisée dans ce type de phase) (voir figure 3.5). On voit donc que dans un modèle de dimères quantiques, un dopage infinitésimal crée des comportements très différents suivant la phase préexistante, et que selon les cas deux trous peuvent être déconfinés les uns des autres et vus comme des excitations indépendantes. Il convient de préciser que la statistique des trous (fermions ou bosons) dans un modèle de dimères quantiques est un élément fondamental, puisqu'elle intervient dans les processus cinétiques de saut de trous. Si on considère le processus élémentaire créant ces excitations dans une phase *RVB* : l'arrachage d'un électron au système non-dopé, on peut considérer qu'il en résulte une quasi-particule portant la charge (relative) $+e$ et sans spin (holon) et un électron non apparié (spinon), et la question de savoir laquelle des deux excitations est fermionique et laquelle est bosonique (on ne considère que ces 2 possibilités, suite à l'arrachage d'un fermion) n'est pas triviale du fait que ces quasi-particules sont conditionnées par l'environnement de singulets [68, 69, 70]. Si on s'intéresse au transport de charge à dopage fini en trous $x \neq 0$, on peut se focaliser sur les holons qui ont alors une densité finie. En 2 dimensions il est impossible [71] de distinguer un boson d'un fermion lié à un vortex - si un holon a une nature fermionique (comme il a été conclu dans [68]) mais forme un état lié avec une excitation visonique ([70]), l'excitation résultante est bosonique. On peut donc considérer dans la suite une statistique bosonique des holons pour considérer leur dynamique dans un modèle de dimères dopé en trous.

3.3.2 Modèle de dimères dopés en trous bosoniques

La conclusion précédente, d'une statistique bosonique des holons, autorise et suggère une étude numérique par méthode de Monte-Carlo, en choisissant les amplitudes de saut de trous de même signe que J . Une telle étude [66] a traité en parallèle les réseaux carré et triangulaire, avec comme but de déterminer quand il y a séparation entre une phase

crystalline et une phase riche en trous, ou quand des trous injectés sont stables par rapport à la formation de ce type de phase. Cependant, des trous statiques dans une phase ordonnée de dimères (pouvant modéliser le composé parent d'une phase supraconductrice) ne permettent pas de distinguer l'appariement et la séparation de phase. D'autre part, des trous de charge $+e$ dans un isolant de Mott ont naturellement une dynamique induite par celle des électrons avoisinants. On considère alors un modèle avec des termes de saut de trous (bougeant nécessairement un dimère voisin) :

$$H_{RK} = -J \sum_{\square} (| \Rightarrow \langle \parallel | + c.c.) + V \sum_{\square} (| \Rightarrow \langle = | + | \parallel \rangle \langle \parallel |) - t \sum_{\square} (| \cdot | \rangle \langle \cdot | + sym.) \quad (3.21)$$

Sur le réseau carré on peut considérer différents processus de sauts, soit suivant la diagonale d'une plaquette (comme dans le Hamiltonien 3.21) soit des sauts à distance 2 suivant les axes du réseau. Les deux choix sont sensiblement équivalents (sauf dans des cas particuliers comme la phase alternée). Sur le réseau triangulaire, les sauts élémentaires sont les sauts d'un trou sur un site voisin d'un même triangle, le dimère déplacé restant sur ce triangle.

Dans ce cadre, on peut s'attendre à ce qu'une mobilité suffisante des trous déstabilise le régime de séparation de phase totale entre une phase de trous et une phase ordonnée de dimères. Des études du modèle de dimères quantiques dopé ont été réalisées pour évaluer la possibilité de séparation de phase en fonction du dopage (fraction x : rapport du nombre de trous sur celui de sites), de la mobilité des trous, et du rapport V/J [66, 67]. A taille et paramètres t, J, V fixés, l'analyse se base sur une construction de Maxwell - recherche de la fraction x_c minimisant la $d(x) = (e(x) - e(0))/x$ (où $e(x)$ est l'énergie par site pour un dopage x ; on peut interpréter $d(x)$ comme l'énergie moyenne d'un trou dans un environnement de concentration x). Ce dopage x_c est celui d'une phase stable par rapport à une variation infinitésimale de x . Si la courbure de $d(x)$ est négative en 0 mais devient positive en x_c , un dopage infinitésimal conduit nécessairement à une séparation de phase entre une phase sans trous et une phase à concentration x_c .

Cette analyse montre que la séparation de phase intervient dans les situations où le système non dopé est ordonné (phases colonnaire, plaquette ou mixte), à faible dopage - et que dans ce cas la concentration optimale x_c , limite supérieure du régime de séparation de phase, est d'autant plus importante que l'ordre cristallin est robuste (par ex. sur le réseau carré, x_c croît avec $|V/J - 1|$) et que la mobilité t des trous est faible : en effet l'existence de ce dopage optimal x_c résulte d'une compétition entre l'ordre de dimère du cristal sous-jacent, tendant à agréger les trous, et leur énergie cinétique tendant à déstabiliser une phase de trous dans un environnement de dimères. Par contre, dans une phase de type liquide de dimère $x_c = 0$ (c'est vrai en tout cas pour $V/J \geq 0.9$ dans la phase liquide de dimères du réseau triangulaire : voir la figure 3.6). Ceci signifie que des trous injectés dans ce liquide sont stables vis-à-vis de la séparation de phase trous-dimères, ce qui est attendu du fait que des trous statiques y sont déconfinés dans l'approche classique.

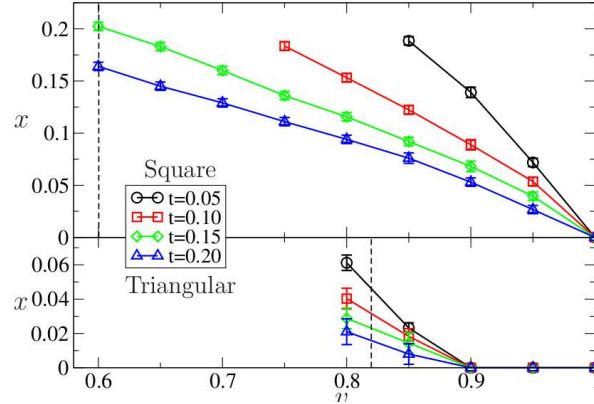


FIG. 3.6 – Pour différentes valeurs de t/J (paramètres de 3.21), les limites $x_c(V/J)$ telles que pour $x < x_c$ le système subit une séparation de phase entre phase à concentration en trous x_c et phase non dopée. Issu de [66].

Conclusion partielle

On a vu dans ce chapitre la richesse des situations rencontrées dans le modèle de dimères quantiques de Rokhsar et Kivelson, en termes de diagramme de phases comme d'excitations. si les phases colonnaires et alternées sont attendues lorsque le terme potentiel en V prédomine, la caractérisation des phases à plaquettes résonantes nécessitent plus d'attention, comme on l'a vu pour le réseau carré avec la distinction des phases plaquette et *mixte 1*. Ces phases sont des prototypes de cristaux à liens de valence résonants qu'on peut trouver dans des systèmes physiques réels, et fondamentalement différent des phases ordonnées (colonnaire et alternée) d'un modèle de dimères classiques. Une autre particularité du modèle de Rokhsar et Kivelson est l'existence du point du même nom, où le fondamental est connu exactement, grâce aux approches classiques du chapitre précédent. La phase liquide existant en ce point sur le réseau triangulaire se prolonge en fait à toute un domaine fini du diagramme de phase, ce qui en fait un exemple remarquable de phase de type *RVB*, présentant toutes les propriétés d'un liquide de spin : absence d'ordre local, excitations gappées et dégénérescence topologique du fondamental. Les excitations élémentaires de cette phase, les visons, sont aussi retrouvées dans un autre modèle de dimères quantiques, sur réseau kagomé, et dans les deux cas une transition vers une phase ordonnée s'accompagne de leur condensation. D'autre part un modèle de dimères dopé en trous permet d'aborder, en tenant compte de leur dynamique, les questions de confinement des trous et de séparation de phases dans une phase *RVB* ou *VBC* dopée.

Chapitre 4

Phases de singulets résonants dans un système d'électrons corrélés

Dans le chapitre précédent nous avons vu principalement les caractéristiques des modèles de Rokhsar-Kivelson dérivés dans un contexte d'électrons localisés en interactions magnétiques, et la variété de phases prédites par ces modèles sur les différents réseaux 2D usuels. On va voir que la physique des dimères se retrouve dans un autre contexte, sur des réseaux de type pyrochlore avec de fortes interactions et un remplissage commensurable, mais dont une limite de fortes interactions entraîne un nombre macroscopique de configurations de charge de basse énergie. Sur le réseau damier ou pyrochlore 2D à un remplissage d'une particule par site, en traitant le terme cinétique d'un Hamiltonien de Hubbard étendu en perturbation par rapport aux fortes interactions on définit un Hamiltonien effectif qui, pour des particules bosoniques, est le terme de flip du modèle de dimères quantiques sur réseau carré. Par une dérivation analogue pour des particules fermioniques, on peut envisager différents phases distinguables par leurs symétries brisées. Après avoir eu une première image du diagramme de phases du modèle par un traitement variationnel, on décrit des méthodes numériques de diagonalisation exacte qu'on utilise ensuite pour caractériser ces phases plus précisément.

4.1 Du modèle de Hubbard étendu à un modèle de dimères

4.1.1 Définition et conséquences de fortes interactions sur site

On part tout d'abord d'un modèle de Hubbard étendu sur un réseau damier (pyrochlore $2D$). Le modèle comprend des interactions U sur site et V aux proches voisins,

et une amplitude t de saut aux premiers voisins :

$$H_0 = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i, \sigma}^\dagger \cdot c_{j, \sigma}^\dagger + U/2 \sum_i n_i(n_i - 1) + V \sum_{\langle i, j \rangle} n_i n_j$$

$$H_0 = H_t + H_V + H_U \quad (4.1)$$

Ici, sont considérés comme premiers voisins les sites appartenant à un même tétraèdre. Ce ne sont donc pas seulement des sites à distance respective minimale - en prenant pour unité la distance entre tétraèdres voisins, les sites premiers voisins sont soit à $d = 1$ soit $d = 1/\sqrt{2}$. Ce modèle traite soit des particules fermioniques de spin $1/2$ (l'indice de spin valant $\sigma = +, -$) soit pour des particules bosoniques sans spin (dans ce cas on supprime la somme sur σ et on utilisera des opérateurs $b_i^{(+)}$ au lieu des $c_{i, \sigma}^{(+)}$). Il peut être traité de manière analogue sur le réseau damier comme sur d'autres réseaux à unités frustrées jointes par un site kagomé [73] et réseau pyrochlore 3D. On considère dans toute la suite que l'interaction U est nettement plus forte que les autres termes en t et V , ce qui pour un nombre moyen de particules par site $n \leq 1$ interdit la double (multiple pour des bosons) occupation des sites et ramène le problème à un modèle de particules de coeur dur, qu'on va d'abord traiter pour voir l'émergence d'un modèle effectif de dimères, avant de passer au cas fermionique. La dérivation de ces modèles est alors analogue à celle du modèle XXZ vue au chapitre 1 (et en correspondance avec le modèle bosonique comme on va le voir). On va dans la suite considérer principalement, sur le réseau damier, un remplissage $n = 1/4$ (tout en faisant référence occasionnellement à d'autres réseaux ou remplissages), d'abord pour les bosons pour voir l'émergence d'un modèle effectif de dimères, avant de passer au cas fermionique.

4.1.2 Cas bosonique : une dérivation du modèle de Rokhsar-Kivelson

Pour des bosons le modèle 4.1 à $U \rightarrow \infty$ est en correspondance exacte avec le modèle XXZ vu au chapitre 1 : un site occupé correspond à un spin \uparrow et un site vide à un spin \downarrow (i.e. la correspondance est $n_i = \sigma_i^z - 1/2$; $b_i = \sigma_i^-$; $b_i^\dagger = \sigma_i^+$). On considère une limite de fortes répulsions $|t| \ll V \ll U$ - l'hypothèse $|t| \ll U$ est courante pour modéliser des systèmes fortement corrélés à courte portée, entre autre sur réseau pyrochlore ; considérer que l'ordre de grandeur de V est intermédiaire entre ceux de t et U est alors sensé. On se ramène donc à un problème de bosons de coeur dur, mappable sur le modèle XXZ dans un champ magnétique transverse $h < 0$ (voir chapitre 1) : l'interaction V défavorisant la présence de plusieurs particules par tétraèdre joue le rôle de J_z ; le terme en t de saut de bosons correspond au terme J_{xy} du modèle XXZ ; et le potentiel chimique μ des particules (n'intervenant pas dans la formulation canonique 4.1 mais dans son équivalent grand-canonique) a pour analogue $3J_z + h$.

Dans la limite $|t| \ll V$ qu'on considère, équivalente à $|J_{xy}| \ll J_z$ les configurations de basse énergie qui définissent le modèle effectif associé vérifient donc suivant la valeur de μ les contraintes suivantes (valables pour le réseau damier mais également pour le pyrochlore 3D) :

- la contrainte de dimères (imposant une seule particule par tétraèdre, représentée alors par un dimère joignant les centres de ses 2 tétraèdres) pour $0 < \mu < V$; n est donc fixé à $1/4$;
- la contrainte du modèle de 6 vertex (*ice rule*) pour $V < \mu < 2V$, fixant dans tout ce régime $n = 1/2$; la représentation des particules par des dimères conduit alors à un modèle de boucles denses, passant une et une seule fois par chaque centre de tétraèdre;
- la contrainte de dimères également pour $2V < \mu < 3V$ (les dimères sont alors placés sur les sites vides) correspondant à $n = 3/4$.

Dans tous les cas la dynamique des particules apparaît dans le modèle effectif au second ordre en perturbation en t/V (pas au premier ordre puisqu'un seul mouvement de charge viole les contraintes précédentes et crée un défaut d'énergie V), avec des flips de dimères sur les plaquettes vides du réseau dual (carré) d'amplitude $J_{\text{eff}} = 4t^2/V$. On a donc ici une réalisation du modèle de Rokhsar-Kivelson avec seulement le terme de flip pour le cas $n = 1/4$ (également pour $n = 3/4$). On a vu que la phase favorisée est alors une phase mixte, 8 fois dégénérée et brisant la symétrie de rotation du réseau. Pour $n = 1/2$, le terme de flip d'amplitude J_{eff} agit dans des configurations de boucles, et une étude [36] dans le cadre du modèle XXZ équivalent (à $|J_{xy}| \ll J_z$) a montré que la phase favorisée avait une dégénérescence 2, et une structure en plaquettes symétriques par rotations de $\pi/2$.

La considération d'interactions aux seconds voisins (à distance $\sqrt{2}$ sur des tétraèdres distincts) $|V'| \ll t$ mais du même ordre que J_{eff} se traduit par les interactions du modèle de Rokhsar-Kivelson, dont on retrouve le diagramme de phase sur un axe V'/J_{eff} . Des résonances impliquant plus de dimères apparaissent en perturbation à des ordres ≥ 3 en t/V , notamment à l'ordre 3 des flips de 3 dimères sur les rectangles constitués par 2 plaquettes du réseau carré.

4.1.3 Modèle effectif pour des fermions à $n = 1/4$

Nous considérons maintenant le modèle de Hubbard étendu 4.1 pour des fermions à $n = 1/4$ (donc au $1/8$ de remplissage). Avec les mêmes hypothèses que précédemment : $|t| \ll V$ et U considéré comme infini, les configurations de charge de basse énergie respectent la contrainte de dimères; le nombre macroscopique de ces configurations, et les degrés de liberté de spin de chaque particule, entraînent une entropie par site finie dans la limite strictement statique ($t = 0$). Cependant on va voir que la dynamique introduite en perturbation en t/V ordonne le système, également pour les degrés de liberté de spin.

Cette dynamique apparaît comme pour les bosons à l'ordre 2 en t/V . La principale différence vient des signes de permutation associés aux différents processus conduisant à un même mouvement de charges. Si on considère 4 sites $p_i (i = 1 \dots 4)$ sur une plaquette vide p du réseau, indexés dans le sens horaire, les différents processus bougeant de p_1, p_3

à p_2, p_4 des particules de spins respectifs σ et σ' ont des signes opposés :

$$\begin{aligned} c_{p_4, \sigma'}^\dagger c_{p_3, \sigma'} c_{p_2, \sigma}^\dagger c_{p_1, \sigma} + c_{p_2, \sigma'}^\dagger c_{p_3, \sigma'} c_{p_4, \sigma}^\dagger c_{p_1, \sigma} = \\ (c_{p_4, \sigma}^\dagger c_{p_2, \sigma'}^\dagger - c_{p_4, \sigma'}^\dagger c_{p_2, \sigma}^\dagger) c_{p_3, \sigma'} c_{p_1, \sigma} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Pour deux particules de même spin (triplet polarisé suivant z), ces termes s'annulent. Si elles sont de spin opposé on voit qu'après le mouvement les particules sont dans un état singulet ; en sommant les termes 4.2 sur les indices de spin, on a sur toutes les plaquettes vides des termes effectifs du type :

$$H_{2,p} = -t_2 (c_{p_4,+}^\dagger c_{p_2,-}^\dagger - c_{p_4,-}^\dagger c_{p_2,+}^\dagger) (c_{p_3,+} c_{p_1,-} - c_{p_3,-} c_{p_1,+}) \quad (4.3)$$

avec l'amplitude $t_2 = 2t^2/V$. Il s'agit donc d'un terme n'agissant que sur les paires de spins dans un état singulet, conservé dans le flip ; le Hamiltonien effectif $H_2 = \sum_p H_{2,p}$ correspondant préserve donc la symétrie $SU(2)$ du Hamiltonien 4.1.

Le Hamiltonien H_2 comporte donc des termes de signes opposés 2 à 2 pour chaque flip, est donc de type non-Frobenius (éléments hors-diagonaux pas tous du même signe). Cependant on peut se ramener, en utilisant les invariances topologiques caractéristiques d'un modèle de dimères, à un Hamiltonien de type Frobenius par une transformation canonique (plusieurs transformations sont possibles) utilisant les contraintes topologiques des modèles de dimères. Si x' et y' sont les axes horizontal et vertical du réseau damier, i.e. des lignes ascendantes et descendantes du réseau carré tourné de 45 degrés, une transformation possible consiste à définir des opérateurs $b_{i,\downarrow}^{(\uparrow)} = -c_{i,\downarrow}^{(\uparrow)}$ sur une ligne horizontale sur deux (i.e. de y' pair) et $b_{i,\sigma}^{(\uparrow)} = c_{i,\sigma}^{(\uparrow)}$ sinon. Ces opérateurs sont toujours fermioniques, mais le Hamiltonien H_2 s'exprime dans la nouvelle base canonique obtenue par cette transformation comme son équivalent bosonique (mais avec des particules à 2 couleurs), i.e. avec des termes hors-diagonaux tous négatifs. Ce type de transformations canoniques supprimant le problème de signe pour une forme précise du Hamiltonien se retrouve dans d'autres situations, dont une assez proche avec des fermions en forte interaction sur le réseau damier (mais sans spin et au remplissage $n = 1/2$ [74]). Pour voir ce point, prenons d'abord l'expression 4.3 avec p_1 et p_2 sur des lignes de y' pair : après la transformation le terme de flip devient :

$$H_{2,p} = -t_2 ((b_{p_4,+}^\dagger b_{p_2,-}^\dagger + b_{p_4,-}^\dagger b_{p_2,+}^\dagger) (b_{p_3,+} b_{p_1,-} + b_{p_3,-} b_{p_1,+}) + c.c.) \quad (4.4)$$

Deuxièmement, les signes de permutation avec les particules extérieures à la plaquette n'interviennent pas dans l'expression des éléments de matrice de H_2 . Sur un système fermé de $N = 2L_x L_y$ sites on peut le vérifier en ordonnant les sites $i = x + (y - 1)L_x$ pour les liens verticaux du réseau carré (diagonales ascendantes du damier) et $i = N/2 + y + (x - 1)L_y$ pour ses liens horizontaux : si le mouvement d'une particule initialement en p_1 implique une permutation avec une particule extérieure en p' , le mouvement à partir de p_3 implique aussi une permutation avec la particule en p' et le nombre total de permutations est pair. Notons que sur un système périodique ceci n'est valable que dans les secteurs topologiques de *winding numbers* pairs (qui sont conservés par les

flips comme dans le QDM du chapitre 3); et a fortiori, pour que les *winding numbers* soient effectivement des invariants, uniquement dans le sous-espace des configurations de dimères sans défaut (configurations de charge de basse énergie au remplissage exactement commensurable $n = 1/4$).

4.1.4 Extension : modèle de type Rokhsar-Kivelson de fermions itinérants

Le Hamiltonien effectif H_2 obtenu précédemment est l'analogie fermionique du terme de flip dans le modèle de Rokhsar-Kivelson (qui s'applique au cas bosonique). Il est donc assez naturel de rechercher un terme H'_W qui soit l'analogie du terme en v du QDM et permette ainsi l'existence d'un point de Rokhsar-Kivelson où le fondamental serait connu exactement. Ce terme est nécessairement une somme de termes $H'_{W,p}$ agissant sur les plaquettes vides; l'action de $H_{2,p}$ étant de flipper une paire d'électrons en configuration singulet uniquement, le terme $H'_{W,p}$ doit distinguer une plaquette flippable d'une plaquette non flippable (et H'_W compter le nombre de plaquettes flippables). A positions i, j des particules fixées, il est donc diagonal dans la base d'états singulet-triplets de 2 particules, mais pas dans la base σ_i^z, σ_j^z , et doit faire intervenir le projecteur sur l'état singulet : $(1/2 - 2\sigma_i\sigma_j)$. On en déduit la forme de $H'_{W,p}$ (avec une amplitude W analogue de V dans le chapitre précédent) :

$$H'_{W,p} = W n_{p_1} n_{p_3} (1/2 - 2\sigma_{p_1}^z \sigma_{p_3}^z) + n_{p_2} n_{p_4} (1/2 - 2\sigma_{p_2}^z \sigma_{p_4}^z) \quad (4.5)$$

(si on considère ce modèle avec $n > 1/4$, le terme $H'_{W,p}$ comptant les singulets flippables sur la plaquette p doit contenir un terme $n_{p_1} n_{p_3} (1 - n_{p_2})(1 - n_{p_4})$ au lieu de $n_{p_1} n_{p_2}$). Ainsi le Hamiltonien $H_2 + H'_W$ vérifie une propriété caractéristique des modèles de Rokhsar-Kivelson, qui est que pour $t_2 = W$ chaque terme $H_{2,p} + H'_{W,p}$ est un projecteur (ici, dans la base des 4^2 configurations à 2 particules sur la plaquette, un projecteur sur l'état singulet résonant et symétrique par rotation de $\pi/2$) :

$$1/2(b_{p_1,+}^\dagger b_{p_3,-}^\dagger + b_{p_1,-}^\dagger b_{p_3,+}^\dagger + b_{p_2,+}^\dagger b_{p_4,-}^\dagger + b_{p_2,-}^\dagger b_{p_4,+}^\dagger) \quad (4.6)$$

En ce point le spectre de $H_2 + H'_W$ est donc positif; de la même manière que $|\Psi_{RK}\rangle$ dans le QDM, l'état défini comme somme de toutes les configurations $\prod_{i=1\dots N/4} b_{s_i, \sigma_i}^\dagger$ avec la même amplitude - les configurations de charges n_i respectant les contraintes de dimères - est un état d'énergie nulle, donc un fondamental.

Comme dans le QDM, $H_2 + H'_W$ n'est pas ergodique dans l'ensemble des configurations de basse énergie : premièrement, du fait de l'existence de $L_x \cdot L_y / 2$ secteurs topologiques sur les systèmes périodiques qu'on considère; deuxièmement H_2 et H_W conservent le spin total suivant z , non seulement sur tout le système mais sur chaque ligne horizontale l de liens verticaux du réseau carré : $S_l = \sum_{i \in l} \sigma_i^z$ (et l'équivalent S_c sur chaque colonne de liens horizontaux). On serait donc tenté de dire que $H_2 + H'_W$ est ergodique dans chaque intersection d'un secteur topologique (pour la représentation de dimères des configurations de charge) avec un ensemble de configurations définies par les valeurs de S_l sur les L_y lignes et les valeurs de S_c sur les L_x colonnes. En fait, ce

n'est encore pas le cas : on peut trouver sur un système périodique $4 * 4$ des configurations distinctes où $S_l = 0$ ($S_c = 0$) sur chaque ligne (resp. colonne), de même windings numbers, mais non connectées par H_2 ni par H_2^k pour aucun $k \geq 2$. La dégénérescence du fondamental au point $W = t_2$ est bien plus grande que pour le QDM du réseau carré ; au moins de l'ordre de $(L_x + 1)^{L_y/2}$ (cette borne inférieure correspond à toutes les configurations de charge colonnaires, à $L_y/2$ lignes de dimères, pour laquelle chaque ligne l a $L_x + 1$ valeurs possibles de S_l). De la criticalité de son analogue bosonique, on déduit que les corrélations de charge $\langle n_i n_j \rangle$ décroissent en loi de puissance (en $1/r^2$), et donc les corrélations de spin $\langle n_{i,\sigma} n_{j,\sigma'} \rangle$ également.

4.1.5 Phases possibles du modèle $t_2 - W$

Le modèle précédent d'Hamiltonien $H_2 + H'_W$, agissant dans l'espace des configurations de basse énergie du modèle 4.1 (dans la limite $|t| \ll V \ll U$, et à $n = 1/4$), possède donc un paramètre W/t_2 en fonction duquel on trouve différentes phase ordonnées. Comme la dérivation de H_2 implique $t_2 > 0$ on peut fixer dans le reste de ce chapitre $t_2 = 1$ et ne varier que W (ou $\theta = \tan^{-1}(W/t_2)$ entre $-\pi/2$ et $\pi/2$). Le double intérêt de l'introduction de H'_W , outre l'existence du point $W = t_2$ est que, la nature exacte de la phase ordonnée favorisée par H_2 n'étant pas claire a priori, on gagne à comparer la situation $W = 0$ aux cas limites $|W| \rightarrow \pm\infty$ et à étudier le modèle pour W variable (publication [2]).

$\theta > \pi/4$: états isolés Pour $W > 1$ ($\theta > \pi/4$) les mêmes arguments que dans le QDM, basés sur le découpage de $H'_W + H_2$ en $H'_1 + H_2$ et H'_{W-1} de spectres positifs l'un et l'autre, et l'existence d'états isolés [36] d'énergie nulle, entraîne que ceux-ci sont les fondamentaux du système. La dégénérescence y est donc beaucoup plus importante que dans le QDM pour $V > J$, car ici chaque secteur topologique contient des états isolés. C'est évident pour les secteurs sans plaquette flippable ; pour les autres, tous les états ferromagnétiques (ceux de σ_z extrémal, et par invariance $SU(2)$ les autres aussi) sont d'énergie nulle. La phase $W > 1$ est donc désordonnée car favorisant également des ordres à courte distance distincts : ordre alterné (indépendamment du spin) et ordre ferromagnétique (indépendamment des configurations de charge).

$\theta = -\pi/2$: chaînes de Heisenberg Pour $W/t_2 = -\infty$ ce sont au contraire les configurations avec le maximum de plaquettes flippables qui sont favorisées. On a vu que pour le QDM ceci impliquait un ordre colonnaire : ici, on a aussi un ordre de charge en chaînes, les particules étant sur $L_y/2$ lignes (de liens verticaux du réseau carré) ou L_x colonnes (de liens horizontaux). A configuration de charge fixée, H'_W dans une telle chaîne, disons une ligne l , s'écrit :

$$H'_{W,l} = W \sum_{i=1 \dots L_x} (1/2 - 2\vec{\sigma}_i \sigma_{i+1}) \quad (4.7)$$

$H'_{W,l}$ est à une constante près ($WL_x/2$) le Hamiltonien de Heisenberg d'une chaîne de spins $1/2$, avec un couplage antiferromagnétique $J = -2W$. Le modèle de Heisenberg 1D,

exactement soluble par Ansatz de Bethe [75] a un fondamental non dégénéré pour un système fini, mais critique avec des corrélations de spin en loi de puissance et des énergies d'excitation $0(1/L_x)$. Le fondamental du système est donc 4 fois dégénéré (du fait des 4 positions possibles des chaînes), avec un ordre à longue distance de charge mais pas de spin. On notera la phase correspondante *AFC* (AntiFerromagnétique Colonnaire).

$-\pi/2 < \theta < \pi/4$: **les phases possibles et leurs symétries** Dans les limites $\theta = -\pi/2$ et $\theta = \pi/4$ où on connaît exactement le fondamental, ses corrélations critiques indiquent que des variations infinitésimale de θ peuvent induire une mise en ordre. Entre ces limites, un ordre antiferromagnétique au moins à courte distance est à escompter, les termes de H favorisant la formation de singulets sur les plaquettes. Par analogie avec le QDM sur réseau carré on peut s'attendre à des phases cristallines, soit de type mixte (8 fois dégénérées car brisant les symétries de rotation de $\pi/2$ et de translation suivant les axes x et y) soit de type plaquette (invariante par rotation de $\pi/2$, et 4 fois dégénérée). Dans tous les cas les unités résonantes de ces phases ordonnées doivent, vu la structure de H_2 (et de H'_W) être des singulets - on peut alors employer les termes plus complets de cristaux *mixtes colonnaire-plaquette* (on utilisera l'abréviation en anglais *MCPC*) et de phase à *singulets résonant sur-plaquette* (abrégé en *RSPC*). Les phases mixtes peuvent être vues comme une dimérisation des chaînes de Heisenberg, donnant des phases *MCPC-1* ou *MCPC-2* suivant que la dimérisation est en phase ou en antiphase (voir figure 4.1).

4.1.6 Analyse des symétries des phases cristallines du modèle

On peut classer ces différentes phases cristallines en fonction des symétries qu'elles brisent, ou de manière équivalente des nombres quantiques des fondamentaux dégénérés correspondants. Pour définir ces nombres quantiques on procède suivant la méthode décrite au paragraphe 3.2.3 ; pour chaque phase, définition d'une fonction d'onde schématique $|\Psi_1\rangle$ de même symétries brisées, puis de fonctions d'ondes obtenues par translations et rotations de $|\Psi_1\rangle$ et enfin construction de combinaisons linéaires de celles-ci de nombres quantiques définis. Pour la phase *RSPC*, on peut prendre $|\Psi_1\rangle$ comme le produit de singulets résonants (créés par un opérateur de type 4.6) sur les plaquettes vides de coordonnées $(2p, 2q)$ ($p, q \in \mathbb{Z}$) puis des fonctions d'ondes $|\Psi_{2\dots 4}\rangle$ et finalement des fonctions d'onde symétrisées de mêmes expressions et nombres quantiques que précédemment (dans les expressions 3.11). Pour les phases mixtes, on définit d'abord une fonction d'onde sur une plaquette p de type $1/\sqrt{2}(b_{p3,+}^\dagger b_{p1,-}^\dagger + b_{p3,-}^\dagger b_{p1,+}^\dagger)|0\rangle$, puis $|\Psi_1\rangle$ comme produit sur les plaquettes résonantes (dont, par convention, la plaquette à l'origine) de ces fonctions d'onde, qui permet d'appliquer la procédure vue au paragraphe 3.2.3. On détermine ainsi les nombres quantiques des différentes phases possibles dans l'intervalle $-\pi/2 < \theta\pi/4$: phases *MCPC-1* et *-2*, *RSPC* et *AFC*, sachant qu'elles sont en correspondance une à une (voir tableau 3.1), en terme de symétries, avec respectivement les phases mixte-1 et *-2*, plaquette et colonnaire du modèle de Rokhsar-Kivelson sur réseau carré. Les nombres quantiques de ces phases sont listés dans le tableau 3.1. Comme toutes ces phases ont

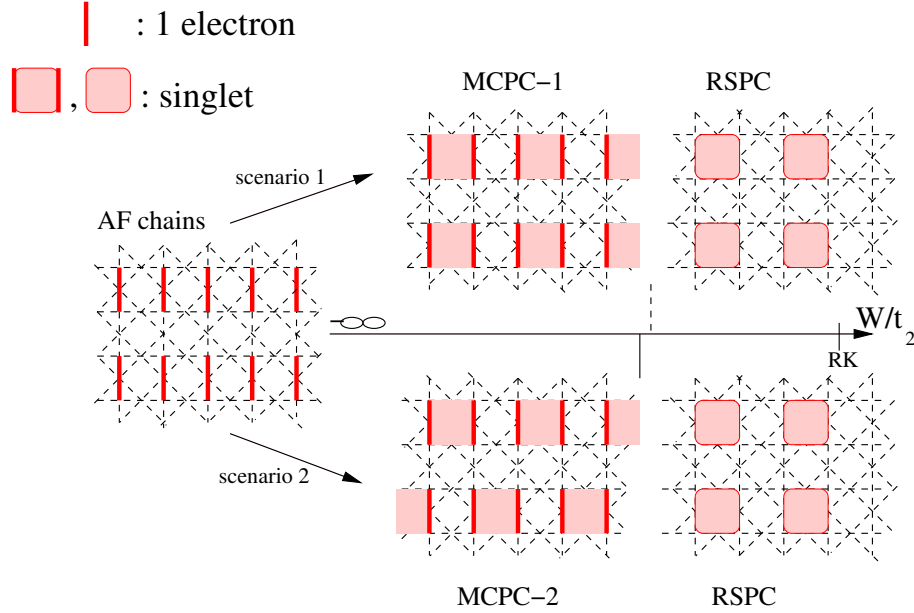


FIG. 4.1 – Phases possibles du modèle $t_2 - W$ sur réseau damier pour $n = 1/4$ et $W/t_2 \leq 1$: phases mixtes *MCPC-1* et *MCPC-2* obtenues par dimérisation des chaînes de Heisenberg (constituant le fondamental pour $W \rightarrow -\infty$) en phase et antiphase respectivement ; et phase *RSPC*, possiblement existante plus près du point $W = t_2$. Une barre rouge symbolise une particule représentant la contrainte des dimères, tandis qu'un singlet résonant est représenté par une plaquette coloriée.

Phase ($t_2 - W$)	MCPC1	MCPC2	RSPC	AFC
Phase (QDM)	Mixte 1	Mixte 2	Plaquette	Colonnaire
Dégénérescence	8	8	4	4

TAB. 4.1 – Table de correspondance entre les phases cristallines attendues dans le modèle $t_2 - W$ pour $W \leq t_2$ (1ere ligne) et les phases ordonnées possibles dans le modèle de Rokhsar-Kivelson sur réseau carré pour $V \leq J$ dans les notations du chapitre 3 (2eme ligne). Cette correspondance signifie que deux phases d'une même colonne ont non seulement les mêmes dégénérescences mais les mêmes nombres quantiques, listés dans le tableau 3.1.

des symétries différentes, la détermination de ces nombres quantiques pour une valeur de θ donnée indique sans ambiguïté la phase correspondante.

4.2 Traitement variationnel du modèle $t_2 - W$

4.2.1 Choix des fonctions d'onde variationnelles

Pour avoir une première idée du diagramme de phase, notamment de la stabilité relative des phases *RSPC* et *MCPC*, il est utile d'employer l'approche variationnelle déjà vue au chapitre 3, en construisant une fonction d'onde variationnelle comme produit de fonctions d'onde locales, sur les plaquettes résonantes. Une fonction d'onde locale est ici construite à partir de 4 configurations de spin possibles sur la plaquette p :

$$|\Psi_p\rangle(\phi) = \left[\frac{\cos(\phi)}{\sqrt{2}} (b_{p_1,\uparrow}^\dagger b_{p_3,\downarrow}^\dagger + b_{p_1,\downarrow}^\dagger b_{p_3,\uparrow}^\dagger) + \frac{\sin(\phi)}{\sqrt{2}} (b_{p_2,\uparrow}^\dagger b_{p_4,\downarrow}^\dagger + b_{p_2,\downarrow}^\dagger b_{p_4,\uparrow}^\dagger) \right] |O\rangle \quad (4.8)$$

A partir de $|\Psi_p\rangle$, une fonction d'onde représentant un état *RSPC* ou *MCPC1* est construite comme $|\Psi_0^1\rangle(\phi) = \prod_p |\Psi_p\rangle(\phi)$ sur les plaquettes p de coordonnées (n_x, n_y) avec n_x et n_y entiers pairs ; pour une fonction $|\Psi_0^2\rangle(\phi)$ le produit est sur les plaquettes (n_x, n_y) telles que (par exemple) n_y et $n_x + n_y/2$ sont pairs. Dans le premier cas, $\phi = \pi/4 (+k\pi)$ correspond à un état *RSPC*, et $0 < \phi < \pi/4$ à un état *MCPC1* (ayant la symétrie de chaînes horizontales dimérisées). Dans le deuxième cas, $0 < \phi < \pi/4$ correspond à un état *MCPC2* ; et le cas $\phi = \pi/4$ décrit un état de même symétrie mais avec des plaquettes symétriques par rotation de $\pi/2$. Notons que $\phi = -\pi/4$ maximise l'énergie de résonance, mais la minimiserait si on avait $t_2 < 0$, obtenu à partir d'une transformation canonique sur des lignes verticales et non horizontales. Ceci ne changerait pas la physique mais, on le voit, des signes relatifs dans la fonctions d'onde pour un état physique donné. Ici, $t_2 > 0$ implique que c'est avec $0 < \phi < \pi$ que les fonctions d'onde $|\Psi_p\rangle$ sont stabilisées par les termes de flip. Comme dans le QDM sur réseau carré, on doit en toute rigueur symétriser les états $|\Psi_0^1\rangle$ et $|\Psi_0^2\rangle$ mais les termes croisés de type $\langle \Psi_0^{1,2} | T_x | \Psi_0^{1,2} \rangle$ ou $\langle \Psi_0^{1,2} | (H_{2,p}) T_x | \Psi_0^{1,2} \rangle$ sont nuls dans la limite thermodynamique.

4.2.2 Energies variationnelles et stabilité des différentes phases

La minimisation par rapport à ϕ de l'énergie variationnelle pour chacune des fonctions d'onde d'essai, $|\Psi_0^1\rangle$ et $|\Psi_0^2\rangle$, donne un paramètre ϕ_1 ou ϕ_2 ; la comparaison de l'énergie des deux états $|\Psi_0^1\rangle(\phi_1)$ ou $|\Psi_0^2\rangle(\phi_2)$ donne finalement le fondamental variationnel. Pour un paramètre ϕ donné, la valeur moyenne du terme de flip H_2 est simplement proportionnelle au nombre $N/8$ de plaquettes résonantes (les flips sur les plaquettes intermédiaires ont une amplitude nulle pour ces fonctions d'onde d'essai) :

$$\langle \Psi_0^{1,2}(\phi) | H_2 | \Psi_0^{1,2}(\phi) \rangle = (N/8).4 \sin(\phi) \cos(\phi) \quad (4.9)$$

On voit déjà que dans le cas $W = 0$ c'est $\phi_{1,2} = \pi/4$ qui minimise l'énergie, et donne donc deux fondamentaux variationnels dégénérés, de type *RSPC* ($|\Psi_0^1\rangle$) et *MCPC2* ($|\Psi_0^2\rangle$).

Cette dégénérescence provient du fait qu'on néglige totalement l'effet des flips possibles entre plaquettes résonantes. (N.B. : notons que $\phi = -\pi/4$ maximise l'énergie de résonance, mais la minimiserait si on avait $t_2 < 0$, obtenu à partir d'une transformation canonique sur des lignes verticales et non horizontales. Ceci ne changerait pas la physique mais, on le voit, des signes relatifs dans la fonctions d'onde pour un état physique donné. Ici, $t_2 > 0$ implique que c'est avec $0 < \phi < \pi$ que les plaquettes résonantes sont stabilisées par H_2 .)

La valeur moyenne de H_W , par contre, se compose d'un terme $2W$ sur chacune des plaquettes résonantes, puisque celles-ci sont dans un état singulet, et de termes d'interaction sur chaque plaquette vide entre deux plaquettes résonante. Pour la fonction d'essai $|\Psi_0^1(\phi)\rangle$, les plaquettes à position $p = (2m + 1, 2n)$ contribuent par un terme $\cos^4(\phi)/2$ et les plaquettes à position $(2m, 2n + 1)$ par un terme $\sin^4(\phi)/2$. Pour $|\Psi_0^2\rangle$ le terme $\sin^4(\phi)/2$ est absent, les plaquettes résonantes ne se faisant face que dans une direction (voir figure 4.1). On a finalement :

$$\begin{aligned}\langle \Psi_0^1(\phi) | H_W | \Psi_0^1(\phi) \rangle &= (N/8)W(2 + \sin^4(\phi)/2 + \cos^4(\phi)/2) \\ \langle \Psi_0^2(\phi) | H_W | \Psi_0^2(\phi) \rangle &= (N/8)W(2 + \cos^4(\phi)/2)\end{aligned}\quad (4.10)$$

La minimisation de $\langle \Psi_0^1 | H_2 + H_W | \Psi_0^1 \rangle$ par rapport à ϕ donne la solution ϕ_1 :

$$W/t_2 = -4/\sin(\phi_1) \qquad (W/t_2 \leq -4)\phi_1 = \pi/4 \qquad (W/t_2 \geq -4)$$

Le point $W/t_2 = -4$ sépare donc une phase *MCPC1* ($W \leq -4t_2$) et une phase *RSPC* ($W \geq -4t_2$), pour l'instant sans tenir compte de $|\Psi_0^2\rangle$. Dans les deux cas l'énergie totale (par spin, représentée sur la figure 4.2) est :

$$\begin{aligned}E_1(\phi_1) &= 2t_2^2/W + 5W/4 & (W \leq -4t_2) \\ E_1(\pi/4) &= -t_2 + 9W/8 & (W \geq -4t_2)\end{aligned}\quad (4.11)$$

Il faut ensuite comparer ces énergie à l'énergie variationnelle de la fonction d'essai $|\Psi_0^2\rangle$, minimisée pour ϕ_2 :

$$\begin{aligned}W/t_2 &= -4 \frac{1 + \tan^2(\phi_2)}{\tan(2\phi_2)} & (W \leq 0) \\ \phi_2 &= \pi/4 & (W \geq 0)\end{aligned}\quad (4.12)$$

$$(4.13)$$

Pour $W \leq 0$, la solution ϕ_2 et l'énergie par spin correspondante n'ont pas d'expression analytique simple, mais on trouve numériquement que $E_2(\phi_2) > E_1(\phi_1)$ (voir la figure 4.2) : il n'y a donc pas de phase *MCPC2* dans ce domaine, mais une phase *MCPC1* pour $W \leq -4t_2$ et une phase *RSPC* pour $-4t_2 \leq W \leq 0$. La transition entre ces deux phases est, dans cette approche, du second ordre : on peut le voir en développant en puissances de $x = \phi - \pi/4$, au voisinage de la transition, l'énergie variationnelle de $|\Psi_0^1(\phi)\rangle$:

$$(4/N)\langle \Psi_0^1 | H_2 + H_W | \Psi_0^1 \rangle(\phi) = 11W/8 + 2(t_2 + W/4)x^2 + (-19W/24 - 2t_2/3)x^4 + o(x^4)\quad (4.14)$$

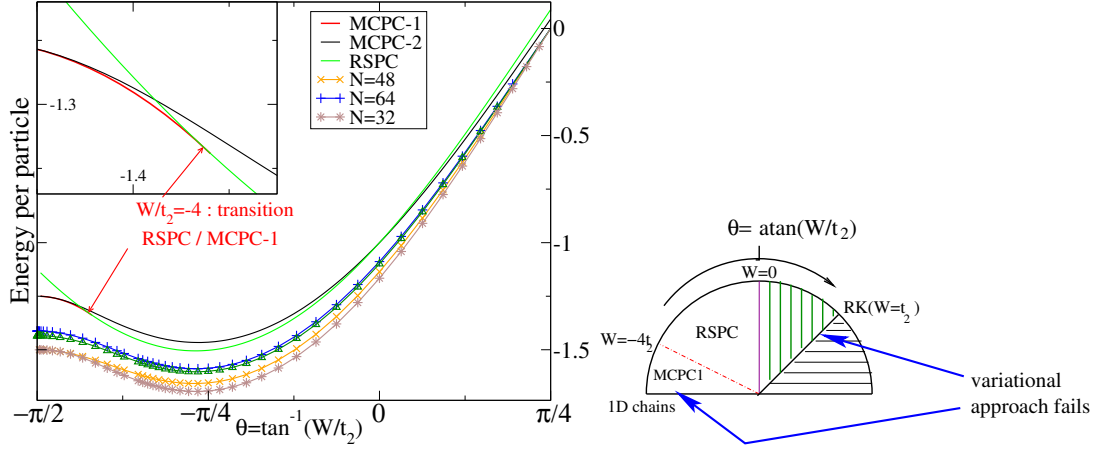


FIG. 4.2 – À gauche : Energies variationnelles, par particule, des différentes phases *RSPC*, *MCPC1* et *MCPC2* en fonction de $\theta = \tan^{-1}(W/t_2)$. L'inset montre le croisement entre les deux premières, indiquant une transition *RSPC-MCPC1* en $W/t_2 = -4$. La comparaison avec les énergies sur des systèmes finis (à N sites) donne un bon accord sauf pour $\theta \rightarrow -\pi/2$ et $\theta \rightarrow \pi/4$. À droite : Diagramme de phases résultant de cette approche variationnelle (le paramètre θ indexant la position angulaire sur le demi-cercle). Le cas $0 \leq \theta \leq \pi/4$ n'est pas tranché par cette approche.

Le coefficient $(t_2 + W/4)$ changeant de signe à la transition (alors que le coefficient du terme en x^4 reste positif) le minimum de l'énergie est bien $x = 0$ pour $t_2 + W/4 > 0$ et $x_c \neq 0$ pour $t_2 + W/4 < 0$:

$$x_c \sim \pm \frac{\sqrt{t_2 + W/4}}{\sqrt{|19W/24 + 2t_2/3|}} \quad (4.15)$$

La quantité x_c , qui se comporte en fonction de $t_2 + W/4$ comme l'aimantation d'une transition du type Ising (en champ moyen), avec un exposant $\beta = 1/2$. Elle peut être considérée comme le paramètre d'ordre de la transition, associé à la brisure de symétrie de rotation. Une quantité généralisant x_c dans le vrai modèle, et pouvant servir de paramètre d'ordre d'une transition *RSPC-MCPC1*, sera le facteur de structure de l'opérateur P_- (voir paragraphe 4.4.3).

4.2.3 Cas $W \geq 0$ et limites de l'approche variationnelle

Pour $W > 0$ la solution $\phi_2 = \pi/4$ correspond à $E_2(\pi/4) = 17W/16 - t_2 < E_1(\pi/4)$. L'approche variationnelle donne donc une phase de symétrie *MCPC2* (bien que chaque singulet résonant soit symétrique par rotation de $\pi/2$ autour du centre de sa plaquette). Ce résultat est à prendre avec précaution : sur les plaquettes p situées entre deux plaquettes résonantes, l'interaction $H_{W,p}$ (alors répulsive) contribue à l'énergie variationnelle mais pas le terme de flip $H_{2,p}$. Il est donc logique que la phase *MCPC2* qui contient

moins de telles plaquettes apparaisse favorisée. Cependant l'approche présente, dans laquelle les fondamentaux variationnels ont des corrélations entre plaquettes flippables à distance infinie, est d'autant moins valide qu'on est proche du point $W = t_2$ où toutes les configurations du modèle contribuent également au fondamental (avec en conséquence des corrélations algébriques).

On peut en effet remarquer que tous les fondamentaux variationnels ont des énergies par spin strictement positives en $W = t_2$ alors que le vrai fondamental $|\Psi_{RK}\rangle$ y a une énergie nulle. On peut d'ailleurs prendre cet état pour calculer une énergie variationnelle E_{RK} autour de ce point. Celle-ci est, au nombre de plaquettes près, la valeur moyenne de $H_{2,p} + H_{W,p}$ sur une plaquette vide, soit 2 fois la flippabilité de cette plaquette. La probabilité (dans le secteur d'ergodicité du fondamental) qu'une plaquette soit doublement occupée étant $n_{\text{flip}} = 1/4$ (dans le secteur d'ergodicité du fondamental : en considérant toutes les configurations de spin et de charge possible on aurait $n_{\text{flip}} = 1/8$. Le résultat $n_{\text{flip}} = 1/4$ n'est pas prouvé analytiquement mais compréhensible qualitativement et vérifié numériquement), avec deux sens possibles de flip :

$$\langle \Psi_{RK} | H_{2,p} + H_{W,p} | \Psi_{RK} \rangle = 2(N/2)(W - t_2)n_{fl} = (N/4)(W - t_2) \quad (4.16)$$

soit une énergie par particule $W - t_2$, donc inférieure à $E_2(\pi/4)$. La phase *MCPC2* n'a donc pas de domaine de stabilité si on prend en compte $|\Psi_{RK}\rangle$ dans l'approche variationnelle. Celle-ci est également discutable près de la limite $W/t_2 \rightarrow -\infty$, où le vrai fondamental (critique pour $t_2/W = 0$) diffère qualitativement de $|\Psi_0^1\rangle(\phi_1)$. Par contre, entre ces deux limites, elle prédit une énergie variationnelle visiblement assez proche de l'énergie du fondamental numérique : les énergies par spin sur des systèmes de $N = 32, 48, 64, 72$ sites, représentées sur la figure 4.2 (les clusters correspondants sont décrits plus loin, sauf $N = 48$ rectangulaire de dimensions $(L_x, L_y) = (6, 4)$) : permettent de s'en convaincre, et leur extrapolation pour $N \rightarrow \infty$ plus encore. L'approche variationnelle semble donc relativement sensée loin des points $\theta = -\pi/2$ et $\theta = \pi/4$, mais basée sur une fonction d'onde d'essai très schématique. Une approche numérique sur des systèmes finis permettra de décrire plus réalistement les caractéristiques des phases, et de confirmer ou d'infirmer l'existence des phases *MCPC1* et *RSPC*.

4.3 Diagonalisation exacte dans un modèle de dimères à 2 couleurs

On vient de voir que la détermination du diagramme de phase du modèle $t_2 - W$ de fermions sur le réseau damier à $n = 1/4$ appelle une approche numérique, pour identifier les d nombres quantiques caractérisant le fondamental d'une phase cristalline ($d = 4$ ou $d = 8$ suivant la phase ici). Pour cela, on va considérer des systèmes finis aux conditions aux limites périodiques (C.L.P.) (pour pouvoir utiliser les symétries de translation - à taille égale les effets de taille finie sont d'ailleurs moins importants qu'avec des conditions aux limites simples). Un effet de la taille finie est la levée de dégénérescence du fondamental, qui implique le fondamental du système fini mais aussi $d - 1$ états excités dont

l'énergie d'excitation s'annule dans la limite thermodynamique (tandis que les excitations intrinsèques à l'ordre cristallin restent gappées). On va maintenant présenter le principe de l'approche numérique choisie et les spécificités de son application dans ce modèle contraint.

4.3.1 Diagonalisation exacte d'un modèle contraint : utilisation des contraintes locales

L'étude de systèmes de fermions itinérants sur un réseau $2D$, généralement non intégrables et non traitables par des simulations Monte-Carlo quantiques à cause du problème de signe induit par la statistique de Fermi-Dirac, se prête par contre bien à une approche de diagonalisation exacte du Hamiltonien. Cette approche limite bien sûr la taille des systèmes accessibles. Pour un modèle de N spins $1/2$ localisés ayant les symétries du réseau et la symétrie $SU(2)$ comme le modèle de Heisenberg on peut atteindre une taille de $N = 36$ à 40 sites suivant le réseau -la dimension de l'espace de Hilbert, a priori de 2^N , est réduite par l'utilisation des symétries du modèle (voir plus loin). Pour des fermions itinérants par contre, chaque site peut être dans 4 configurations et non 2; à nombre de particules fixé $n_e = N.n = n_\uparrow + n_\downarrow$ et aimantation suivant z : $\sigma_z^{\text{tot}} = n_\uparrow - n_\downarrow$ fixée, l'espace de Hilbert a $(C_N^{n_\uparrow})(C_N^{n_\downarrow})$ états sans l'utilisation des symétries; même en les utilisant on est limité, en ordre de grandeur, à $N \leq 20$ (Hubbard au demi-remplissage $n = 1$ et $\sigma_z^{\text{tot}} = 0$) ou $N \leq 40$ (Hubbard pour $n = 1/4$ et $\sigma_z^{\text{tot}} = 0$).

L'utilisation de modèles contraints est alors efficace - pour le modèle de Hubbard le modèle de Heisenberg, ou modèle $t - J$ hors du demi-remplissage, est le modèle contraint correspondant à la limite $U \gg |t|$. Ici, on a vu que le modèle $t_2 - W$ fait intervenir la contrainte de dimères, qui permet d'augmenter nettement la taille limite accessible. Sur un réseau damier de $N = 2L^6 = 72$ sites, le nombre de configurations de charge à $n = 1/4$ respectant la contrainte de dimères est le nombre de pavages d'un réseau carré $6*6$, soit 90176. On peut même, ici, se restreindre au secteur topologique $(0, 0)$ contenant $N_c = 44176$ configurations.

Dans l'algorithme, pour réaliser des opérations sur ces états on a besoin de les lister et de les coder par des nombres binaires. La contrainte $U \rightarrow \infty$ permet a priori d'écrire les configurations avec un bit par site, 1 ou 0 pour un site occupé ou vide respectivement, donc au total un nombre (ou *mot*) de N bits pour coder une configuration. Cependant la détermination des mots de charge par une boucle de 2^N sur toutes les configurations est impossible pour les grandes tailles qu'on veut traiter. On peut alors tirer des contraintes du modèle : tout d'abord, la bipartacité du réseau et la contrainte de dimères limitent à 4 le nombre de configurations possibles sur chaque tétraèdre d'un sous-réseau (i.e. l'orientation du dimère partant du site correspondant du réseau carré), ce qui permet d'écrire la configuration de charge comme un nombre *quaternaire* à $N/4$ chiffres de 0 à 3 (voir la figure 4.3 - mais cette écriture n'est utilisable que sans défaut de charge contrairement à l'autre écriture indiquée), et surtout de ne parcourir qu'une boucle de

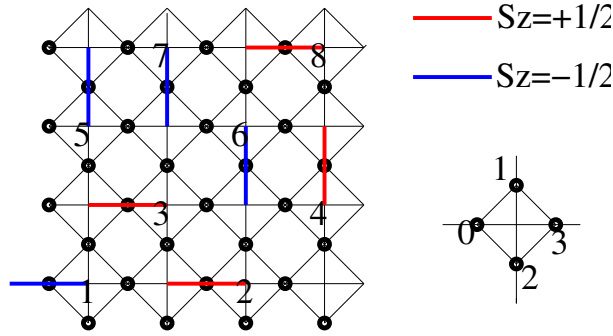


FIG. 4.3 – Codage des configurations de basse énergie du modèle $t_2 - W$ pour $n = 1/4$, illustré dans le cas d'un cluster à $N = 32$ sites : les tétraèdres d'un sous-réseau sont numérotés de 1 à $N/4$ et la position de l'unique particule sur chaque tétraèdre est traduite par un nombre de 0 à 3 (cf. à droite), d'où un mot à $(N/4)$ chiffres en quaternaire pour la configuration de charge : $00011220_4 = 10560$. La configuration de spin doit être codée par un mot supplémentaire à $N/4$ bits (ici : $10001110_2 = 142$). Une alternative pour la configuration de charge est d'utiliser 4 mots de $N/4$ bits correspondant à l'occupation des 4 sous-réseaux (indexés sur le tétraèdre à droite) : ici, 11100001_2 , 00011000_2 , 00000110_2 , 00000000_2 .

1 à $2^{N/2}$ pour les déterminer. On peut encore beaucoup accélérer la détermination des configurations :

- (a) soit on utilise l'ergodicité du terme de flip H_J du QDM (qui agit sur les configurations de charge ici) dans le secteur topologique considéré, pour déterminer toutes les configurations du secteur à partir d'une configuration initiale, par un nombre assez réduit d'applications de H_J (généralement ≤ 100 pour les tailles maximales accessibles)
- (b) soit on divise les N sites en 2 sous-ensembles de $N/2$ sites, par exemple deux régions connexes et complémentaires (ou bien les liens verticaux/horizontaux du réseau carré et on détermine les configurations de charge correctes (sans paires d'électrons premiers voisins) sur chacun des sous-ensembles par des boucles de longueur $2^{N/4}$. On détermine ainsi $N_{c2} \ll 2^{N/4}$ configurations par sous-ensemble et une boucle de $(N_{c2})^2$ détermine les configurations sur le système entier en tenant compte des contraintes aux frontières.

Le nombre N_c de configurations de charge est à multiplier par le nombre de configurations de spin (dans la base σ_z) à charges fixées ; dans le secteur $\sigma_z^{tot} = 0$, qu'on considère puisqu'on s'attend à des phases à singulets résonants, il y en a $C_{18}^9 = 48620$. Pour coder les configurations de spin, on utilise une écriture en binaire (une configuration $\uparrow_4 \downarrow_3 \downarrow_2 \uparrow_1$ est codée par le nombre (ou *mot*) 1001_2). Le nombre total d'états N_H^0 du modèle dépasse alors 2 milliards, ce qui serait difficilement traitable même par un algorithme de Lanczos (voir paragraphe 4.3.3).

4.3.2 Utilisation des symétries

Pour réduire la taille de l'espace de Hilbert, outre la symétrie $U(1)$ déjà utilisée en se ramenant au secteur $\sigma_z = 0$, on peut utiliser les symétries spatiales du modèle pour se ramener à un espace de Hilbert de dimension très réduite. De plus, si on ne peut tirer parti de l'invariance $SU(2)$ pour se restreindre au secteur singulet $S = 0$ (ou à spin S fixé), on peut l'utiliser, via la parité des différents secteurs sous l'inversion de spin globale $\sigma_z^i \rightarrow -\sigma_z^i$, pour se restreindre aux secteurs de S pair, ou impair. Le groupe ponctuel est ici celui du réseau carré $L\tilde{L}(= N/2)$, soit C_{4v} , donc avec les translations le groupe de symétrie comporte $n_s = 4N$ éléments. On peut alors choisir une base de N_H^R états représentatifs ou représentants $|r_i\rangle$, chaque autre état étant relié à un représentant par une opération S , qui est la composée soit par l'inversion de spin soit par l'identité d'une symétrie spatiale. Pour choisir les représentants on peut utiliser le même type de règle que dans le chapitre 2 pour les matrices de transfert réduites : imposer que l'écriture binaire de $|r_i\rangle$ soit inférieure à celle de tout état $S|r_i\rangle$. La dimension de l'espace de Hilbert réduit est alors $N_H^R \geq N_H^0/(8N)$. Pour le cas présent, avec $N = 72$, $N_H^R = 192790$ dans une représentation $A1, \vec{k} = (0, 0)$ et paire par inversion de spin (qui comporte nécessairement le fondamental, sans noeud après la transformation $c_{i,\sigma} \rightarrow b_{i,\sigma}$). Ceci n'est pas traitable par diagonalisation complète mais facilement par l'algorithme de Lanczos dont on va détailler le principe.

Un représentatif $|r\rangle$ représentant $n(r) = n_s/\text{deg}(r)$ configurations différentes reliées à $|r\rangle$ par des symétries s_i ; l'état physique correspondant (état *représenté*), dans une représentation donnée est :

$$|g(r)\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(r)}} \sum_{i=1..n(r)} \xi(s_i) s_i |r\rangle \quad (4.17)$$

où $\xi(s_i)$ est le caractère de la représentation pour s_i . L'état $H|g(r)\rangle$ est une somme sur les termes locaux H_i détats proportionnels à des représentés $|g(r')\rangle$. Le coefficient de proportionnalité est le rapport $\sqrt{n(r)/n(r')}$ multiplié par l'amplitude $A_i \neq 0$ de H_i (ici, $-t_2$ ou W) et par le caractere $\tau(s)$ de la symétrie s telle que :

$$H_i |r\rangle = A_i \tau(s) |r'\rangle$$

L'élément de matrice correspondant, dans la base des représentants, est donc :

$$\langle r' | H_i | r \rangle = A_i \tau(s) \sqrt{n(r)/n(r')}$$

Pour des grandes valeurs de N_H^R , le stockage de cette matrice (de $(N_H^R)^2 \sim 4.10^{10}$ éléments pour l'exemple $N = 72$) est problématique, et superflu si la matrice de H est diluée, comme c'est le cas pour des modèles avec sauts et interactions à courte portée ; il suffit alors de stocker les éléments de matrice non nuls, sous forme de tableaux d'images des représentants (en n'oubliant pas les caractères $\xi(s)$).

4.3.3 Algorithme de Lanczos

Lorsque la taille N_H^R de la base réduite devient trop grande pour une diagonalisation complète (on peut situer la limite en ordre de grandeur à $R \sim 10^4$ états pour une machine de bureau) on utilise des algorithmes itératifs, permettant de déterminer le fondamental $|\Psi_0\rangle$ - et éventuellement les premiers états excités et des observables tirées du fondamental. Un algorithme assez simple, la méthode des puissances, a été présenté au chapitre 2. Il peut être utilisé ici mais en pratique la convergence est assez lente (~ 500 itérations nécessaires dans notre exemple) ; or, H étant hermitien on peut utiliser l'algorithme de Lanczos [76], bien plus rapide pour atteindre la convergence. Celui-ci consiste à construire une base d'états $(|\Phi_n\rangle)_n$ orthogonale dans laquelle H est tridiagonal et qui, pour n suffisant, contient pratiquement tout le poids de $|\Psi_0\rangle$. En partant d'un vecteur normé $|\Phi_0\rangle$ choisi au hasard (comme pour la méthode des puissances, sa non-orthogonalité avec $|\Psi_0\rangle$ est nécessaire mais assurée) on définit cette base ainsi :

$$\begin{aligned} |\Phi_1\rangle &= (H|\Phi_0\rangle - \alpha_0|\Phi_0\rangle)/\beta_0 \\ |\Phi_{n+1}\rangle &= (H|\Phi_n\rangle - \alpha_n|\Phi_n\rangle - \beta_{n-1}\Phi_{n-1})/\beta_n (n \geq 1) \end{aligned} \tag{4.18}$$

où $\alpha_n = \langle \Phi_n | H | \Phi_n \rangle$ et β_n est tel que $|\Phi_{n+1}\rangle$ soit normé. Ces conditions assurent l'orthogonalité de la base $(|\Phi_n\rangle)_n$; dans cette base (tronquée si le nombre d'itérations est inférieur à la dimension de l'espace de Hilbert), H a une forme tridiagonale (matrice *de Ritz*) qui en rend la diagonalisation plus rapide. L'avantage important de cette méthode est que la valeur propre la plus basse (dominante, en valeur absolue) Λ_n^0 de la matrice de Ritz converge vers E_0 en un nombre de pas bien plus petit que pour la méthode des puissances - et comme dans ce cas, la convergence se fait par valeurs supérieures (avec une convergence exponentielle : $\Lambda_n^0 = E_0 + |A|e^{-cn}$). Les valeurs propres sous-dominantes de la matrice de Ritz convergent également vers celles de H : en théorie $\Lambda_n^k \rightarrow_n E_k$, avec un nombre de pas nécessaire augmentant avec k mais toujours du même ordre. En pratique, outre le temps nécessaire à la convergence des valeurs propres sous-dominantes, un autre facteur limite la détermination des k -ièmes valeurs propres de H pour k grand : l'apparition, par des erreurs d'arrondis numériques rendant la base (légèrement) non-orthogonale, de vecteurs fantômes dans l'itération. Ces vecteurs fantômes entraînent un phénomène dit de décrochement des valeurs propres Λ_n^k : lors de sa convergence, Λ_n^k devient subitement inférieure à E_k et finit par converger vers une valeur propre inférieure $E_{k'} < E_k$. Par conséquent le nombre de valeurs propres distinctes de H qu'on peut déterminer est limité, d'autant plus que la taille N_H^R de l'espace de Hilbert est grande et que les niveaux d'énergie sont rapprochés dans le bas du spectre.

Cette taille N_H^R , augmentant exponentiellement avec la taille (géométrique) N du système, limite également la gamme de systèmes accessibles. Dans le modèle $t_2 - W$, si les clusters avec $N \leq 72$ sites sont accessibles sans problème, le cluster suivant par N croissant, avec des conditions aux limites périodiques et toutes les symétries du réseau, a $N = 128$ sites et $N_H^R \sim 2.10^{24}$ états, et est hors de portée de toute méthode de diagonalisation exacte - ce autant pour des raisons de mémoire (stockage des vecteurs Φ_n

durant l'itération) que de temps de convergence.

L'algorithme de Lanczos permet également d'obtenir le fondamental (dans la base initiale - on a son expression dans la base $(|\Phi_n\rangle)_n$ après la convergence de Λ_n^0 mais ce n'est pas intéressant en soi), mais ceci nécessite l'expression des vecteurs $|\Phi_n\rangle$ dans la base initiale. Une solution est de les stocker sur le disque au cours de l'itération, mais ceci peut poser des problèmes de mémoire pour des espaces de Hilbert de grande taille N_H^R , la mémoire nécessaire étant proportionnelle à N_H^R fois le nombre d'itérations nécessaires (pour le modèle présent avec $N = 72$ une machine de bureau suffit cependant). Une autre solution est, une fois la convergence obtenue et les coefficients c_n de $|\Psi_0\rangle$ dans la base de Ritz stockés, de refaire l'itération en partant du même vecteur initial ; à chaque itération on rajoute le terme $c_n|\Phi_n\rangle$ à un vecteur initialement nul et finalement égal à $|\Psi_0\rangle$. Cette méthode est économe en mémoire mais $(2 - \epsilon)$ fois plus lente ($\epsilon \ll 1$ étant lié au temps de lecture des $|\Phi_n\rangle$ dans la première méthode).

On peut ainsi calculer des valeurs moyennes d'observables dans ce fondamental. Ces observables peuvent être diagonales dans la base des configuration, comme le nombre de particules en un site, la valeur de σ_i^z ou non-diagonales, comme par exemple dans le modèle $t_2 - W$ un opérateur $P(\vec{r}_0)$ défini sur une plaquette vide (en \vec{r}_0). La corrélation à distance $d = |\vec{r}|$ de P est :

$$C(d) = \langle \Psi_0 | P(\vec{r}_0 + \vec{r}) P(\vec{r}_0) | \Psi_0 \rangle \quad (4.19)$$

Il faut noter que si on utilise des symétries pour obtenir $|\Psi_0\rangle$, on doit en tenir compte, soit en appliquant $P(\vec{r}_0)$ puis $P(\vec{r}_0 + \vec{r})$ non seulement sur les représentatifs $|r\rangle$ mais sur toutes les configurations $s\xi(s)|r\rangle$ (s étant les symétries), soit en symétrisant la quantité $P(\vec{r}_0 + \vec{r})P(\vec{r}_0)$ en : (t et g étant les translations et symétries ponctuelles),

$$1/n_s \sum_t \sum_g P(t(\vec{r}_0) + g(\vec{r})) P(t(\vec{r}_0)) \quad (4.20)$$

Ces deux méthodes donnent de manière équivalente des fonctions de corrélations $C(d)$ dont on peut soustraire la partie non-connexe ($\langle \Psi_0 | P(\vec{r}_0) | \Psi_0 \rangle^2$), et/ou calculer ensuite le facteur de structure de l'observable pour des vecteurs d'onde déterminés :

$$S(\vec{k}) = \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{k}\vec{r}} C(|\vec{r}|) \quad (4.21)$$

4.4 Identification des phases *MCPC-1* et *RSPC*

4.4.1 $W \ll -|t_2|$: approche perturbative

On a vu que dans la limite $W/t_2 \rightarrow -\infty$, les configurations favorisant le maximum de singulets sur plaquettes vides (donc flippables) possèdent un ordre de charge en chaînes, avec un couplage de Heisenberg antiferromagnétique $J = -2W$. La phase correspondante, *AFC*, brise la symétrie de translation suivant un axe (perpendiculaire aux chaînes)

et de rotation de $\pi/2$, mais pas la symétrie de translation le long des chaînes. On va voir que cette symétrie est brisée par l'introduction du terme de flip H_2 , même pour une amplitude t_2 infinitésimale. On peut pour cela traiter H_2 en perturbation par rapport à H_W , dont on connaît les propriétés du fondamental et des excitations. Si on cherche un Hamiltonien effectif H_{eff} ne comportant que des processus effectifs intr chaîne d'amplitude $(t_2/W)^k$ on voit immédiatement qu'il n'apparaît pas de terme à l'ordre $k = 1$ (à aucun ordre impair en général), puisque les flips de H_2 cassent (ou reconstruisent) les chaînes. Le processus de plus bas ordre induisant un terme non nul est donc, à l'ordre 2, le flip d'un singulet hors d'une chaîne de L spins. L'état intermédiaire comporte donc une chaîne ouverte de $L - 2$ spins et un singulet, ce qui correspond à une énergie d'excitation $O(W)$.

L'amplitude du terme résultant dans H_{eff} est donc à une constante positive près $(\frac{t_2}{W})^2$, et sa forme doit être une somme, sur les plaquettes, de termes favorisant la dimérisation des chaînes, car celle-ci diminue le coût énergétique $O(W)$ sur les plaquettes voisines d'une plaquette flippée dans le processus. Il est important de noter que la perturbation correspondante est pertinente, car de dimension 1 (c'est le quadruple de la dimension de l'opérateur de spin [77, 78]). On sait donc que les chaînes dimérisent pour t_2 infinitésimal, mais H_{eff} à cet ordre ne donne pas d'information sur le couplage interchaîne. On doit donc aller à l'ordre 4, où on trouve notamment un processus flippant un singulet en position x sur une chaîne y , puis autre singulet en $(x, y - 2)$ soit au plus proche du premier mais sur la chaîne voisine. Les deux singulets flippés interagissent attractivement, par le terme $H_{W,p}$ sur la plaquette p en $(x, y - 1)$. On peut à ce stade supposer que cette interaction favorise la dimérisation en phase, par un terme effectif d'amplitude $K \sim \frac{t_2^4}{W^3}$, en $(\vec{\sigma}_{i,j} \vec{\sigma}_{i+1,j})(\vec{\sigma}_{i,j+1} \vec{\sigma}_{i+1,j+1})$ - le second indice j des spins est celui de la chaîne. Ce terme est également de dimension 1, donc une perturbation pertinente et la cohérence interchaîne de l'ordre dimérisé est donc attendue pour tout $0 < t_2 \ll |W|$.

Modèle de 2 chaînes couplées Pour vérifier la prédiction de l'approche qualitative précédente, selon laquelle les chaînes dimérisent en phase sous l'influence du couplage H_2 , on va considérer un modèle de 2 chaînes de Heisenberg couplées par un tel terme :

$$H_{J,K} = J \sum_i (\sigma_{i,1}^{\vec{\sigma}} \sigma_{i+1,1}^{\vec{\sigma}} + \sigma_{i,2}^{\vec{\sigma}} \sigma_{i+1,2}^{\vec{\sigma}}) + K \sum_i (\sigma_{i,1}^{\vec{\sigma}} \sigma_{i+1,1}^{\vec{\sigma}})(\sigma_{i,2}^{\vec{\sigma}} \sigma_{i+1,2}^{\vec{\sigma}}) \quad (4.22)$$

Dans ce modèle, il est immédiat que le couplage K , pertinent car de dimension 1, favorise une dimérisation des chaînes, en phase pour $K < 0$ et en antiphase pour $K > 0$. On s'intéresse ici aux traces de cette dimérisation dans le spectre d'excitations, ce qui nous permettra ensuite de retrouver de telles traces dans le modèle $t_2 - W$. Partons du cas $K = 0$: une caractéristique des chaînes de Heisenberg, critiques, est la présence d'excitations non gappées dans la limite thermodynamique; sur des systèmes finis de taille L l'énergie de ces excitations est en $1/L$. L'énergie d'excitation la plus basse (E_T) sur une chaîne correspond à un état triplet (déterminé numériquement comme de spin total impair), de vecteur d'onde $k_x = \pi$. On trouve bien sûr cette excitation dans le spectre de 2 chaînes (doublement dégénérée puisque l'excitation peut avoir lieu sur l'une ou l'autre

des chaînes) ; la suivante dans le spectre est une excitation à deux triplets sur une même chaîne. Cette excitation est aussi doublement dégénérée (dans le secteur singulet), avec pour nombres quantiques $[A, k_x = \pi]$ et $[B, k_x = \pi]$, A et B indiquant respectivement un état pair ou impair par l'inversion des chaînes. Ces états ont la symétrie (et le caractère singulet) des états dimérisés schématisant les ordres dimérisés en phase ($[A, \pi]$) ou en antiphase ($[B, \pi]$). C'est donc à eux qu'on s'intéresse pour étudier la dimérisation sous l'influence de K .

Sous l'influence du couplage interchaînes $K \neq 0$, la dégénérescence des états $[A, \pi]$ et $[B, \pi]$ est levée, $K < 0$ (respectivement $K > 0$) favorisant l'état $[A, \pi]$ (respectivement $[B, \pi]$). La différence d'énergie entre les deux est proportionnelle à K . Sachant que le couplage K est une perturbation pertinente dimérisant le système, la levée de dégénérescence de ces deux états signifie que l'énergie d'excitation $\Delta E_A = E(A, \pi) - E_0$ (resp. $\Delta E_B = E(B, \pi) - E_0$) est abaissée par rapport au cas $K = 0$, et s'annule dans la limite thermodynamique - d'où un fondamental 2 fois dégénéré caractéristique de la phase dimérisée - tandis que l'autre état garde une énergie d'excitation finie $O(K)$. Une manière quantitative de le voir sur des systèmes finis est de comparer, suivant le signe de K , ΔE_A ou ΔE_B à l'énergie de la première excitation triplet (qui est la plus basse pour $|K| \ll J$) et de considérer les positions des croisements, $(K/J)_-$ et $(K/J)_+$ (voir figure 4.4 à gauche). Pour $|K| > (K/J)_\pm$ l'énergie d'excitation associée à la dimérisation est la plus basse, et s'annule dans la limite thermodynamique. Notons que pour $K/J = 4/3$, le fondamental est doublement dégénéré sur tout système périodique fini (par exemple $L = 10$) - le système est alors équivalent à une chaîne $J_1 - J_2$ (modèle dit de Majumdar-Ghosh [79]) au point $J_2 = J_1/2$. Le fait que la dimérisation intervient pour K infinitésimal se traduit par le scaling de $(K/J)_\pm$ qui tend, dans un cas comme dans l'autre, vers 0 pour $L \rightarrow \infty$. La phase dimérisée est gappée, avec un gap fini dans la limite thermodynamique pour la première excitation triplet, comme le montre le scaling sur la Figure 4.4 à droite.

Dimérisation des chaînes dans le modèle $t_2 - W$ Après avoir analysé le cas modèle de 2 chaînes couplées, on va rechercher dans le spectre du modèle $t_2 - W$ les états correspondants aux états $[A, \pi]$ et $[B, \pi]$, pour vérifier les prédictions du paragraphe 4.4.1. Dans la limite $t_2 = 0$, le fondamental est constitué par des chaînes de Heisenberg (dans leur état fondamental) avec un couplage effectif $J_{\text{eff}} = 2|W|$, et le spectre contient les excitations *de spin* dans les chaînes, mais aussi des excitations *de charge*, d'énergie $O(W)$ (justement les états intermédiaires dans l'approche perturbative en $|t_2/W|$). Si les excitations de charge sont gappées dans la limite thermodynamique et n'influent pas sur la dimérisation, on les rencontre en analysant des systèmes finis. Parmi les systèmes numériquement accessibles, c'est-à-dire dont l'espace de Hilbert n'est pas trop gros, on recherche ceux où tous les nombres quantiques mentionnés dans le tableau 3.1 peuvent être définis. Ceci exclut le cluster $N = 72$, qui n'accomode pas la représentation $[A', (\pi/2, \pi)]$ (ni par conséquent une phase *MCPC-2*) mais on peut considérer les clusters $N = 32$ ou

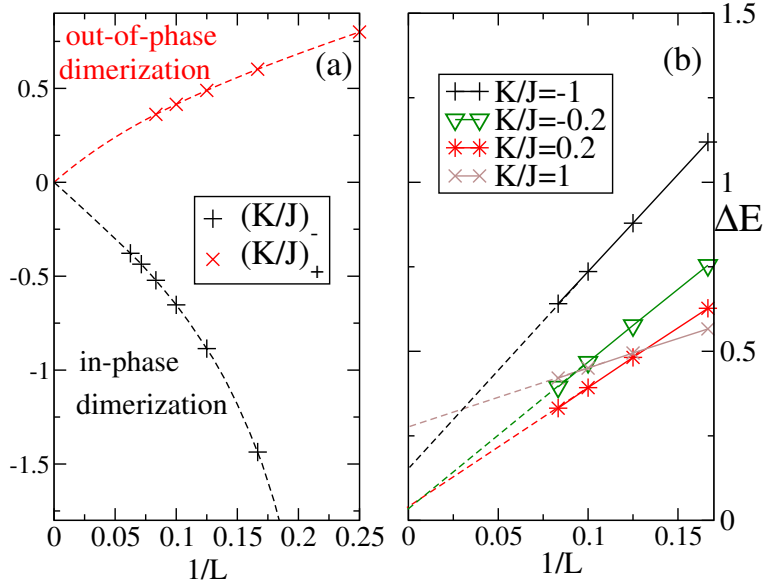


FIG. 4.4 – A gauche : positions de croisement $(K/J)_-$ et $(K/J)_+$ entre la première excitation triplet et le premier état singulet ($[A, \pi]$ ou $[B, \pi]$ suivant le signe de K , en fonction de $1/L$. La phase dimérisée ($|K/J| > |(K/J)_\pm|$) s'étend sur tout le domaine $K \neq 0$ dans la limite $L \rightarrow \infty$. A droite : Energie d'excitation du premier état triplet en fonction de $1/L$, pour diverses valeurs de K , indiquant un gap à la limite thermodynamique augmentant avec $|K/J|$.

$N = 64$. Sur un système de $N = 64$ sites, où le fondamental est constitué de 2 chaînes de Heisenberg de longueur $L = 8$, les premiers états excités, montrés sur la figure 4.5 pour $|t_2/W| \ll 1$, sont classés en branches distinctes :

- (i) la première branche d'excitations (n'apparaissant pas sur la figure) correspond à l'excitation triplet sur une chaîne, l'autre restant dans son fondamental (l'énergie d'excitation correspond exactement à celle du premier triplet sur une chaîne $L = 8$).
- (ii) une excitation de charge brisant une chaîne $L = 8$ périodique en une chaîne ouverte $L = 6$ et un singulet. L'excitation de charge brise toutes les symétries de translation du système donc est hautement dégénérée. Son énergie d'excitation est la somme d'un terme de spin $E_0(L = 6, \text{open}) - 3J_{\text{eff}}/4 - E_0(L = 8, \text{periodic})$ et d'un terme de charge $2(|W|/2)$ dû à la partie indépendante du spin dans H_W , sur les 2 plaquettes rendues non flippables par le flip. Elle reste finie dans la limite thermodynamique (tendant, d'après des calculs d'Ansatz de Bethe [80], vers $|W| + 2|W|(\pi/4 - 3/2 + 3/2 \ln(2)) \sim 1.65|W|$).
- (iii) l'équivalent (indiqué $(2+0)\text{ triplets}$) de l'excitation doublement dégénérée analysée dans le modèle 4.22. Comme pour (i) et (ii), on peut l'identifier par son énergie d'excitation, figurant dans le spectre du Hamiltonien 4.22. La dégénérescence est ici plus grande, avec 8 nombres quantiques distincts : $[A1, (\pi, \pi)]$, $[B1, (\pi, \pi)]$, $[A'1, (\pi, 0)]$, $[A', (\pi/2, \pi)]$, etc : en plus des symétries du réseau damier brisées par l'ordre en chaînes l'excitation brise la translation suivant l'axe des chaînes. Comme pour la branche (i) ces excitations ont une énergie s'annulant dans la limite thermodynamique.
- (iv) la branche d'excitations à un triplet par chaîne, qu'on trouve entre autres dans le secteur de spin $S = 0$.

On s'intéresse ici aux analogues des états $[A, \pi]$ et $[B, k_x = \pi]$ du modèle de 2 chaînes couplées; ceux-ci étant nécessairement dans le secteur singulet (excluant la branche (i)) et d'énergie d'excitation $O(|W|/L)$ (excluant la branche (ii)), on analyse plus particulièrement la branche (iii). On y distingue, dans l'inset de la figure 4.5 les états $[A', (\pi, \pm\pi/2)]$ et $[A', (\pi/2, \pi)]$, analogues de l'état $[B, k_x = \pi]$ car impairs par la translation d'une chaîne à l'autre; et d'autre part les 4 autres états, pairs par cette translation donc analogues de $[A, \pi]$ dans le système à 2 chaînes. L'analogie de la quantité $(K/J)_{\pm}$ est ici la position sur l'axe $t_2/|W|$ de croisement entre les branches (i) et (iii), mais à cause de la taille réduite des chaînes ce croisement intervient pour un couplage effectif trop important pour négliger l'effet des excitations de charge. Par contre la dépendance en $t_2/|W|$ de la différence d'énergie entre les états analogues de $[A, \pi]$ et ceux analogues de $[B, \pi]$, à l'intérieure de la branche (iii), est instructive. L'inset de la figure 4.5-a montre que ceux-ci constituent bien deux sous-branches séparées, ce qu'on retrouve plus quantitativement sur la figure 4.5-b : le splitting entre les deux sous-branches dégénérées semble proportionnel à $W(t_2/W)^4$, alors que le splitting entre les différents états d'une sous-branche (par exemple $[B1, (\pi, \pi)]$ et $[A1, (\pi, \pi)]$) semble polynomial en t_2/W mais d'ordre plus élevé (visiblement 6, i.e. la dégénérescence entre ces états est levée par un terme effectif résultant de processus à 3 flips). Le splitting entre sous-branches en $W(t_2/W)^4$, comparé au splitting linéaire en K dans le modèle 4.22 entre les états analogues, confirme bien la prédiction du paragraphe 4.4.1 : on peut bien représenter l'effet de H_2 en perturbation de H_W par un modèle de type 4.22 avec $K_{\text{eff}} = A|W|(t_2/W)^4$. Le

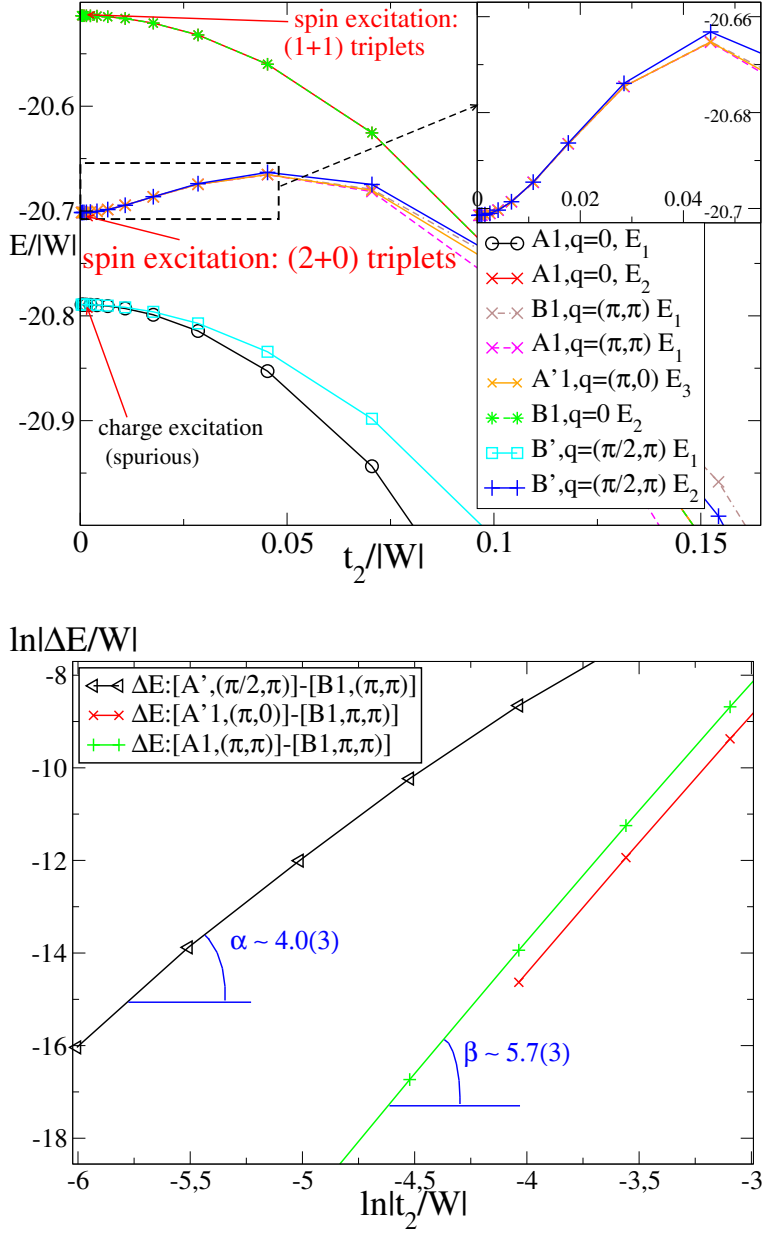


FIG. 4.5 – a (gauche) : Energies des états excités dans le secteur $S = 0$ pour $|t_2/W| \ll 1$: on identifie différentes branches (ici (ii),(iii) et (iv) par E croissante correspondant à différents types d'excitations de spin ou de charge. b (droite) : La différence d'énergie entre, dans la branche (iii), l'état $[B1, (\pi, \pi)]$ servant de référence et 3 autres états, en fonction de $|t_2/W|$ en log-log : on voit qu'un état $[A', (\pi/2, \pi)]$ se sépare des autres par un splitting $\sim |t_2/W|^4$, le splitting entre ces derniers étant aussi polynomial en t_2/W mais d'ordre plus élevé.

signe de K_{eff} est indiqué par la position relative des deux sous-branches : la sous-branche analogue de $[A, \pi]$ étant d'énergie inférieure ceci indique que $K_{\text{eff}} < 0$, i.e. la dimérisation des chaînes est en phase et conduit à une phase *MCPC1*.

4.4.2 Analyse complète du spectre de basse énergie

Ayant exclu la possibilité d'une phase *MCPC2* par dimérisation des chaînes pour $|t_2/W| \ll 1$, et conclu à l'existence d'une phase *MCPC1* dans cette limite, déjà prédite variationnellement, on aborde la question de la structure du diagramme de phases pour $W < t_2$, soit en termes de $\theta = \tan^{-1}(W/t_2)$: $-\pi/2 < \theta < \pi/4$. L'approche variationnelle prédit une transition de la phase *MCPC1* à la phase *RSPC* avec un large domaine de stabilité de celle-ci, mais on doit se rappeler que le calcul variationnel dans le cas bosonique (QDM) prédit aussi une phase plaquette là où le système est dans une phase colonnaire ou mixte. On peut donc tester, là encore par l'analyse résolue en symétrie du spectre de basse énergie, l'hypothèse de la transition *MCPC1-RSPC*, tout en gardant en mémoire d'autres scénarii possibles (notamment une phase *MCPC1* s'étendant sur tout le domaine $-\pi/2 < \theta < \pi/4$, ou l'apparition d'une phase *MCPC2* pour $\theta + \pi/2$ fini). Dans l'hypothèse d'une transition *MCPC1-RSPC*, celle-ci est détectable sur les spectres des 3 systèmes $N = 32$, $N = 64$ et $N = 72$, qui accomodent les deux phases en question (l'hypothèse moins probable d'un domaine d'existence de *MCPC2* n'étant testable que sur les deux premiers systèmes). On analyse pour cela les états de plus basse(s) énergie(s) pour toutes les représentations listées dans le tableau 3.1 (en utilisant le tableau de correspondance 4.1) : si une phase cristalline est bien établie, i.e. suffisamment loin d'un point de transition sur l'axe θ , le fondamental d fois dégénéré (pour $N \rightarrow \infty$) correspond pour N fini au fondamental du système fini ($[A1, (0, 0)]$) et à $d-1$ états excités de nombres quantiques caractérisant cette phase. Ces $d-1$ états, dont l'énergie d'excitation :

$$\Delta E(N_q) = E_0(N_q) - E_0(A1, (0, 0)) \quad (4.23)$$

tend vers 0 pour $N \rightarrow \infty$, sont d'autant plus séparés des excitations physiques du système (gappées dans la limite $N \rightarrow \infty$) que N est grand. Les courbes de la figure 4.6 montrent, pour les 3 systèmes traités, les spectres de basse énergie, en fonction de θ - les énergies d'excitation, pour une bonne lisibilité du spectre, sont en unités de $\sqrt{W^2 + t_2^2}$. Notons d'abord que pour $N = 64$ et $\theta \rightarrow -\pi/2$, on retrouve les branches d'excitations (i) (premier état triplet) et (ii) (excitation de charge brisant une chaîne) discutées au paragraphe 4.4.1. On trouve des branches similaires (pas forcément dans le même ordre en énergie) sur les spectres des autres clusters. Bien que pour $\theta \leq -5\pi/12$ ces branches soient nettement séparées (d'une énergie $\Delta E \geq |W|$) du fondamental, et que celui-ci est quasi-dégénéré avec des états $[B1, (0, 0)]$ et $[A'1, (\pi, 0)]$ (et $[A'1, (0, \pi)]$) caractéristiques d'un fondamental *AFC*, cela ne signifie pas que la phase *AFC* subsiste dans ce régime, pour les raisons qu'on a vues ; mais que dans cette limite d'ordre quasi-1D où les chaînes dimérisées sont faiblement couplées, les effets de taille finie sont beaucoup plus sensibles que dans un cas 2D. L'analyse des nombres quantiques des 4 ou 8 états de plus basse énergie est à restreindre au domaine $\theta \geq -5\pi/12$, ou les effets de taille finie sont moins

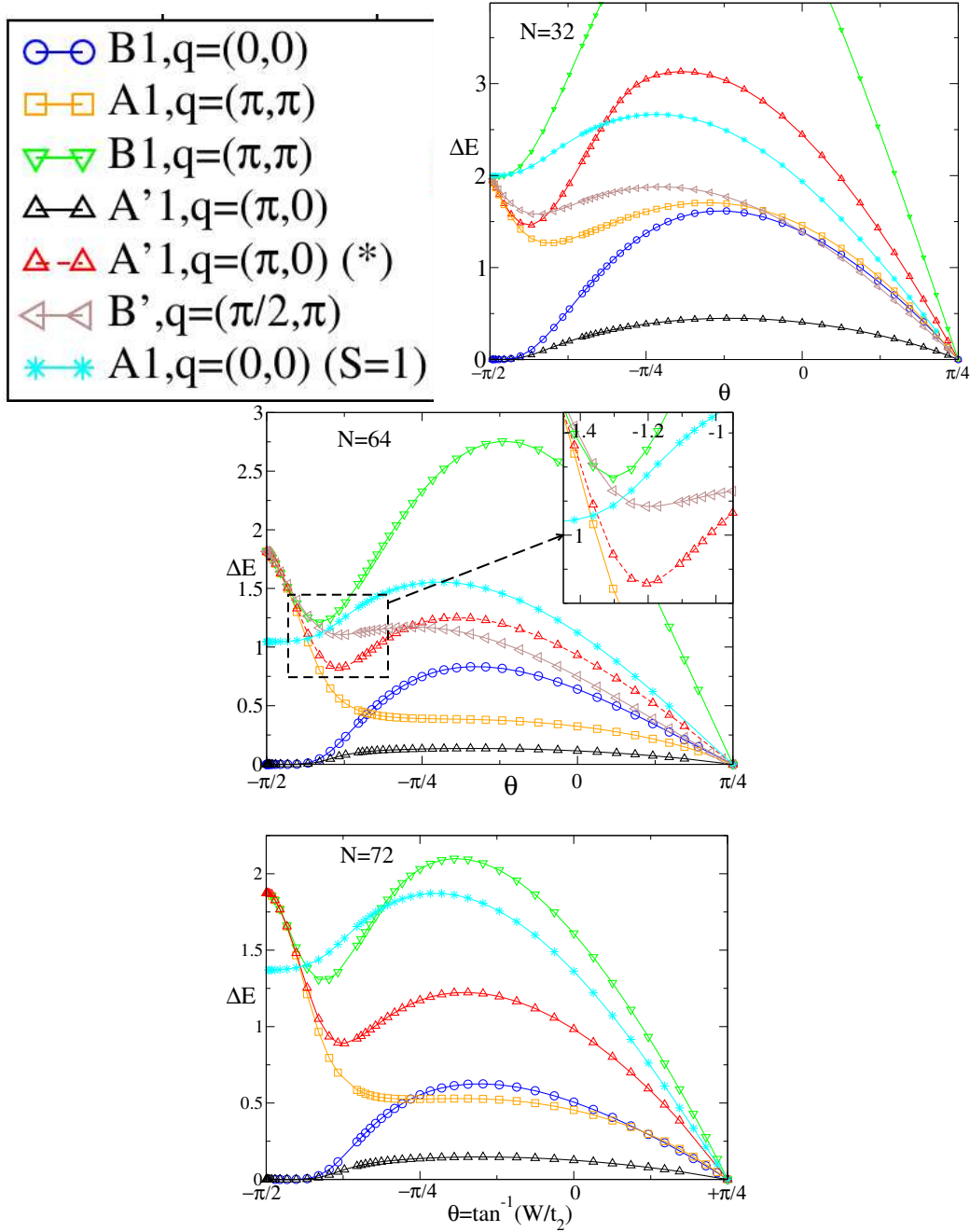


FIG. 4.6 – Energies d'excitations $\Delta E(N_q) = E(N_q) - E_0(A1, (0, 0))$, en unités de $t_2^2 + W^2$, du modèle $t_2 - W$ en fonction de $\theta = \tan^{-1}(W/t_2)$, pour les clusters $N = 32$ (en haut à droite), $N = 64$ (milieu), $N = 72$ (bas). Chaque énergie représentée est la plus basse dans la représentation indiquée dans l'encadré (haut, gauche), sauf (*) signalant le premier état excité ; sauf mention contraire ($S = 1$) il s'agit d'états singulets.

importants.

Dans la région $\theta \sim -3\pi/8$, on retrouve bien parmi les 8 états de plus basse énergie ceux caractérisant le fondamental *MCPC1* (voir le tableau 3.1). Notamment, l'inset de la figure 4.6 pour $N = 64$ montre que le deuxième état $[A'1, (\pi, 0)]$ (et son analogue $(0, \pi)$) est d'énergie nettement plus basse que l'état $[A', (\pi/2, \pi)]$ représenté (et ses analogues par symétrie), ce qui indique une stabilisation de la phase *MCPC1* par rapport à *MCPC2*, comme on l'a déjà vu pour $|t_2/W| \ll 1$. L'état $[B1, (\pi, \pi)]$ a beau être d'énergie supérieure à ceux-ci, il est aussi abaissé en énergie par rapport à la limite $t_2/W = 0$ (également sur les spectres des deux autres clusters).

Pour θ croissant, entre (approximativement) $-3\pi/8$ et $-\pi/4$ on observe un autre changement notable dans le spectre de basse énergie : l'état $[B1, (0, 0)]$ remonte en énergie et se sépare nettement des états $[A1, (0, 0)]$ et $[A'1, (\pi, 0)]$. Parallèlement, parmi les autres états représentés, un voit son énergie d'excitation particulièrement abaissée : l'état $[A1, (\pi, \pi)]$ présent dans les 4 états dégénérés de la phase *RSPC*. Pour $N = 64$ un croisement de niveau entre $[A1, (\pi, \pi)]$ et $[B1, (0, 0)]$ intervient vers $\theta \geq -3\pi/8$, et peut être interprété comme le signe d'une transition *MCPC1-RSPC* ; aucun changement notable dans le spectre n'intervenant pour des valeurs supérieures de θ , sinon la décroissance de toutes les énergies d'excitation en s'approchant de $\theta = \pi/4$, caractéristique de la proximité de ce point critique mais pas d'une fusion de la phase *RSPC* pour θ inférieur. Le croisement de niveau entre $[A1, (\pi, \pi)]$ et $[B1, (0, 0)]$ a aussi lieu pour $N = 72$ mais avec, pour θ supérieur, une moins grande différence entre ces deux états, et n'a pas lieu pour $N = 32$, ce qui est lié aux effets de taille finie plus importants - la taille des chaînes dimérisées de la phase *MCPC1* est $L = 6$ et $L = 4$ pour ces deux clusters et $L = 8$ pour $N = 64$, et l'énergie d'excitation $\Delta E(A1, (\pi, \pi))$ semble être une fonction décroissante de L plutôt que de N . L'image d'une phase en plaquettes résonantes explique cela : deux plaquettes résonantes voisines, sur un même axe x , voient leurs corrélations amplifiées par la périodicité suivant x , spécialement pour $N = 32$ où ces plaquettes résonantes se voient des deux côtés.

L'analyse des spectres de basse énergie sur les 3 clusters $N = 32, 64, 72$ a donc confirmé la présence d'une phase *MCPC1* dans un domaine fini de θ ($-\pi/2 < \theta \leq -3\pi/8$ au moins), et mis en évidence une phase *RSPC* pour $\theta \geq -\pi/4$. La transition entre ces deux phases peut être quantifiée par le croisement de niveau $[A1, (\pi, \pi)] - [B1, (0, 0)]$, mais pour les clusters considérés les effets de taille finie sont trop sensibles pour un repérage précis de cette transition. Des tailles plus grandes étant inaccessibles par diagonalisation exacte (sauf $N = 80$, mais le cluster carré correspondant est invariant par C_4 et non C_{4v} donc ne permet pas la même analyse en symétrie), d'autres méthodes numériques ou le calcul d'autres observables semblent nécessaires pour localiser plus précisément cette transition.

4.4.3 Corrélations de plaquettes dans les différentes phases ordonnées

Sachant maintenant, ou ayant de fortes indications, que le diagramme de phase du modèle étudié présente une transition *MCPC1-RSPC* en variant W/t_2 , on peut caractériser mieux cette transition par le calcul de fonctions de corrélations ou d'un paramètre d'ordre adaptés. Les deux phases en question diffèrent par leurs symétries, la phase *RSPC* étant invariante par rotation de $\pi/2$ mais pas la phase *MCPC1* - ce qui autorise une transition de second ordre, comme semble l'indiquer l'approche variationnelle de la section 4.2. D'autre part, les deux phases ayant une structure en plaquettes résonantes, on peut considérer des opérateurs définis sur les plaquettes et non sur les sites.

Corrélations statiques de plaquettes On va d'abord s'intéresser à des opérateurs définis sur chaque plaquette vide p et caractérisant la flippabilité de la plaquette par le flip $H_{2,p}$, étant non nuls si deux particules de spin opposés sont sur la plaquette. On peut définir un tel opérateur de symétrie $A1$ (P_+) ou $B1$ (P_-) suivant qu'il soit impair ou pair par rotation de $\pi/2$ autour du centre de la plaquette :

$$P_+(\vec{r}_p) = (n_{p_1}n_{p_3} + n_{p_2}n_{p_4})\delta(\sigma_z^p) \quad (4.24)$$

$$P_-(\vec{r}_p) = (n_{p_1}n_{p_3} - n_{p_2}n_{p_4})\delta(\sigma_z^p) \quad (4.25)$$

On définit ensuite les corrélations connexes de l'opérateur $P_{+/-}$:

$$C_{+/-}(\vec{r}) = \langle \Psi_0 | P_{+/-}(0) P_{+/-}(\vec{r}) | \Psi_0 \rangle \quad (4.26)$$

($|\Psi_0\rangle$ étant le fondamental exact sur le cluster considéré ; on peut considérer les corrélations connexes en soustrayant à l'expression précédente $\langle \Psi_0 | P_-(0) | \Psi_0 \rangle^2$, mais pour l'opérateur P_- celle-ci est nulle par symétrie ; pour P_+ les termes non connexes s'annulent dans le facteur de structure en $\vec{k} \neq 0$). Finalement, le facteur de structure $S_{+/-}(\vec{k})$ est la transformée de Fourier en \vec{k} de $C_{+/-}(\vec{r})$ (calculée en excluant les corrélations à distances 0 ou 1, pour lesquelles les opérateurs $P_{+/-}(0)$ et $P_{+/-}(\vec{r})$ partagent au moins un site).

$$S_{+/-}(\vec{k}) = \sum_{|\vec{r}|>1} e^{i\vec{k}\vec{r}} C_{+/-}(\vec{r}) \quad (4.27)$$

Les facteurs de structure de ces opérateurs indiquent, outre une mise en ordre en plaquettes flippables, la symétrie du cristal correspondant : si le fondamental 4- ou 8- fois dégénéré (dans la limite thermodynamique) d'une des phases n'a pas la représentation $N_q = [A1/B1, \vec{k}]$, le facteur de structure $S_{+/-}(\vec{k})$ de l'opérateur $P_{+/-}$ en \vec{k} . Notamment, $S_-(\vec{q} = (0, 0))$ dans la phase *RSPC* est nul à des effets de taille finie près. Par contre, dans la phase *MCPC1* la brisure de symétrie de rotation se traduit par $\langle P_- \rangle \neq 0$ sur les plaquettes résonantes et en particulier $S_-(0, 0) \neq 0$.

La figure 4.7-a présente pour différentes valeurs de N le quotient ΔS_- de $S_-(0, 0)$ par sa valeur maximale (obtenue pour $\theta = -\pi/2$). Lorsqu'on est clairement dans la phase *MCPC1* ($\theta \leq -3\pi/8$) cette quantité décroît avec θ et semble à peu près indépendante

de N ; par contre pour $\theta \geq -\pi/4$, ΔS_- a des valeurs non seulement très faibles mais d'autant plus faibles que le système est grand (comme $\Delta E[B1, (0, 0)]$ pour les mêmes paramètres, ΔS_- est une fonction décroissante de la taille linéaire du système plutôt que de N ; les différentes orientations des 3 clusters considérés rendent une analyse plus quantitative difficile). Par contre, la valeur de $S_-(0, 0)$ dans la limite $\theta = -\pi/2$, représentée en inset de la figure 4.7-a, croît à peu près linéairement avec N comme on s'y attend dans la phase *MCPC1* où $C_-(d \rightarrow \infty)$ est finie.

Au vu de ces données on peut raisonnablement supposer que pour $\theta \geq -\pi/4$, $S_-(0, 0)$ s'annule pour $N \rightarrow \infty$, et les valeurs très faibles observées sont des corrections de taille finie. Comme indication complémentaire, sur la figure 4.7-b est représentée (pour $N = 64$) la corrélation $C_-(d_{max})$ à distance maximale $d_{max} = 4$ entre plaquettes résonantes. Celle-ci suit la même évolution que $S_-(0, 0)$, et sa valeur importante pour $\theta \leq -3\pi/8$ indique que l'ordre *MCPC1* est à longue distance.

A priori, le facteur de structure $S_+(\pi, \pi)$ peut aussi indiquer la transition entre les deux phases, le fondamental dégénéré de la phase *MCPC1* ne possédant pas la représentation $[A1, (\pi, \pi)]$ (au contraire de la phase *RSPC*). $S_+(\pi, \pi)$ est aussi représenté sur la figure 4.7-b, et passe d'une valeur assez faible dans la limite $\theta \rightarrow -\pi/2$ (phase *MCPC1*) à une valeur plus importante pour $\theta \leq -\pi/4$. La valeur non nulle de $S_+(\pi, \pi)$ dans la phase *MCPC1* vient une fois de plus des effets de taille finie amplifiés par le caractère quasi-1D de cette phase - pour des chaînes de spins découplées (cas $\theta = -\pi/2$) ce terme est nul dans la limite thermodynamique mais la criticalité induit une valeur finie $O(1/L)$ pour des chaînes de taille L . La taille effective assez réduite $L \leq 8$ sur les clusters considérés rend difficile l'utilisation de $S_+(\pi, \pi)$ pour distinguer la phase *RSPC* de la phase *MCPC1*.

Corrélations de flip Un autre type d'observables bien adaptées à l'étude de la phase *MCPC1* sont les corrélations spatiales C_{pl} de l'opérateur de flip P_{\square} , défini sur une plaquette vide p en \vec{r} tel que $H_{2,p} = -t_2 P_{\square}(\vec{r})$. On considère ici les corrélations connexes, i.e. en soustrayant $\langle \Psi_0 | P_{\square}(\vec{0}) | \Psi_0 \rangle^2$. Comme précédemment, on choisira pour définir le facteur de structure S_{pl} de ces corrélations de ne prendre en compte que les corrélations $C_{pl}(d)$ à distance $d > 1$ entre plaquettes. Une valeur finie à grandes distances de $C_{pl}(d)$ est un bon indicateur d'une phase ordonnée à singulets résonants sur les plaquettes, comme la phase *RSPC*. Ces corrélations ne sont pas nulles mais moins importantes dans une phase anisotrope *MCPC1*. Dans l'approche variationnelle, les corrélations de flip sont non nulles seulement à des *distances paires*, i.e. des positions relatives $\vec{r} = (2p, 2q)$ ($p, q \in Z$) entre plaquettes résonantes ; alors elles varient avec le paramètre variationnel ϕ en $\sin^2(\phi)$, donc en $(t_2/W)^2$ dans la phase *MCPC1* (soit dans cette approche pour $W \leq -4t_2$) jusqu'à la transition vers la phase *RSPC*, dans laquelle elles ont une valeur finie indépendante de W/t_2 .

On peut retenir de cette approche schématique que les corrélations de flip sont modulées avec la distance et gardent une valeur finie à longue distance dans les phases

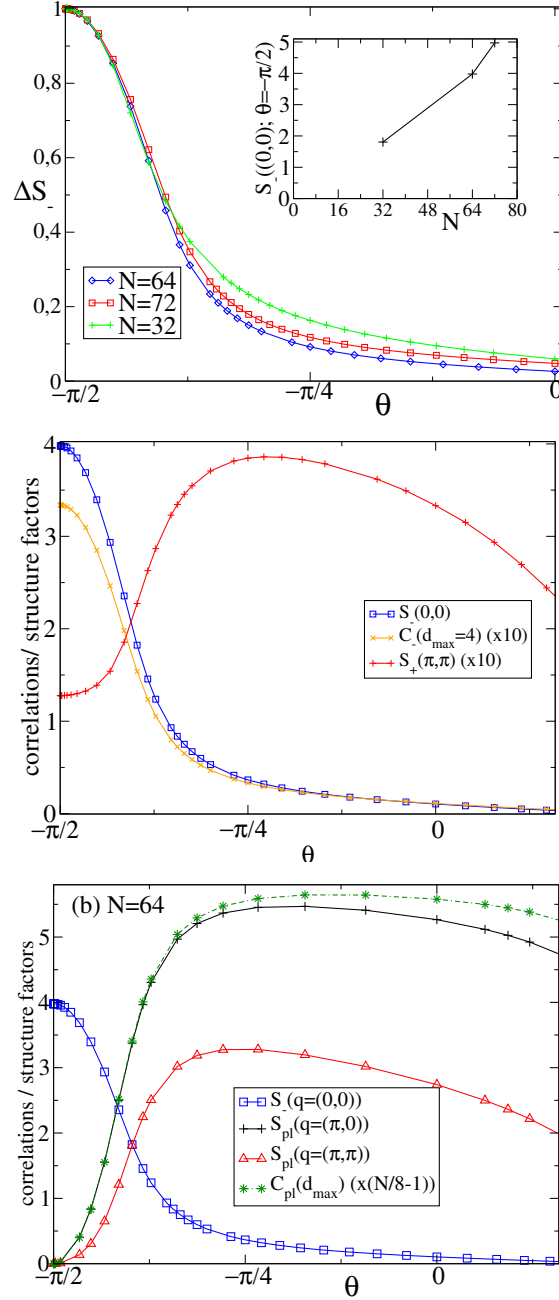


FIG. 4.7 – Haut (a) : Evolution avec θ de ΔS_- , facteur de structure $S_-(\pi, \pi)$ rapporté à sa valeur maximale, pour les différents clusters $N = 32, 64, 72$. Insert : Evolution avec N de la valeur maximale $S_-(0, 0)$ (atteinte pour $\theta = -\pi/2$). Milieu (b) : Facteurs de structure $S_+(\pi, \pi)$ et $S_-(0, 0)$ des opérateurs de plaquette P_+ et P_- sur le cluster $N = 64$, en fonction de $\theta = \tan^{-1}(W/t_2)$. La corrélation $C_-(d_{max} = 4)$ est aussi représentée, et suit une évolution similaire à celle de $S_-(0, 0)$. Bas (c) : Facteurs de structure S_{pl} de l'opérateur de flip P_{\square} en $\vec{k} = (\pi, 0)$ et $\vec{k} = (\pi, \pi)$, pour $N = 64$. La comparaison avec la corrélation (connexe) de cet opérateur, $C_{pl}(d_{max})$ indique l'ordre à longue distance en plaquettes résonantes.

MCPC1 et *RSPC*, maximisée dans la phase *RSPC*. La répartition des plaquettes résonantes suggère de considérer le facteur de structure S_{pl} de ces corrélations aux vecteurs $\vec{k} = (\pi, 0)$ et $\vec{k} = (\pi, \pi)$. En effet, $S_{\text{pl}}(\pi, 0)$ et $S_{\text{pl}}(\pi, \pi)$, représentés sur la figure 4.7-c pour $N = 64$, suivent bien le comportement décrit ci-dessus : nuls en $\theta = -\pi/2$, ils augmentent continûment avec θ et saturent autour de $\theta_c \sim -1.0(2)$: ceci est consistant avec les comportements de $S_-(0, 0)$ et le spectre de basse énergie, le tout indiquant une phase *RSPC* maximisant la résonance des singulets pour $\theta \geq \theta_c$. La décroissance de $S_{\text{pl}}(\pi, \pi)$ (et dans une moindre mesure de $S_{\text{pl}}(\pi, 0)$) pour $\theta \leq \pi/4$ croissant indique que la phase *RSPC*, tout en conservant ses symétries, a des corrélations (entre autre celles définies sur les plaquettes) à portée de plus en plus grande en se rapprochant du point $\theta = \pi/4$ où elles deviennent critiques.

Il est intéressant, là aussi, de comparer ces facteurs de structure avec la corrélation connexe C_{pl} à $d_{\text{max}} = 4$: celle-ci, rescalée par un facteur $N/8 - 1$ égal au nombre de plaquettes résonantes à *distances paires* d'une plaquette de référence, $((N/8 - 1)C_{\text{pl}}(d_{\text{max}}))$ est représentée pour $N = 64$ sur 4.7-c) est quasiment égale à $S_{\text{pl}}(\pi, 0)$. Ceci indique que les corrélations de flip à des positions relative $(2p, 2q)$ ne décroissent pas ou peu avec la distance et caractérisent bien un ordre à longue distance. L'approche variationnelle prédit que des corrélations nulles à toutes autres positions relatives (non- $(2p, 2q)$) laisse penser qu'elles sont négligeables ; en fait, la différence entre $S_{\text{pl}}(\pi, \pi)$ et $S_{\text{pl}}(\pi, 0)$ s'explique par des valeurs de $C_{\text{pl}}(2p, 2q + 1)$ non négligeables (corrélation entre une plaquette résonante et une plaquette située entre deux voisines résonantes) bien que plus faibles qu'à des positions $(2p, 2q)$. Les corrélations $C_{\text{pl}}(2p, 2q + 1)$ ont une contribution négative à $S_{\text{pl}}(\pi, \pi)$, mais s'annulent dans $S_{\text{pl}}(\pi, 0)$, et justifient qu'on choisisse plutôt $S_{\text{pl}}(\pi, 0)$ que $S_{\text{pl}}(\pi, \pi)$ pour caractériser l'ordre *RSPC*.

Conclusion partielle

Le réseau damier ou pyrochlore 2D, s'il n'est pas retrouvé directement dans des composés réels, permet de considérer les contraintes résultant de fortes corrélations sur un réseau pyrochlore. Partant d'un modèle de Hubbard étendu, on a vu que la conjugaison de fortes répulsions coulombiennes et d'un remplissage commensurable avec le réseau faisant émerger non seulement des contraintes de dimères, mais aussi, par un traitement perturbatif des termes cinétiques, une dynamique effective favorisant des phases de singulets. Le modèle $t_2 - W$ qu'on a étudié autorise une grande variété de phases cristallines et, situation originale, une interpolation entre la physique de chaînes de Heisenberg et celle d'une phase critique de dimères au point de Rokhsar-Kivelson du modèle (ici avec des dimères à 2 couleurs). La combinaison d'arguments perturbatifs et de l'analyse numérique du spectre de basse énergie donne une image assez nette, représentée sur la figure 4.8, du diagramme de phases du modèle, en accord global avec une première approche variationnelle (sauf dans les limites où les corrélations décroissent lentement avec la distance et l'approche variationnelle devient clairement caduque). Ce diagramme de phases pourrait être précisé en utilisant des techniques de Monte-Carlo quantiques, autorisées ici car, bien que le modèle traitant des fermions, on a vu qu'une transforma-

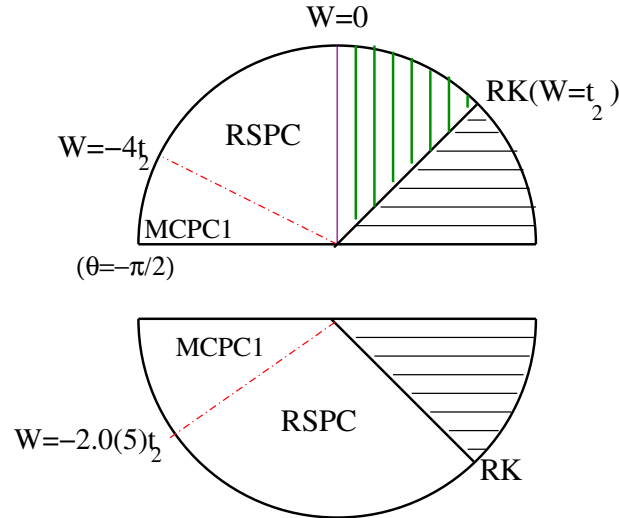


FIG. 4.8 – Diagrammes de phase variationnel (au-dessus) et obtenu par diagonalisation exacte (en-dessous) pour le modèle $t_2 - W$ de fermions à $n = 1/4$ sur le réseau damier. Les phases *RSPC* et *MCPC1* prédites variationnellement sont retrouvées numériquement (sur des domaines du diagramme respectivement moins et plus étendus).

tion canonique pouvait rendre tous les termes hors-diagonaux du Hamiltonien de même signe. Un résultat essentiel de ce chapitre est l'influence des degrés de liberté de spin des particules (par rapport au cas bosonique vu au chapitre 3) sur la nature du cristal résultant des fortes corrélations, en termes de symétries notamment. La particularité d'une dynamique effective de résonances de singulets incite à étudier l'évolution de cette phase lorsqu'on considère une mobilité finie des électrons.

Chapitre 5

Application d'un modèle de dimères à la transition metal-isolant sur le réseau damier

Ce chapitre s'inscrit dans la continuité du précédent au sens où il traite du même système : des fermions sur le réseau damier à $n = 1/4$, avec de fortes répulsions coulombiennes à courte distance. On va considérer un paramètre V/t (caractérisant le rapport des interactions à la mobilité des électrons) fini, ce qui permet d'envisager une transition de l'isolant *RSPC* déterminé précédemment vers un état métallique lorsque V/t diminue. On va dans un premier temps traiter d'un point de vue général la transition métal-isolant dite de Mott, induite par les interactions, et les manières de la caractériser, avant de se focaliser sur les spécificités d'une telle transition sur un réseau frustré et plus particulièrement celui qu'on étudie ici. Ceci permettra de définir un modèle effectif, toujours basé sur la contrainte de dimères des configurations de basse énergie, mais pouvant inclure des défauts de charge autorisant un courant. Cette modélisation permet de calculer différentes quantités, caractérisant soit l'état isolant ordonné (gap de charge, facteurs de structure), soit la phase métallique (poids de Drude) et dont on analysera le comportement dans la dernière partie du chapitre.

5.1 Phénoménologie de la transition de Mott

5.1.1 Isolants de Mott induits par les interactions

Le caractère isolant ou métallique d'un solide cristallin est généralement lié à sa structure de bande : si la densité d'états en $E = E_F$ (niveau de Fermi) est finie, i.e. le système non gappé, des excitations de charge, sur des niveaux excités proches de E_F , peuvent permettre la conduction du courant. Une quantité caractérisant bien le caractère métallique ou isolant est donc le gap de charge Δ , énergie nécessaire pour créer une excitation de charge (à un électron). Notons qu'une classification courante des solides consiste à distinguer les métaux et les isolants par le signe de $d\rho/dT$ où $\rho(T)$ est

la résistivité du matériau. Pour un métal, dont les excitations de basse énergie peuvent être décrites par la théorie des liquides de Fermi, $\rho(T)$ croît en T^2 si on ne tient compte que des interactions électron-électron (du fait des interactions électron-phonon, dans les métaux courants à T ambiante on observe souvent un comportement linéaire en T) ; par contre dans un isolant avec $\Delta \neq 0$ la densité de porteurs de charge, et donc la conductivité pour $k_B T \ll \Delta$ varie en $e^{-\frac{\Delta}{k_B T}}$, et donc $d\rho/dT < 0$. Une transition métal-isolant en fonction de T est alors caractérisée par un minimum de $\rho(T)$.

Cependant on se concentre ici sur des transitions de phases quantiques à basse température, en fonction d'autres paramètres, notamment les interactions entre électrons. En effet, dans le cas d'interactions fortes entre électrons la description des composés par la la théorie des bandes n'est en général pas adaptée : celle-ci peut prédire un comportement conducteur (avec une bande de valence (B.V.) partiellement remplie) bien que des fortes corrélations électroniques entraînent l'ouverture d'un gap dans la B.V. pouvant rendre le composé isolant (*isolant de Mott* [4]) si le remplissage de la B.V. prévu par la théorie des bandes coïncide avec le nombre d'états de la bande sous le gap ouvert par les corrélations. L'exemple typique est celui du modèle de Hubbard (à une bande) sur un réseau carré vu au chapitre 1. Dans sa version standard, avec seulement des sauts aux plus proches voisins ($t_{i,j} = t\delta(\vec{r}_{ij}, 1)$) et l'interaction sur site U , pour $U \gg |t|$, la densité d'états en énergie (par exemple calculée par la théorie de champ moyen dynamique, abrégée en anglais DMFT) montre bien un gap entre deux bandes symétriques (voir figure 5.1) alors qu'à $U = 0$ on n'a qu'une seule bande de largeur proportionnelle à t ($8t$ pour un réseau carré 2D). L'ouverture du gap se fait pour tout $U > 0$ en une dimension mais à U/t fini en 3 dimensions ; en 2 dimensions sur réseau carré, cette transition a lieu pour U/t nul dans ce modèle (l'état métallique à $U = 0$ et $n = 1$ est instable à cause d'un nesting parfait de la surface de Fermi pour $\vec{k} = (\pi, \pi)$) dans ce modèle mais fini avec un terme t' de saut en diagonale.

5.1.2 Caractérisations de la transition métal-isolant

On se place ici dans le cas où un état métallique est conservé dans la limite des faibles interactions ; pour U/t croissant, la bande centrée autour du niveau de Fermi (i.e. en $\omega = 0$, par rapport au potentiel chimique fixé à $\mu = 0$) disparaît progressivement, et l'annulation de la densité d'états au niveau de Fermi correspond à la transition vers l'isolant, laissant un gap entre deux bandes dites de Hubbard centrées autour de $\omega = \pm U/2$ et de largeur d'ordre t . D'autres quantités sont aussi caractéristiques du caractère isolant ou métallique du système : on a mentionné le gap de charge Δ , mais aussi la résistivité ; on s'intéresse plutôt à son inverse, la conductivité à fréquence nulle, mais aussi à fréquence ω finie.

La réponse du système à un champ électrique $\vec{E} = E_x \vec{e}_x$ suivant x se traduit par une valeur non nulle (proportionnelle à E_x dans le cadre de la réponse linéaire) du courant $\langle j_x \rangle$ suivant cet axe. Classiquement, on définit la conductivité comme le rapport entre

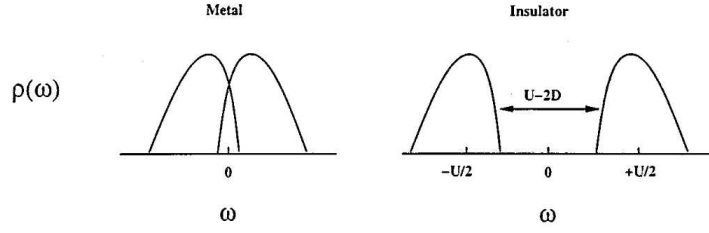


FIG. 5.1 – Allure de la densité d'états $\rho(\omega)$ de part et d'autre d'une transition métal-insolant dans le modèle de Hubbard : une bande à moitié remplie dans la phase métallique se sépare progressivement en deux bandes de Hubbard centrées en $\omega = \pm U/2$, et séparées dans l'isolant. Issu de [87].

le courant et le champ \vec{E} qui en est responsable, et donc s'il est orienté suivant x ,

$$j_x = \sigma_{xx} E_x \quad (5.1)$$

Dans le modèle (classique) de Drude traitant des métaux où les principaux effets responsables de la dissipation sont les collisions avec des défauts et interactions électron-phonon, traduites par une force de frottement $-m_e \vec{v}/\tau$, si le champ varie sinusoidalement : $E_x(t) = E_x^0 e^{i\omega t}$ la vitesse correspondante s'exprime en régime stationnaire $\vec{v} = -\frac{e\tau}{m_e(1+i\omega\tau)} \vec{E}$; le courant étant $\vec{j} = -n_p e \vec{v}$ (où n_p est la densité de porteurs), la conductivité (complexe, et dont la partie réelle σ_{xx}^R correspond à la dissipation) est finalement :

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{n_p e^2 \tau}{m_e (1 + i\omega\tau)} \quad (5.2)$$

Il est intéressant de noter que l'intégrale de σ_{xx} sur ω :

$$\int_0^\infty d\omega \sigma_{xx}^R(\omega) = \frac{n_p e^2 \pi}{2m_e} \quad (5.3)$$

est indépendante de τ donc des interactions électron-(défauts et phonons) et dépend essentiellement de la densité de porteurs et de la structure de bande du métal. Cette relation (ou règle de somme) se généralise à un modèle quantique [81] : sur un réseau de N sites, l'équivalent de n_p/m_e est $-\langle \Psi_0 | T_x | \Psi_0 \rangle / N$ (T_x étant l'énergie cinétique suivant x) et :

$$\int_0^\infty d\omega \sigma_{xx}^R(\omega) = -\frac{e^2 \pi}{2N} \langle \Psi_0 | T_x | \Psi_0 \rangle \quad (5.4)$$

Par cette règle de somme on peut aussi calculer le poids du pic de Drude, mesurant la partie à fréquence nulle de la conductivité (plus exactement de σ_{xx}^R). En effet si on fait

tendre $\tau \rightarrow \infty$ dans l'équation 5.2 la partie réelle de la conductivité devient un pic de Dirac centré en $\omega = 0$, de poids D proportionnel à la densité effective de porteurs, et caractérisant donc une phase conductrice. On appelle aussi D la rigidité de charge du système, qui peut s'évaluer comme dérivée seconde de l'énergie par rapport à un flux magnétique [82]. Quand on va vers l'état isolant, un transfert de poids spectral a lieu de ce pic vers des pics à des fréquences $\leq U$, et dans l'isolant $D = 0$ (dans la limite thermodynamique uniquement, qu'on extrapole plus facilement en 1D [83] qu'en 2D [84]).

Le poids (du pic) de Drude est donc une quantité pertinente pour décrire la transition métal-isolant dans les systèmes fortement corrélés, notamment par des méthodes numériques sur des systèmes finis. Pour le modèle de Hubbard plusieurs études [84, 85] ont bien mis en évidence l'état isolant à U/t fini (U positif) au demi-remplissage ; sous l'influence d'un dopage en électrons ou en trous, on trouve par contre une valeur finie de D ou de la densité de porteurs, ce qui peut se comprendre avec l'image des bandes de Hubbard centrées en $\pm U/2$ et dont au moins une est partiellement remplie.

Ordre des transitions et possibilité de coexistence de phase Les transitions métal-isolant dans des matériaux corrélés s'accompagnent souvent de phénomènes d'hystérésis, par exemple dans la résistivité $\rho(T)$ suivant qu'on augmente ou diminue T [86] ; ou à T fixé des hystérésis en fonction d'un paramètre gouvernant les interactions, comme la pression). Ceci indique que la transition est du premier ordre avec une coexistence des 2 phases dans la zone de transition. Dans la limite de température nulle, la transition de phase quantique, lorsqu'elle a lieu pour des interactions finies (pour des paramètres cinétiques t ($,t'$) donnés), peut être du premier ou du second ordre. Le scénario indiqué par des études de théorie de champ moyen dynamique (*DMFT*) [87] est celui d'une coexistence, entre deux valeurs d'interactions $U_{c1} < U_{c2}$, de solutions (de champ moyen) isolante et conductrice caractérisées par respectivement une densité d'états nulle ou finie au niveau de Fermi. Dans le cas d'une transition du second ordre, on s'attend à une discontinuité des observables associées à l'une ou l'autre des phases. Il est difficile de déterminer un paramètre d'ordre générique de la transition ; une discontinuité (et une hystérésis) de la double occupation d des sites est souvent un bon indice d'une région de coexistence et donc d'une transition du premier ordre, mais d n'est pas un bon paramètre d'ordre de la phase métallique, étant faible mais non nul dans l'isolant. Le poids de Drude D est nul dans l'isolant, et nécessairement fini dans la phase métallique ; une discontinuité de D (comme sur le réseau triangulaire 2D [88]) sera synonyme de transition du premier ordre, au contraire d'une transition du second ordre où D s'annule continûment à la transition (voir figure 5.2). Par contre il n'y a pas a priori de paramètre d'ordre générique d'une phase isolante, non nul dans l'isolant et nul dans une phase métallique. (On verra plus loin le cas d'un isolant est caractérisé par un ordre donné, avec un paramètre d'ordre associé qui s'annule à la transition.)

5.2 Transition métal-isolant sur un réseau frustré

5.2.1 Motivations expérimentales : un métal fortement corrélé sur réseau pyrochlore

Parmi les composés métalliques, certains se distinguent par des propriétés révélatrices de fortes corrélations. C'est le cas des composés dits à fermions lourds, parce que la masse effective des quasiparticules y est fortement réhaussée, du fait des corrélations, par rapport à celle prédite par leur structure de bande. Ce sont en général des composés où des ions de terres rares, donc des électrons f , se comportent comme des spins localisés, et couplés aux électrons de conduction par effet Kondo [89]. On y observe notamment un large coefficient γ défini par le comportement de la chaleur spécifique à basse températures $C_v \sim \gamma T$. La situation est plus étrange quand des composés sans électrons f , mais avec des bandes d corrélées, présentent un comportement de fermions lourds; c'est notamment le cas de LiV_2O_4 , avec des ions V formant une structure de type pyrochlore, et de valence moyenne $3d^{1.5}$. Il semble que parmi les électrons d , un par site en moyenne est localisé, laissant une densité moyenne d'électrons itinérants $n = 1/2$ (occupant deux orbitales d dégénérées) [90, 91, 92]. Ces électrons itinérants sont responsables de l'état métallique du composé, mais avec un comportement nettement différent d'un liquide de Fermi usuel. Il a été suggéré par différentes études théoriques et expérimentales [90, 91, 93] que, plutôt qu'un mécanisme de type Kondo, la frustration géométrique du réseau pyrochlore jouait un rôle déterminant. Un mécanisme possible prend en considération des interactions coulombiennes à courte portée [93], nécessaires pour envisager soit un état isolant, soit un état métallique fortement corrélé proche d'une transition métal-isolant, ce qui incite à étudier une telle transition sur un réseau à structure en tétraèdres connectés par leurs sommets. D'autre part la structure des états de basse énergie minimisant les répulsions coulombiennes pourrait s'accompagner d'excitations de charge fractionnaire $\pm e/2$, d'un intérêt théorique important puisque ce type d'excitations est plutôt réservé aux structures unidimensionnelles.

5.2.2 Etats métallique et isolant sur le réseau pyrochlore

Sur un réseau géométriquement frustré, un état métallique est prédit par la théorie des bandes (i.e. sans interaction) sauf à des remplissages bien particuliers, mais la structure de bande peut présenter des particularités, notamment des bandes non dispersives. Sur le réseau pyrochlore 2D, un calcul de structure de bande avec l'énergie cinétique H_t (dans le Hamiltonien 4.1) donne deux bandes distinctes (puisque'il y a deux sites par cellule élémentaire); en reprenant les notations du chapitre précédent, les énergies propres de vecteur d'onde (k_x, k_y) sont les valeurs propres de :

$$\begin{pmatrix} -2t \cos(k_x) & -t(1 + e^{ik_x} + e^{-ik_y} + e^{i(k_x - k_y)}) \\ -t(1 + e^{-ik_x} + e^{ik_y} + e^{i(k_y - k_x)}) & -2t \cos(k_y) \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

ce qui donne une bande plate (qui est une caractéristique du réseau damier et d'autres réseaux à frustration géométrique [52]) d'énergie $2t$ et une bande dispersive d'énergie

$-2t(1 + \cos(k_x) + \cos(k_y))$. Avec une densité de particules $n = 1/4$ la bande inférieure est à demi-remplie (fermions sans spin ou polarisés) ou au quart remplie (fermions avec spin). On a donc un état clairement métallique. Si $t < 0$, la bande partiellement remplie est la bande plate, où les corrélations fortes peuvent résulter en une transition métal-isolant pour des interactions V infinitésimales [94]. Pour $t > 0$ (cas qu'on considérera désormais) la situation est plus classique, la bande dispersive partiellement remplie assurant pour V/t suffisamment faible un liquide de Fermi métallique. Dans la limite opposée, de fortes interactions $|t| \ll V \ll U$, on a vu au chapitre 4 que pour $n = 1/4$ le système est dans une phase ordonnée, à singulets résonants, localisés sur des plaquettes, bien décrite par un modèle contraint de dimères à deux couleurs. Cette phase est clairement isolante, mais se distingue de l'isolant de Mott qu'on a vu sur le réseau carré à $n = 1$: dans la phase *RSPC* le terme de flip en $t_2 \sim t^2/V$ de ce modèle ne permet pas de courant de charge, mais localement les charges ne sont pas figées. Les résonances de singulets sont synonymes de fluctuations de charges au niveau de certaines des plaquettes. La densité moyenne n'est pas uniforme, au contraire du cas $n = 1/2$ où on a néanmoins une phase analogue [95], à singulets résonants, donc à charges fluctuantes. Ces fluctuations sont, plus que les modulations spatiales de charge (on en trouve aussi sur le réseau carré à $n = 1/2$ et $t \ll V \ll U$), une particularité de certains isolants sur des réseaux frustrés. Les sauts individuels de particule impliquent la création de défauts d'énergie $O(V)$, d'où un gap de charge proportionnel à V . Plus précisément, le gap de charge défini comme l'énergie nécessaire Δ pour déplacer un électron d'une distance arbitrairement grande dans l'isolant, vaut $\Delta = 2V$ puisque l'électron déplacé arrive à la jonction de deux tétraèdres déjà occupés.

Outre la comparaison des limites $V/t = 0$ et $V/t \rightarrow \infty$, un argument supplémentaire pour une transition métal-isolant est l'existence d'une transition superfluide-isolant dans un système bosonique analogue [96] : pour des bosons sur le réseau damier à $n = 1/4$, un ordre à plaquettes résonantes caractérise une phase isolante - cette phase brise la symétrie de rotation de $\pi/2$, c'est la phase mixte discutée au chapitre 3, le cas $|t| \ll V$ étant alors décrit par un modèle de dimères sur réseau carré - tandis que pour des interactions assez faibles la phase est superfluide. La densité superfluide s'annule continûment pour V/t fini ($V/t \sim 6.3(1)$), et d'autre part le gap de charge (énergie pour ajouter un boson au système quart-rempli), fini dans l'isolant, s'annule pour les mêmes paramètres. Ceci confirme que pour le cas fermionique, même si la géométrie du réseau damier permet pour de fortes interactions ($V \gg |t|$) une phase isolante particulière, où les particules sont non figées, une transition métal-isolant à V/t fini n'est pour autant pas moins attendue que dans des cas plus conventionnels.

Types de transition possibles de la phase *RSPC* à la phase métallique On a vu qu'il n'existait pas en général de paramètre d'ordre générique d'un isolant s'annulant à la transition vers le métal ; cependant dans le cas qu'on étudie la phase isolante a un ordre *RSPC* auquel on peut associer un paramètre d'ordre S (plusieurs choix sont possibles, notamment les facteurs de structure $S_{pl}(\pi, 0)$ ou $S_{pl}(\pi, \pi)$). Un tel paramètre

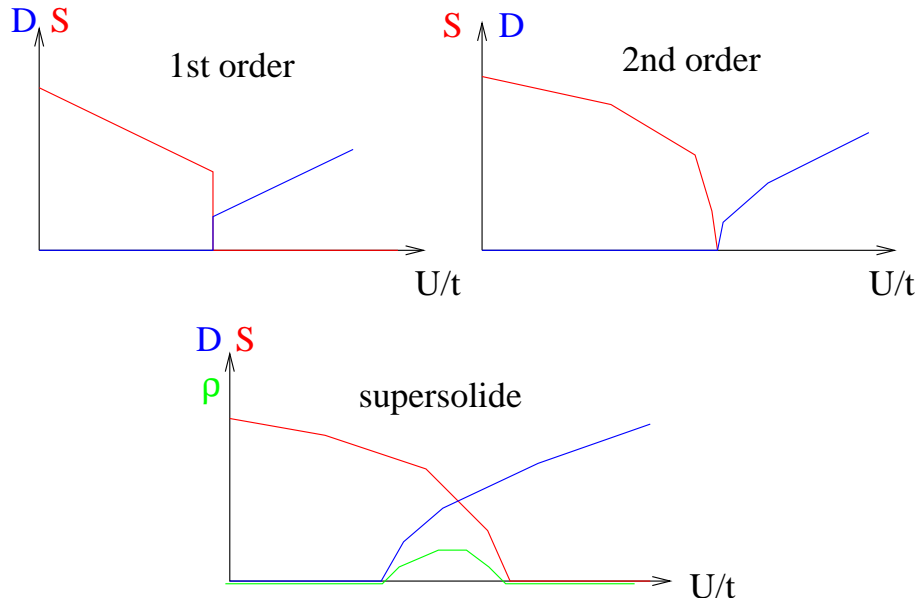


FIG. 5.2 – Différents types de dévolution au cours d’une transition métal isolant du poids de Drude D et, lorsque l’isolant est caractérisé par un paramètre d’ordre S (comme pour la phase $RSPC$) de celui-ci. S comme D peuvent avoir (premier ordre, à gauche) ou non (second ordre, à droite) une discontinuité à la transition. Un troisième scénario (en bas) implique une phase supersolide avec une densité superfluide $\rho \neq 0$.

d’ordre s’annule a priori à la transition vers l’état métallique ; si cette dernière est du premier ordre on a une discontinuité simultanée de S et du poids de Drude D en fonction de t/V ; pour une transition du second ordre les deux fonctions s’annulent de part et d’autre du point de transition mais sans discontinuité de l’une ni de l’autre. On peut mentionner ici un troisième scénario : la coexistence de valeurs non nulles de D et de S dans une gamme finie de paramètres d’interaction (voir figure 5.2). Si celle-ci n’est pas signe d’une coexistence de phases spatialement séparées - ou au niveau numérique d’une coexistence de deux solutions de champ moyen - on a un état de nature différente de ceux à larges ou faibles interaction. Ce peut a priori être un état métallique partiellement ordonné (comme dans un modèle de Hubbard étendu sur le réseau carré à $n = 1/2$ [97] ou sur le réseau triangulaire pour des fermions sans spin [98]) mais on peut aussi envisager un autre type d’état, par analogie à un supersolide bosonique généralement trouvé au voisinage d’un isolant, avec le même type d’ordre, mais avec une densité superfluide finie ; ici si l’appariement des électrons en paires de Cooper est favorisé, une densité superfluide finie (ou un paramètre d’ordre supraconducteur fini) peut coexister avec un ordre de charge et/ou de spin à longue distance, ce qui caractériserait une phase supersolide, et est à considérer dans le cas d’interactions attractives (dans des systèmes fermioniques d’atomes froids par exemple) ou si les électrons sont appariés en singulets dans l’isolant.

5.2.3 Défauts de charge dans l'isolant

On peut étudier cette transition en tenant compte des spécificités de l'état isolant, notamment des contraintes locales (de dimères). La dégénérescence macroscopique des configurations contraintes de basse énergie, même levée pour $t \neq 0$ dans l'état *RSPC* 4 fois dégénéré, s'accompagne de propriétés particulières de l'isolant. Ici, l'excitation de charge élémentaire n'est pas celle consistant à déplacer une charge à l'infini (définissant le gap de charge - celui-ci vaut $\Delta = 2V$ dans la limite $t/V = 0$ puisque la particule déplacée arrive sur un site joignant deux tétraèdres déjà occupés), mais une excitation d'énergie $\leq V$ créant des défauts de charges fractionnaires [99], correspondant au saut d'une seule particule, à partir d'une configuration contrainte. Ce saut brise la contrainte de mono-occupation de deux tétraèdres (seconds voisins), à un coût énergétique V puisqu'un de ces tétraèdres devient doublement occupé (voir figure 5.3-i). Ce tétraèdre possède alors un défaut de charge négative, et le tétraèdre laissé vide par la particule déplacée porte une charge positive opposée. Pour déterminer la charge effective de ces défauts, on peut considérer l'excitation de charge $-e$ consistant à ajouter au système (initialement sans défaut) une particule en un endroit donné. Cette particule crée nécessairement deux défauts de charge, sur les deux tétraèdres s'y joignant (voir figure 5.3-ii). La charge effective sur chaque tétraèdre est donc $-e/2$. Similairement, l'arrachage d'un électron au système crée deux tétraèdres non occupés, donc deux défauts de charge $+e/2$. Ces défauts sont stabilisés par leur mobilité, i.e. par le gain d'énergie cinétique d'ordre t : les particules sur les tétraèdres à défauts peuvent sauter aux sites voisins par les termes de H_t , sans créer de défaut supplémentaire. Cette énergie cinétique abaisse le gap de charge (en unités de V) quand t augmente, et la transition métal-isolant est assimilable, du point de vue de l'isolant, à une prolifération de défauts.

5.2.4 Définition d'un modèle effectif pour une transition métal-isolant

Pour traiter par diagonalisation exacte des systèmes de taille suffisamment grande pour bien tenir compte de la mobilité des défauts, on considère un espace de Hilbert restreint de configurations possédant un nombre limité de défauts. Le terme cinétique H_t agit sur ces défauts, et H_V compte simplement le nombre de défauts de charge $-e/2$; pour retrouver la structure de l'isolant de Mott, on inclut aussi le terme H_2 de flips sur les plaquettes non croisées. Indépendamment du nombre N_e de particules dans le système, on appelle P_k est le projecteur sur les configurations avec un nombre maximal k de fluctuations de charge - chaque fluctuation créant 2 défauts supplémentaires par rapport au nombre minimal de défauts $2|N/4 - N_e|$. On peut donc définir, pour k donné un Hamiltonien effectif :

$$H^{(k)} = P_k H_t P_k + H_V + H_2 \quad (5.6)$$

On utilisera aussi occasionnellement le Hamiltonien de Hubbard étendu tronqué dans la base des configurations à k fluctuations de charge au maximum, qui peut s'écrire (on est toujours dans la limite $U \gg V, t$) :

$$H'^{(k)} = P_k H_t P_k + H_V \quad (5.7)$$

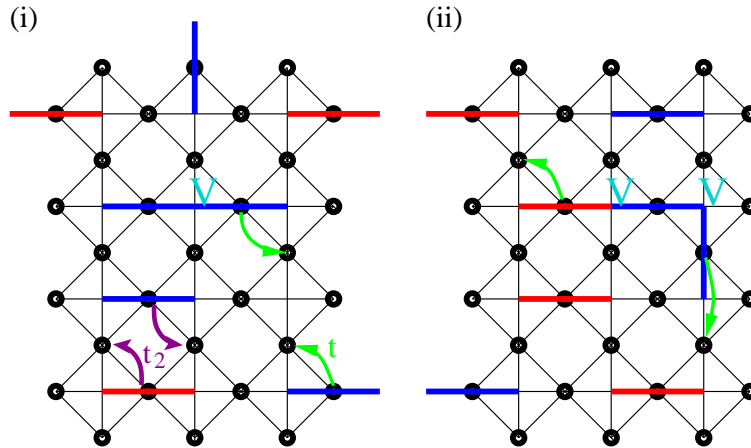


FIG. 5.3 – (i) : A partir d’une configuration sans défaut, un saut d’une particule (un terme de H_t) crée deux défauts de charges fractionnaires $+e/2$ et $-e/2$, le deuxième étant d’énergie V . Ces défauts sont mobiles avec des sauts H_t , sans créer de défaut supplémentaire. (ii) : Si on ajoute au système une particule, deux tétraèdres sont doublement occupés et constituent des défauts de charge $-e/2$, mobiles par les termes en t également.

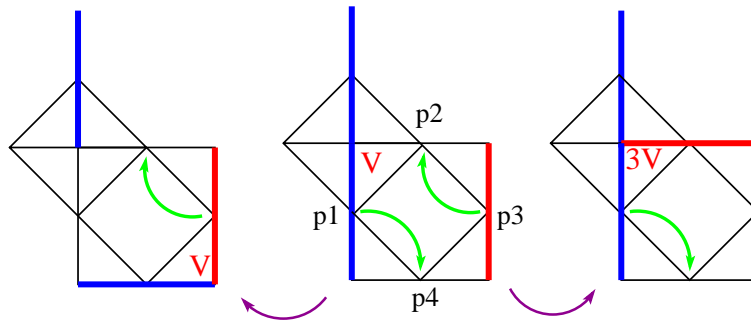


FIG. 5.4 – Lorsqu’une plaquette flippable jouxte un défaut de charge (configuration au centre) un des flips (dans le sens indiqué par les flèches vertes) voit son amplitude dans H_2 modifiée : le processus élémentaire passant par l’intermédiaire représenté à gauche est inclus dans PH_tP donc ne contribue pas à H_2 ; le processus à droite y contribue avec une amplitude réduite $t^2/(2V)$.

Pour calculer le gap de charge, on considèrera un système de deux clusters périodiques de N sites, découplés l'un de l'autre (comme à l'infini l'un de l'autre dans un système macroscopique). On compare l'énergie du système sans défaut, donc avec $N/4$ particules par cluster, à l'énergie du même système mais avec une particule passée d'un cluster à l'autre. Si $E_0(N_e)$ est l'énergie du fondamental de $H^{(0)}$ sur un cluster avec N_e électrons, on calculera le gap de charge comme :

$$\Delta E_g = E_0(N/4 + 1) + E_0(N/4 - 1) - 2E_0(N/4) \quad (5.8)$$

Ceci implique que sur chaque cluster intervenant dans le calcul on fait l'approximation de limiter au minimum le nombre de défauts sur les différents clusters (2 si $N_e = N/4 \pm 1$, aucun pour $N_e = N/4$). Pour calculer d'autres quantités (conductivité optique, facteur de structure associé à l'ordre *RSPC*, etc) on traitera un seul cluster de N sites, au remplissage $N_e = N/4$, et en autorisant la présence au maximum une fluctuation de charge, donc avec le Hamiltonien effectif $H^{(1)}$. Le terme $P_1 H_t P_1$ a deux rôles : la création/recombinaison d'une paire de défauts, et la mobilité de chacun d'entre eux.

En toute rigueur, H_2 est modifié par rapport au terme de flip défini au chapitre 4 : en effet, lorsqu'une plaquette flippable est jouxtée par un défaut de charge $-e/2$ (voir la figure 5.3), l'amplitude des différents processus résultant en un flip n'est pas la même que sans défaut. Dans l'exemple de 5.4, le processus où la particule initialement en p_1 quitte le tétraèdre à défaut et va en p_4 (puis l'autre particule va de p_3 en p_2) n'est pas à prendre en compte dans H_2 : il est pris en compte dans H_t (plus exactement $P_1 H_t P_1$) puisqu'on passe par un intermédiaire sans défaut supplémentaire par rapport aux états initial et final. Le même processus dans l'autre ordre ($p_3 \rightarrow p_2$ puis $p_1 \rightarrow p_4$) implique un intermédiaire à 3 particules sur le même tétraèdre, donc un coût $2V$. L'amplitude dans H_2 du flip résultant de ces deux processus est finalement $t^2/(2V)$ au lieu de $2t^2/V$. Les processus faisant bouger les particules dans l'autre sens ($p_1 \rightarrow p_2$ et $p_3 \rightarrow p_4$, dans un ordre comme dans l'autre) sont d'amplitude identique au cas sans défaut. En termes d'états singulet/triplets sur la plaquette flippable, le flip a une amplitude totale de $5t^2/(4V)$ pour le singulet et $3t^2/(4V)$ pour les triplets - au passage, cette *redistribution* de la dynamique de flip des singulets vers les triplets déstabilise l'ordre en singulets résonants, d'autant plus que t/V est grand.

5.3 Méthodes numériques pour l'étude de la transition métal-isolant

L'avantage du Hamiltonien effectif 5.6 par rapport au modèle original de Hubbard étendu (Hamiltonien 4.1) pour l'étude de la transition métal-isolant est qu'on peut accéder numériquement à des plus grandes tailles de cluster N , avec à taille fixée un espace de Hilbert réduit par la limitation du nombre de défauts. En effet, le modèle 4.1 est traitable pour des clusters périodiques jusqu'à $N = 32$ sites (à $n = 1/4$ et/ou dans la limite de coeur dur $|t|, V \ll U$), mais on a vu au chapitre 4 que pour $N = 32$ les effets

de taille finie sont très importants, notamment dans la phase isolante *RSPC*. On gagne donc à considérer des clusters plus grands ; cependant, même avec un nombre de défauts très limité les tailles d'espace de Hilbert sont très fortement augmentées par rapport au cas sans défaut. Par exemple, les calculs de gap de charge à partir du cluster $N = 64$ nécessitent de traiter le système avec $N_e = 17$ particules, où l'espace de Hilbert, même avec le nombre minimal (2) de défauts et en utilisant les symétries spatiales, comporte $N_H^R \sim 530.10^6$ états (configurations *de spin*). On doit alors particulièrement optimiser les méthodes numériques pour la diagonalisation exacte de ce modèle.

Détermination optimisée des états de base et des éléments de matrice de H

Au vu de la taille de l'espace de Hilbert contraint, même la détermination numérique des éléments de la base requiert une attention particulière. On procède en déterminant d'abord les positions possibles des défauts ; puis, cette position étant fixée, l'ensemble des configurations de charge compatibles ; et enfin pour chaque configuration de charge l'ensemble des configurations de spin. Comme on utilise au final une base réduite par les symétries, la détermination de la base non réduite serait une perte de temps (et de mémoire) considérable : on gagne à déterminer d'abord des configurations de défauts représentatives (i.e. auxquelles les autres sont reliées par symétrie) : pour $N = 64$ et $N_e = 17$, la durée des étapes ultérieures est ainsi réduite d'un facteur ~ 85 .

La détermination et le stockage des éléments de matrice de H_t et H_2 est aussi un point crucial. Remarquons d'abord que pour une configuration donnée avec 2 défauts de charge $-e/2$, le nombre de sauts d'électrons conservant le nombre de défauts (donc d'électrons initialement sur ces défauts) peut atteindre $5.4 = 20$. En ajoutant le nombre de flips (de H_2) possibles, qui peut aller jusqu'à $N/4 = 16$, une première méthode consistant en stocker au préalable (avant l'algorithme itératif de Lanczos) des éléments de H requerrait de l'ordre d'une centaine de Gigaoctets, donc les écrire sur le disque, puis les lire à chaque étape de l'itération, et le temps de lecture ralentirait fortement le calcul. Alternativement, une seconde méthode serait de redéterminer à chaque itération les différentes images d'une configuration, mais ce serait également très lent. Une troisième méthode, plus rapide et employée ici, consiste à stocker le Hamiltonien *bosonique*, i.e. pour chaque configuration de charge ses images par H_t et H_2 , sans tenir compte du spin. Ceci ne pose aucun problème d'espace disque ; à chaque étape de l'itération on doit seulement déterminer les images des N_H^R configurations (donc tenant compte du spin), mais connaissant les images des configurations de charge ceci est beaucoup plus rapide que la seconde méthode (d'autant plus qu'on n'a à chercher le représentant d'une image *de spin* que lorsque l'image de charge possède une invariance par symétrie, ce qui est rare). Cette méthode n'est pas propre au modèle contraint mais peut s'appliquer à tout modèle de fermions itinérants (i.e. avec des degrés de liberté de charge et de spin) et peut selon les cas se révéler ou non plus efficace que les deux premières. Ici, son emploi permet de déterminer le fondamental d'une représentation donnée en $\sim 50hCPU$ pour la taille N_H^R mentionnée ci-dessus.

Un troisième point sur lequel on peut jouer tient à la réduction de la mémoire vive utilisée : a priori celle-ci est en grande partie constituée par la taille des vecteurs $|\Phi_i\rangle$ (voir 4.3.3) utilisés pendant l'itération. A priori, on a besoin lors d'une itération i de $|\Phi_{i-1}\rangle$ et $|\Phi_i\rangle$ pour déterminer $|\Phi_{i+1}\rangle$, donc de 3 vecteurs au total en terme de mémoire. Lorsque la mémoire vive résultante dépasse (de peu) la limite imposée par les machines de calculs utilisées, on peut n'utiliser que 2 vecteurs en mémoire vive, et à chaque étape stocker $|\Phi_i\rangle$ après détermination de $|\Phi_{i+1}\rangle$, pour le relire et réutiliser à l'étape suivante. Bien sûr les étapes d'écriture et lecture des vecteurs ralentissent le calcul, il faut alors voir si on est plus limité en temps de calcul ou en mémoire vive. Ce problème technique est similaire à celui d'obtenir le fondamental $|\Psi_0\rangle$ dans la base des configurations après convergence de l'algorithme de Lanczos (soit en réitérant l'algorithme soit en stockant les vecteurs $|\Phi_i\rangle$ intermédiaires - voir paragraphe 4.3.3).

Calcul de fonctions de réponses par un algorithme de Lanczos L'algorithme de Lanczos, vu au paragraphe 4.3.3 du chapitre précédent, permet de déterminer non seulement le fondamental et le spectre de basse énergie, mais aussi des fonctions de corrélations dynamiques comme la fonction spectrale $A(\vec{k}, \omega)$ - et aussi, dans la théorie de la réponse linéaire, des fonctions de réponse comme la conductivité optique $\sigma_{xx}(\omega)$. Pour calculer une telle quantité, définie en fonction de la résolvante $(z - H)^{-1}$ (comme $\sigma_{xx}(\omega)$ définie plus loin par l'équation 5.12), on procède de la manière suivante [100] :
 -on détermine d'abord le fondamental $|\Psi_0\rangle$ par une première itération de l'algorithme et on l'exprime dans la base des configurations ;
 -on applique un opérateur $A^+(c_k^{(+)}, j_x, ..)$ à $|\Psi_0\rangle$, donnant un nouvel état $|\Phi_0\rangle$ après normalisation $|\Phi_0\rangle = A^+|\Psi_0\rangle / \sqrt{\langle \Psi_0 | A A^+ | \Psi_0 \rangle}$;
 -on réitère l'algorithme de Lanczos, en partant cette fois de $|\Phi_0\rangle$. Au cours de cette seconde itération on stocke les coefficients α_k et β_k définissant la (nouvelle) base de Ritz, dans laquelle à l'itération it la quantité $C(z) = \langle \Phi_0 | (z - H)^{-1} | \Phi_0 \rangle$ s'exprime, de manière approchée du fait de la troncation de la base :

$$C_{it}(z) = \frac{1}{z - \alpha_0 - \frac{\beta_1^2}{z - \alpha_1 - \frac{\beta_2^2}{\dots}}} \quad (5.9)$$

Pour un nombre it d'itérations suffisant (généralement supérieur à celui nécessaire à la détermination de $|\Psi_0\rangle$ mais du même ordre), la quantité $C_{it}(z)$ ne varie plus avec it et a convergé vers la fonction $C(z)$ - ce sauf aux pôles $\omega = E_n - E_0$ sur l'axe réel, d'où la nécessité de calculer $C(\omega - E_0 + i\eta)$ avec $\eta \neq 0$ (mais nettement inférieur aux échelles d'énergie du système). L'avantage pratique de cette méthode est que l'algorithme lui-même est indépendant de ω , donc une seule (double) itération de l'algorithme donne $C(\omega - E_0 + i\eta)$ à toutes fréquences $\omega > 0$ dans le spectre de basse énergie.

Application : conductivité optique et poids de Drude Pour définir rigoureusement puis calculer la conductivité optique $\sigma_{xx}(\omega)$, suivant une direction x du réseau considérons d'abord l'opérateur courant suivant x : il est défini comme le commutateur de l'opérateur \mathbf{X} avec le Hamiltonien :

$$j_x = ie[X, H] \quad (5.10)$$

(de même pour les courants suivant d'autres directions ; et le vecteur courant est $\vec{j} = i[H, \vec{R}]$). Dans un modèle sur réseau où les seuls termes de mouvement de charge sont des sauts aux premiers voisins (terme en t dans le modèle de Hubbard), j_x s'exprime en fonction de ces termes :

$$j_x = -iet \sum_{r,\sigma} (c_{r+\vec{e}_x,\sigma}^\dagger c_{r,\sigma} - c_{r,\sigma}^\dagger c_{r+\vec{e}_x,\sigma}) \quad (5.11)$$

(dans un modèle avec sauts à distance variable, les termes en t', t'' , etc.. entrent dans j_x avec des préfacteurs distincts). On définit alors la conductivité optique complexe comme :

$$\sigma_{xx}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{i\pi}{N\omega} \langle \Psi_0 | j_x^\dagger \frac{1}{\omega + i\eta + E_0 - H} j_x | \Psi_0 \rangle \quad (5.12)$$

Le paramètre η permet d'éviter les divergences aux pôles du dénominateur $\omega_n = E_n - E_0$: bien qu'étant fixé de manière arbitraire on peut l'interpréter comme tenant compte d'effets élargissant les pics des courbes expérimentales de conductivité. En développant la partie réelle de l'équation 5.12 suivant la base des états propres de H (états $|n\rangle$ d'énergie E_n - on notera $|0\rangle = \Psi_0$), on obtient :

$$\sigma_{xx}^R(\omega) = D\delta(\omega) + \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_n |\langle 0 | j_x^\dagger | n \rangle|^2 \frac{\pi\eta}{N\omega((\omega + E_0 - E_n)^2 + \eta^2)} \quad (5.13)$$

$$\sigma_{xx}^R(\omega) = D\delta(\omega) + \frac{\pi}{N} \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle 0 | j_x^\dagger | n \rangle|^2}{E_n - E_0} \delta(\omega + E_0 - E_n) \quad (5.14)$$

qui définit le poids D du pic de Drude. Ce terme est particulier : la conductivité à $\omega = 0$ est nécessairement finie, du moins dans l'état métallique où elle traduit la dissipation ohmique ; mais le terme à $\omega = 0$ dans l'équation 5.12 est problématique puisque $\langle 0 | j_x | 0 \rangle$ est nul par symétrie suivant $x \rightarrow -x$ du fondamental mais est multiplié par $1/\eta \rightarrow \infty$. C'est donc l'égalité 5.4 qui donne D , en utilisant l'équation 5.14 :

$$D + \frac{\pi}{N} \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle 0 | j_x^\dagger | n \rangle|^2}{E_n - E_0} = -\frac{\pi e^2}{2N} \langle 0 | T_x | 0 \rangle \quad (5.15)$$

Notons que la partie réelle (à fréquence finie) de $\sigma_{xx}(\omega)$ est, d'après le théorème de fluctuation-dissipation, proportionnelle à la partie réelle de la transformée de Fourier $-i\xi(\omega)$ de la fonction de corrélation courant-courant $\langle j_x(t)j_x(0) \rangle$:

$$\sigma_{xx}^R(\omega) = \frac{\Im(\xi(\omega))}{N\omega} = \frac{1}{N\omega} \Re \left(\int dt e^{i\omega t} \langle j_x(t)j_x(0) \rangle \right) \quad (5.16)$$

La fonction $\xi(\omega)$ vérifie les relations de Kramers-Krönig et en particulier :

$$\int_{\omega>0} d\omega \sigma_{xx}^R(\omega) = \frac{1}{N} \int_{\omega} \frac{\xi^I(\omega)}{\omega} = \frac{\pi}{2} \xi^R(0) \quad (5.17)$$

Cette relation permet d'obtenir le poids du pic de Drude en calculant $\xi^R(\omega = 0)$, alternativement à l'utilisation de l'expression 5.15.

En ce qui concerne la conductivité optique, on obtient donc d'abord la fonction de réponse $\xi(\omega)$, puis $\sigma_{xx}^R(\omega)$ après division par ω . Les pics aux pôles $E_n - E_0$ sont ainsi élargis en gaussiennes de largeur à mi-hauteur $\sim \eta$ et d'amplitude proportionnelle au poids spectral en ces pôles. Ceci permet d'évaluer les poids respectifs des différents pôles - et accessoirement les énergies d'excitation du système. Comme l'opérateur j_x n'a pas la symétrie du Hamiltonien (le vecteur $(j_x, 0)$ est invariant par la réflexion R_x par l'axe x mais pas R_y , ni par les rotations $R_{\pm\pi/2}$) on n'utilise dans l'algorithme de Lanczos que R_x et les translations (et l'inversion de spin), ce qui fait que la taille de l'espace de Hilbert N_H^R est environ 4 fois plus importante que pour la détermination du spectre et du fondamental (sur le réseau damier à $N = 64$ sites, en autorisant une fluctuation de charge ceci donne $N_H^R \sim 5.10^8$ états, ce qui nécessite plus d'une centaine d'heures *CPU* avant la convergence).

5.4 Eléments de caractérisation de la transition métal-isolant sur réseau damier

Ayant fixé le modèle 5.6 et la méthode de calcul de diverses quantités relatives à l'ordre cristallin de l'isolant, aux défauts de charge lorsqu'on se rapproche de la transition métal-isolant et à cette transition, on va examiner le comportement de ces différentes quantités avec t/V .

5.4.1 Gap de charge et poids de Drude

Estimation du gap de charge

On va commencer par examiner le gap de charge, défini par l'expression 5.8, calculé sur les clusters $N = 32$ et $N = 64$. Sans calcul, on sait qu'il vaut $2V$ dans la limite statique $t/V = 0$: physiquement, si on déplace une particule d'un endroit du système à un autre endroit infiniment loin, à l'endroit d'arrivée 2 tétraèdres deviennent doublement occupés avec une énergie potentielle V pour chacun. Pour t/V croissant, le gap de charge est abaissé par l'énergie cinétique associée au mouvement des défauts (terme H_t), jusqu'à s'annuler pour $(t/V)_c \sim 0.15(1)$ (voir figure 5.5 à gauche). Les gaps correspondant aux deux tailles sont très proches pour $t/V < (t/V)_c$ (qu'on qualifie de régime isolant), donc les valeurs de $(t/V)_c(N)$ correspondant à $\Delta E_g = 0$ également - décroissant légèrement avec N donc on attendrait plutôt $(t/V)_c \sim 0.13(2)$ dans la limite thermodynamique. Pour $t/V > (t/V)_c$ (régime métallique), les valeurs de ΔE_g calculées dépendent plus fortement de la taille, sont clairement négatives et décroissantes avec t/V croissant :

cette valeur négative de ΔE_g (alors qu'on l'attend nul) est due à l'utilisation du Hamiltonien $H^{(0)}$, qui limite le nombre de défauts mais aussi l'ordre maximal (2) des termes en perturbation en t/V . Le terme suivant H_3 en perturbation, en t^3/V^2 , est un terme flip-pant 3 particules sur des rectangles 2×1 de deux plaquettes vides voisines - c'est le terme dominant pour des fermions sans spin à $n = 1/4$ ou $n = 1/2$ [74]. L'énergie cinétique des mouvements de charge associées à H_3 est plus importante dans le cas sans défaut qu'avec défauts, et la différence augmente avec t/V . Il est donc naturel que la non-prise en compte de ce terme (et des suivants en perturbation) conduise à sous-évaluer ΔE_g : si on inclut H_3 , le gap de charge dans le régime métallique est réhaussé vers 0, d'autant plus que t/V est grand (voir figure 5.5 pour la taille $N = 32$). On peut en conclure que le modèle effectif est assez fiable pour t/V faible et jusqu'à $(t/V)_c$ environ ; ensuite, son utilisation perd de son sens, puisque les défauts prolifèrent et un modèle effectif agissant dans les configurations de basse énergie n'est plus adapté.

Notons ici une remarque sur ce calcul : si le fondamental dans le chapitre précédent était toujours dans une représentation $[A1, (0, 0)]$ (car sans noeud), ce n'est plus le cas ici pour les systèmes à $N_e = N/4 \pm 1$ particules considérés pour le calcul de ΔE_g . Pour le cluster $N = 32$, la symétrie du fondamental varie suivant t/V : pour $N_e = 7$ il est dans une représentation de vecteur d'onde $(\pi/2, 0)$ pour $t/V \leq 0.05$, $(\pi/2, \pi/2)$ pour $t/V \geq 0.125$ et $(\pi/2, \pi)$ dans une gamme intermédiaire. On a un cas similaire pour $N = 64$ avec 15 particules ($(\pi/2, 0)$ pour $t/V \leq 0.05$ et $(\pi/2, \pi/2)$ sinon). Si on ajoute une particule au système ($N_e = N/4 + 1$) le fondamental est, d'après les résultats du cluster $N = 32$, dans une représentation $[A', (\pi/2, 0)]$ pour $t/V \leq 0.1$, et $[A1, (\pi, \pi)]$ pour $t/V \geq 0.125$. (ces croisements de niveaux interviennent pour t/V proche de la valeur d'annulation du gap de charge ; si les deux phénomènes peuvent être liées, il est difficile d'interpréter les croisements de niveaux comme signes de la transition métal-isolant). Pour le cluster $N = 64$ à 17 particules, les représentations de basse symétrie, par exemple $[A', (\pi/2, 0)]$, ne sont pas accessibles ou très difficilement par diagonalisation exacte (avec $N_H^R \geq 2.10^9$), mais les données du cluster $N = 32$ indiquent que dans la région où ΔE_g s'annule (et pour t/V plus grand), le fondamental est dans une représentation de haute symétrie, donc accessible ; pour t/V faible, on n'a a priori qu'une borne supérieure de E_0 mais la différence avec l'énergie du vrai fondamental est petite devant t donc négligeable devant V , qui fixe l'ordre de grandeur de ΔE_g dans cette limite.

Poids de Drude

A l'inverse du gap de charge, le poids D du pic de Drude est nul dans une phase isolante et non nul dans une phase métallique, et on a vu comment le déterminer par la formule 5.15. Dans le cas présent, on considère le courant j_x suivant l'axe x (axe horizontal du réseau carré de dimères). On utilise ici (et dans la suite sauf mention contraire) le Hamiltonien $H^{(1)}$ à $N_e = N/4$ particules, l'autorisation d'au moins une fluctuation de charge étant indispensable pour avoir un courant non nul. Après détermination du fondamental $|\Psi_0\rangle$ d'une part, et des énergies d'excitation $E_n - E_0$ d'autre part, on peut

5.4. ELÉMENTS DE CARACTÉRISATION DE LA TRANSITION MÉTAL-ISOLANT SUR RÉSEAU DAMIER

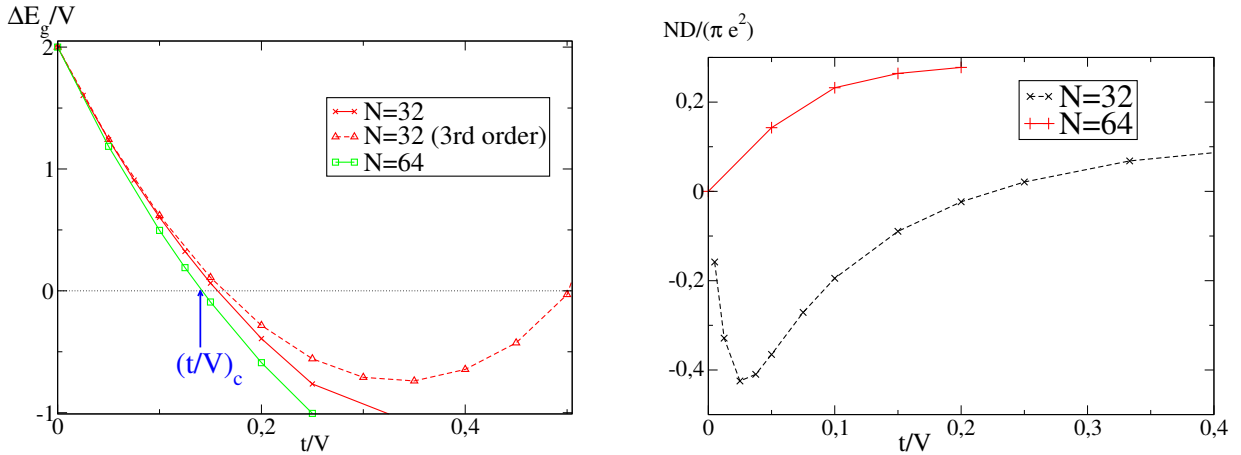


FIG. 5.5 – A gauche : Gap de charge ΔE_g calculé dans le modèle effectif, en fonction de t/V pour les clusters $N = 32$ et $N = 64$. Le point $(t/V)_c \sim 0.15(1)$ où ΔE_g s’annule permet de localiser la transition métal-insolant. Pour comparaison, sur $N = 32$ le gap est aussi calculé en incluant un terme supplémentaire en perturbation en t/V (courbe labellée *3rd order*). A droite : Poids de Drude D (multiplié par $N/\pi e^2$ et en unités de t) pour t/V sur les clusters $N = 32$ et $N = 64$.

estimer les deux quantités à gauche et à droite de l’égalité 5.15. Notons que l’on peut également, au lieu de calculer la somme sur les états excités, utiliser les relations de Kramers-Krönig et calculer la partie imaginaire σ_{xx}^I de la conductivité en $\omega = 0$; les deux méthodes sont en accord (et plus précises qu’une intégration numérique de la fonction $\sigma_{xx}^R(\omega)$). Le poids de Drude ainsi calculé est nul dans la limite statique (où les configurations avec défauts ont des amplitudes nulles dans $|\Psi_0\rangle$). Pour $t \ll V$, et même $t \leq V/2$, les résultats sur le cluster $N = 32$ donnent $D < 0$ - (voir figure 5.5 à droite - au minimum de la courbe pour $t/V \sim 0.05$, $\frac{ND}{\pi e^2} \sim -0.4t$). Ceci est un effet de taille fini, déjà rencontré dans le modèle de Hubbard au demi-remplissage dans la limite $U \gg t$, en 1D [101] et en 2D sur le réseau carré [84]. On note néanmoins que D calculé pour $N = 64$ sites est, dans le même régime, positif, et bien plus faible en valeur absolue que pour $N = 32$. Ces résultats sont cohérents avec un régime isolant où $D = 0$ dans la limite thermodynamique, mais d’un intérêt limité. On voit néanmoins que D ou ND augmente avec t/V - seulement si $t/V \geq 0.05$ pour $N = 32$ - et il semble plausible qu’il soit positif dans la limite thermodynamique pour $t/V > (t/V)_c$.

Une autre comparaison intéressante consiste à calculer D avec le Hamiltonien $H^{(1)}$ (donc sans le terme H_2). On trouve alors (voir la figure 5.6-haut), comme précédemment, que D est proportionnel à t/V dans la limite isolante, et de faible amplitude (positif cette fois); un saut de D intervient à $(t/V)_d \sim 0.11(1)$, signe d’un croisement de niveau entre le fondamental isolant (essentiellement constitué des configurations sans défaut) et un

état à une paire de défauts qui, stabilisé par leur énergie cinétique, devient le fondamental pour $t/V \geq (t/V)_d$. Ce croisement semblerait indiquer une transition du premier ordre vers un état métallique (mais on doit prendre ce résultat avec une grande précaution vu la limitation très restrictive du nombre de défauts). Il intervient proche de l'annulation de ΔE_g et on peut penser que les deux valeurs $(t/V)_c$ et $(t/V)_d$ se rejoignent quand $N \rightarrow \infty$. En autorisant de plus de défauts, voire en utilisant le Hamiltonien 4.1 on pourrait s'attendre en variant t/V à une série de croisements similaires, vers des états avec de plus en plus de porteurs de charge ; mais ces discontinuités ne subsistent pas nécessairement dans un modèle plus réaliste et en augmentant la taille du système. La caractérisation par le poids de Drude d'un régime métallique est difficile car biaisée dans un modèle effectif n'autorisant qu'une fluctuation de charge, et non une densité finie de porteurs qui entraînerait $ND = O(N)$ dans le régime métallique. Il serait d'autre part impossible pour des raisons numériques (taille d'espace de Hilbert) d'autoriser plus d'une fluctuation de charge sur le cluster $N = 64$, pour étudier la dépendance en N d'un poids de Drude calculé de manière plus réaliste. Un modèle effectif de type $H^{(1)}$ (ou $H'^{(1)}$), s'il permet d'estimer assez fidèlement le gap de charge dans le régime isolant et jusqu'à la transition vers le métal, est par contre sans grand intérêt pour l'estimation du poids de Drude dans le régime métallique (pour lequel ce modèle est mal adapté).

5.4.2 Disparition (partielle ?) de l'ordre de charge

En parallèle avec les quantités ΔE_g et D qui sont adaptées (a priori) pour caractériser un état métallique ou isolant, il est intéressant d'analyser des observables relatives à l'ordre cristallin de l'isolant. Comme on l'a vu au chapitre précédent, cet ordre en plaquettes résonantes (*RSPC*) se traduit par des valeurs non nulles et significatives de certains facteurs de structure, en particulier celui S_{pl} de l'opérateur de flip P_{\square} en $q = (\pi, 0)$ (également en (π, π)), et d'autre part le facteur de structure S_+ en (π, π) (bien que, on l'a vu, moins informatif). Dans le cas présent à t/V fini, on peut également calculer dans le modèle de Hamiltonien 5.6 ces quantités caractéristiques de l'ordre *RSPC* (et nulles ou quasi-nulles dans un état métallique). Elles sont montrées sur la figure 5.6-bas, pour le cluster $N = 32$ sauf mention contraire. On voit que les deux facteurs de structure $S_{\text{pl}}(\pi, 0)$ et $S_+(\pi, \pi)$ dans le régime isolant diminuent avec t/V croissant, mais se stabilisent à une valeur finie pour $t/V \geq 0.2$, contrairement à ce qui se passe dans le modèle original de Hamiltonien 4.1 ([94]). On voit encore une fois un artefact du modèle effectif employé : le nombre de fluctuations de charge étant limité à 1 (i.e. 2 défauts de charge $\pm e/2$), la dynamique reste essentiellement gouvernée par le terme H_2 , dont l'amplitude t_2 est dans ce régime comparable à t , mais qui au contraire de H_t agit sur un nombre extensif de plaquettes. Il subsiste donc pour t/V grand un ordre *RSPC* partiel, induit par le terme cinétique H_2 . Cet ordre n'empêche par l'existence de défauts de charge : si on calcule la valeurs moyenne $\langle n_{\square} \rangle$ du nombre de défauts dans le fondamental, elle a également une valeur finie (< 1 par construction, et effectivement ≤ 0.5 , quasiment insensible à la taille N) pour t/V grand. La valeur finie de $S_{\text{pl}}(\pi, 0)$ pour $t/V > (t/V)_c$ est compatible avec un état métallique et partiellement ordonné : un mouvement de charge est possible et permet la conduction, mais se ferait dans un environnement possédant

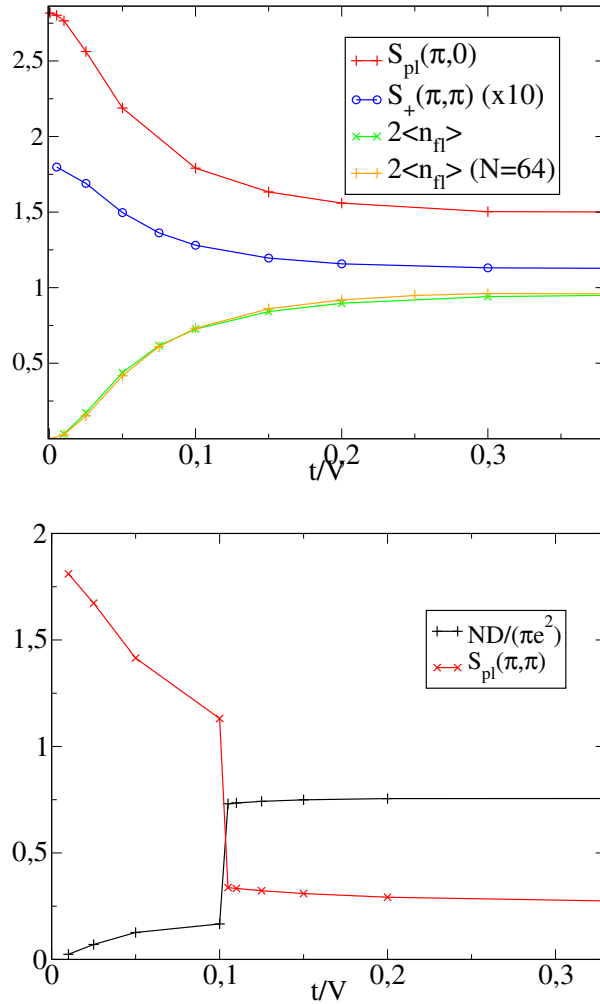


FIG. 5.6 – Haut : facteurs de structure $S_{pl}(\pi, 0)$ et $S_+(\pi, \pi)$ des corrélations (connexes) des opérateurs P_{\square} et P_+ respectivement, en fonction de t/V , sur le cluster $N = 32$. Le nombre moyen de fluctuations de charge $\langle n_{fl} \rangle$ est également montré (pour $N = 32$ et 64), et évolue en rapport avec ces facteurs de structure. Bas : poids de Drude et facteur de structure $S_{pl}(\pi, 0)$ en fonction de t/V pour $N = 32$, dans le modèle original de Hamiltonien 4.1 limité à un défaut de charge.

un ordre de charge. Ce type d'état métallique ordonné peut exister dans des situations plus ou moins proches, par exemple dans un modèle de Hubbard étendu à $n = 1/2$ sur réseau carré [97], pour lequel on trouve dans une gamme finie de t/V (et $U \gg t, V$) un état métallique ($D > 0$) et ordonné (avec un ordre de charges à longue distance mesuré par exemple par le facteur de structure de charge en (π, π)). Schématiquement, dans cette situation l'énergie cinétique d'un porteur permet un transport de charges dans un

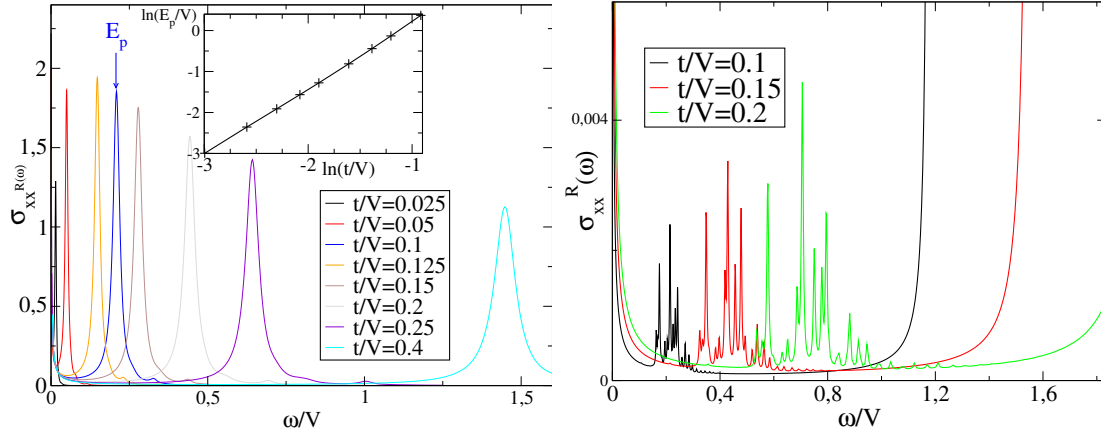


FIG. 5.7 – Conductivité optique $\sigma_{xx}^R(\omega)$ en fonction de la ω/V , pour différentes valeurs de t/V , calculées avec le Hamiltonien effectif 5.6 autorisant une fluctuation de charge, pour $N = 32$ (à gauche) et $N = 64$ (à droite). Le paramètre délargissement des pics est $\eta = 0.1t$ ($N = 32$) et $\eta = 0.01t$ ($N = 64$). Pour $N = 32$, la position E_p/V du pic dominant le spectre est représentée dans l’insert en fonction de t/V en échelle logarithmique.

ordre en damier. Ici, on pourrait invoquer un scénario similaire, l’ordre en plaquettes résonantes laissant des couloirs dans lesquels les porteurs se déplaceraient. Il serait cependant difficile de valider ce scénario par les facteurs de structure finis présentés sur la figure 5.6 : si on autorise un nombre arbitraire de défauts de charge, l’ordre *RSPC* peut être totalement détruit pour t/V suffisamment grand, et les facteurs de structure considérés nuls. D’autre part, des calculs de $S_{\text{pl}}(\pi, 0)$ en utilisant comme Hamiltonien soit $H^{(1)}$ (comme on l’a fait précédemment pour D ; voir figure 5.6) soit $H^{(1)}$ donnent des résultats proches dans l’isolant, mais pas lorsque $t/V \geq (t/V)_d$: dans le premier cas, en l’absence de flips de singulets $S_{\text{pl}}(\pi, 0)$ est fortement réduit - sans qu’on puisse dire s’il serait nul dans la limite thermodynamique. Comme pour le poids de Drude, il serait intéressant de calculer de manière plus réaliste ces facteurs de structure (par exemple en autorisant plus de défauts) pour mieux caractériser la nature de la transition, et trancher la question de la possibilité d’un état métallique ordonné. D’autre part les quantités analysées jusqu’ici ne permettent pas d’examiner l’hypothèse d’une phase supersolide évoquée au paragraphe 5.2.2, et plausible également vu la structure en singulets résonants de l’état ordonné.

5.4.3 Conductivité optique dans l’isolant

On a vu qu’une caractéristique de l’isolant qu’on étudie sur le réseau damier est la possibilité d’excitations de charges fractionnaires $\pm e/2$. Sans ajout ou arrachage de particules au système ces excitations ne peuvent, dans la limite $t/V \rightarrow 0$, être créées que par des fluctuations de charge, à un coût énergétique V . A t/V fini, elles peuvent

être stabilisées par l'énergie cinétique $O(t)$ des défauts, et former un état excitonique (état lié des deux défauts de charges opposées) d'énergie inférieure au gap de charge [99]. Une question essentielle est de savoir si cet état excitonique est retrouvé ici, et s'il est toujours un état lié dans l'isolant ou si, en augmentant t/V , un déconfinement des charges fractionnaires intervient avant la transition vers le métal. La conductivité optique est alors un outil de choix pour repérer de telles excitations. On a calculé la partie régulière et réelle de la conductivité optique $\sigma_{xx}^R(\omega > 0)$, avec le Hamiltonien $H^{(1)}$ autorisant une fluctuation de charge (sans laquelle il n'y aurait par d'exciton possible). Les conductivités sont calculées avec un paramètre d'élargissement des pics (voir section 5.3) $\eta = 0.1t$ pour $N = 32$ et $\eta = 0.02t$ pour $N = 64$, et montrées sur la figure 5.7. Les différentes courbes pour $N = 32$ font nettement apparaître un pic pour une fréquence $\omega \ll V$ (dans le régime isolant du moins), donc correspondant bien à un état dans le gap. La position du pic central correspond à une énergie E_p , qui semble varier avec le paramètre t/V de la manière suivante : $E_p/V \sim (t/V)^{3/2}$. Ceci indique qu'il ne s'agit ni d'un état excitonique, ni d'une excitation de flip (du spectre du Hamiltonien effectif H_2 , et dont l'énergie d'excitation varierait en $(t/V)^2$), mais plus probablement d'un état dont la composante sur les configurations à défauts fractionnaires $\pm e/2$ croît avec t/V , d'où la croissance de la largeur du pic correspondant. Le même type de pics est retrouvé pour $N = 64$, également à une énergie d'excitation (en unités de V) croissant avec t/V . On ne peut cependant pas interpréter ces pics comme des pics excitoniques, qui auraient une énergie d'excitation $E_x \sim V - ct$; et l'utilisation du Hamiltonien effectif avec une fluctuation de charge au maximum ne permet pas d'identifier des excitons, qu'on observerait dans le spectre de conductivité optique du modèle de Hubbard étendu [99]. On observe par contre des pics (non apparents sur la figure 5.7) à des énergies d'excitations $\sim V$, nécessaires pour créer une fluctuation de charge mobile dans l'isolant.

5.4.4 Energie d'appariement des trous

Compte-tenu du fait que la phase isolante *RSPC* est caractérisée par un appariement des électrons en singulets, on peut se demander si cette situation facilite l'appariement de trous insérés dans le système, par le même argument que celui avancé pour une phase *RVB* dopée en trous : il semble en effet plus facile d'arracher un singulet sur une plaquette résonante que deux électrons de plaquettes résonantes distinctes. On parlera ici de trous pour désigner les charges $+e$ résultantes de l'arrachage d'un électron, même si une configuration de basse énergie à $N/4 - 1$ particules est, dans le langage des dimères, un pavage de dimères avec 2 monomères (les défauts de charge $+e/2$) sur le réseau carré dual. Compte-tenu de la structure *RSPC* on peut penser que 2 monomères sont confinés, pour ne pas gêner la résonance de plusieurs singulets. Cependant les excitations de charge ont une mobilité $\sim t$, et on a une problématique similaire à celle évoquée dans le paragraphe 3.3 : les défauts ont-ils plutôt tendance à se regrouper pour favoriser la résonance des singulets du cristal, ou à être déconfinés les uns des autres pour maximiser leur énergie cinétique? D'autre part si des entités de charge $+2e$ (autrement dit de paires de Cooper de trous) sont stables, c'est-à-dire à la fois plus favorables que des charges $+e$ non appariées et stables par rapport à l'agrégation des trous, on peut avancer

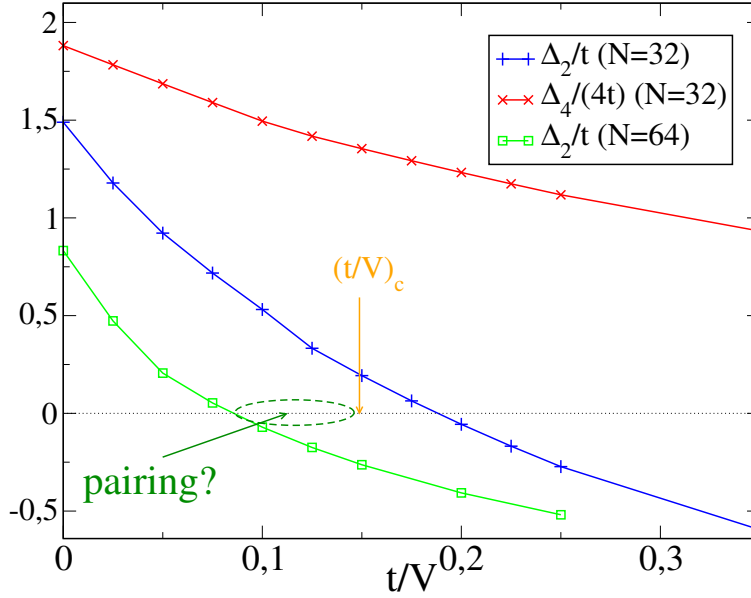


FIG. 5.8 – Energie d’appariement de 2 trous Δ_2 et de 2 paires de trous Δ_4 en fonction de t/V , avec le Hamiltonien effectif $H^{(0)}$ pour le cluster $N = 32$ (et $N = 64$ pour Δ_2). Entre la position d’annulation de Δ_2 (pour $N = 64$) et $(t/V)_c$ l’appariement des trous semble possible.

la possibilité d’une phase supraconductrice, ou supersolide [95] si un ordre de charge subsiste en présence d’une densité finie de telles entités. On s’intéressera donc à l’énergie d’appariement Δ_2 de deux charges $+e$, négative si elles forment un état lié de charge $+2e$; et l’énergie d’appariement de 4 trous Δ_4 , qui si elle est négative interdit la stabilité de ces paires de Cooper de trous.

$$\Delta_2 = E_0(N/4 - 2) + E_0(N/4) - 2E_0(N/4 - 1) \quad (5.18)$$

$$\Delta_4 = E_0(N/4 - 4) + E_0(N/4) - 2E_0(N/4 - 2) \quad (5.19)$$

On peut également interpréter Δ_4 comme (à un facteur N près) la compressibilité inverse du système : $\Delta_4 \sim 1/N d^2 E / dn_h^2$ où n_h est la densité de trous (charges $+e$) dans un système de N sites. Les énergies $E_0(N_e)$ sont ici calculées avec le Hamiltonien $H^{(0)}$ (sans fluctuation de charge à l’intérieur d’un cluster). On présente sur la figure 5.8 l’évolution avec t/V de Δ_2 pour les clusters $N = 32$ et $N = 64$, et de Δ_4 pour $N = 32$ seulement (avec l’autre cluster pour les raisons ci-dessus le calcul est possible mais très long, du fait du nombre de configurations $N_H^R \geq 4.10^8$ pour $N_e = 12$ particules)

Les deux quantités sont positives dans la limite $t/V \rightarrow 0$: l’énergie cinétique des défauts est d’autant plus grande que leur nombre sur un système fini est faible, et l’énergie de résonance des singulets (qui tend à confiner plusieurs défauts sur une même plaquette) joue peu ici puisqu’en t^2/V . Pour t et V du même ordre, cette énergie de

résonance domine et l'appariement est favorisé. On voit ainsi que Δ_2 décroît avec t/V , s'annulant pour $t/V = 0.18(1)$ ($N = 32$) et $t/V = 0.08(1)$ ($N = 64$). L'énergie Δ_4 d'appariement de 4 trous, elle, décroît également avec t/V mais reste, dans toute la gamme de t/V représentée sur la figure 5.8 (et au-delà), nettement positive, et on peut se convaincre -mais c'est à vérifier- qu'il ne s'agit pas d'un effet de taille finie et que $\Delta_4 > 0$ dans cette gamme pour des clusters plus grands. Ainsi pour un large domaine de paramètres, les paires de trous sont stables par rapport à l'appariement.

Il faut néanmoins limiter la portée de ces résultats au cas où le système non dopé reste bien décrit par les configurations de basse énergie, donc plutôt dans l'isolant. Pour $t/V > (t/V)_c$ une énergie d'appariement $\Delta_2 < 0$ calculée par cette méthode n'a pas grand sens puisque les défauts prolifèrent et le terme H_2 favorisant leur appariement décrit mal la dynamique. Dans le modèle original on trouverait sûrement $\Delta_2 > 0$ et les porteurs de charge élémentaires seraient bien les charges $\pm e$, dans la phase métallique. Cependant il existe du moins pour la plus grande taille considérée (et on peut supposer que cela s'étend à la limite thermodynamique), une gamme de paramètres $0.08 < t/V < (t/V)_c$ telle que $\Delta_2 < 0 < \Delta E_g$. On a donc un régime de stabilité de paires de trous par rapport à des trous individuels d'une part et à la séparation de phase d'autre part (comme $\Delta_4 > 0$), ce qui indique une possible phase supersolide : des paires de trous y seraient les porteurs de charge élémentaires et leur statistique bosonique autoriserait leur condensation, et ce dans un environnement qui conserverait (pour un dopage suffisamment faible) l'ordre en singulets résonants sur plaquettes.

Conclusion partielle

On a vu dans ce chapitre que les transitions métal-isolant, même en ne parlant que de celles induites par les corrélations électroniques, sont assez variées du fait de l'absence ou présence d'ordre caractéristique de l'isolant, de l'ordre de la transition, etc.. L'étude du cas d'un réseau frustré comme le réseau damier à un remplissage fractionnaire est motivée entr autres par des situations rencontrées dans des composés à fermions lourds inhabituels, métalliques mais avec des interactions les rendant probablement proches d'une transition métal-isolant. L'apport d'une modélisation faisant intervenir en premier lieu les contraintes de charge sur les tétraèdres, en d'autre termes sur les configurations de dimères, permet essentiellement d'étudier l'isolant ; en considérant dans le modèle un nombre limité (pour des raisons numériques) de défauts de charges, on peut néanmoins estimer le gap de charge dans l'isolant et estimer ainsi la position de la transition, qui d'ailleurs est du même ordre que celle d'une transition isolant-superfluide dans l'analogie bosonique du modèle. Le calcul du poids de Drude dans ce modèle est plus délicat, puisqu'un poids non nul est attendu dans la phase métallique, à laquelle la présente modélisation est mal adaptée ; la disparition de l'ordre de charge dans le métal est également biaisée par l'inclusion du terme effectif de flip dans le modèle. Par contre, l'estimation de l'énergie d'appariement de trous dans le régime isolant semble plus fiable, et les résultats ouvrent la possibilité d'une phase supersolide dans ce type de systèmes.

Conclusion

Les modèles contraints bidimensionnels, et en particulier les modèles de dimères, offrent un cadre permettant d'aborder une grande variété de problématiques de la physique moderne, allant des phases sans ordre de spin à basses températures, sur des réseaux intrinsèquement frustrés, au problème toujours hautement débattu de la supraconductivité non conventionnelle et de la pertinence de l'image d'une phase à liens de valence résonants comme précurseur de la supraconductivité. Outre ces connections expérimentales, la physique des dimères classiques et quantiques permet de multiples approches théoriques, combinant des situations exactement solubles et des approches perturbatives souvent très efficaces. Ces approches analytiques ont une portée néanmoins plus limitée que dans les systèmes unidimensionnels, ce qui requiert l'emploi de méthodes numériques variées, dont on a vu un échantillon dans cette thèse.

Un intérêt remarquable des modèles de dimères quantiques est d'avoir mis en évidence une phase liquide de dimères, sur le réseau triangulaire. Cet état, prototype d'une phase à liens de valence résonants (hypothétisée par exemple dans des systèmes à dégénérescence orbitale comme $LiNiO_2$) nécessite une attention détaillée ; le fait qu'on trouve une telle phase désordonnée dans un modèle de dimères classiques en interaction sur le même réseau est une des motivations de l'étude des modèles classiques du chapitre 2, à côté de questions plus théoriques tenant aux limitations d'une approche basée sur les modèles de hauteurs, a priori réservée aux réseaux bipartites. Ce modèle donne des prédictions valables qu'on a vérifiées numériquement ; la méthode utilisée a aussi permis de considérer un réseau triangulaire avec des interactions anisotropes, où on a identifié une ligne de points critiques, en apparence contradiction avec la non-bipartition du réseau ; ceci montre que la géométrie des interactions est aussi déterminante que celle du réseau, même dans un modèle contraint. Le cas d'interactions isotropes indique une mise en ordre à basses températures, malgré un nombre quasi-macroscopique de configurations de basse énergie. Ce type de mise en ordre impliquant les fluctuations, retrouvé dans des modèles quantiques (par exemple le modèle de Rokhsar et Kivelson sur le réseau triangulaire) est une des sources de la rareté des états liquides RVB dans les systèmes fortement corrélés.

De la même manière que les modèles de spins sur réseau sont utilisés à des fins diverses et non restreintes à l'étude du magnétisme, les concepts de dimères quantiques peuvent s'appliquer à des situations bien plus variées que celles des phases de singulets à courte portée. Les systèmes à fortes interactions coulombiennes sur des réseaux

frustrés de type pyrochlore impliquent pour la répartition des charges des contraintes qui, suivant le remplissage électronique, peuvent être celles des dimères. On a vu dans le chapitre 4 comment un tel système, plus exactement sa version bidimensionnelle sur le réseau damier (qui présente les ingrédients essentiels du problème tridimensionnel) peut être traité par un modèle effectif de dimères quantiques à deux couleurs, sur le réseau carré. Là encore, le système est classiquement dégénéré mais on a vu que des fluctuations quantiques dues à une faible mobilité des électrons favorisent un isolant de Mott ordonné en singulets résonants, qu'on a caractérisé numériquement par des méthodes de diagonalisation exacte. L'ajout au Hamiltonien effectif ainsi dérivé d'un terme d'interaction supplémentaire H_W a permis d'envisager d'autres types de phases ordonnées, dans un modèle à la Rokhsar-Kivelson (mais plus subtil que l'original compte-tenu du spin des particules). Le dernier chapitre de cette thèse présente des études en cours concernant une situation plus réaliste sur le réseau damier, utilisant là encore une modélisation en terme de dimères mais en incluant une mobilité électronique finie, et par conséquent la possibilité de mouvements de charges indépendantes. Ceci permet d'aborder la transition de l'isolant vers un état métallique, qu'on sait exister dans des composés à fermions lourds comme LiV_2O_4 présentant des contraintes de charge non identiques mais similaires. Si la modélisation qu'on utilise est plutôt adaptée à l'isolant, elle semble permettre de localiser la transition, par l'estimation du gap de charge. Par contre la détermination de la nature de cette transition : premier ou second ordre, voire de la caractérisation d'une phase supersolide qui aurait pour origine la structure en singulets dans l'isolant, restent des questions ouvertes.

Publications

[1] : *Criticality of a classical dimer model on the triangular lattice*, F. Trouselet, F. Alet, P. Pujol, D. Poilblanc, Phys. Rev. E **76**, 041125 (2007).

[2] : *Mixed Columnar-Plaquette Crystal of correlated fermions on a 2D pyrochlore lattice at fractional filling*, F. Trouselet, D. Poilblanc, R. Moessner, Phys. Rev. B **78**, 195101 (2008).

Bibliographie

- [1] M.E. Fisher, Physics Review **124**, 1664 (1961).
- [2] R. Moessner, S.L. Sondhi, P. Chandra, PRL **84**, 4457 (2000).
- [3] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A **277**, 237 (1963) ; Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963) ; Proc. Roy. Soc. A **281**, 401 (1964).
- [4] N. F. Mott, Proc. Phys. Soc. Sect. A **62**, 416 (1949).
- [5] M. Hastings, Phys. Rev. B **69**, 104431 (2004).
- [6] E. Lieb, T. D. Schultz, and D. C. Mattis, Ann. Phys. **16**, 407 (1961).
- [7] C. Lhuillier, G. Misguich, Two-dimensional quantum antiferromagnets, H. T. Diep editor, World-Scientific (2005).
- [8] J.S.Helton, K. Matan, M.P. Shores, E.A. Nytko, B.M.Bartlett, Y.Yoshida, Y.Takano, A. Suslov, Y.Qiu, J.H. Chung, D.G. Nocera, Y.S. Lee, Phys.Rev.Lett. **98**, 107204 (2007).
- [9] F. Bert, D. Bono, P. Mendels, F. Ladieu, F. Duc, J.-C. Trombe, P. Millet, Phys.Rev.Lett. **95**, 87203 (2005).
- [10] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986).
- [11] P.W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- [12] P.W. Anderson, P.A. Lee , M. Randeria , T.M. Rice, N. Trivedi, F.C. Zhang, J. Phys. Cond. Mat. **16**, R755 (2004).
- [13] S. Liang, B.Doucot, P.W. Anderson, **61**, 365 (1988).
- [14] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [15] R. Moessner, Quantum dimer models, Lecture notes (HFM school, Trieste, 2007)
- [16] M. Kohmoto and Y. Shapir, Phys.Rev. B **37**, 9439 (1988).
- [17] D.S. Rokhsar and S.A. Kivelson, Phys. Rev. Lett. **61**, 2376 (1988)
- [18] G. Misguich, D. Serban and V. Pasquier, Phys. Rev. B **67**, 214413 (2004).
- [19] N. Read, S. Sachdev, Nucl. Phys. B **316**, 609 (1989).
- [20] A. Ralko, M. Mambrini, D. Poilblanc, arXiv :0905.2039, submitted to Phys.Rev.B
- [21] F. Vernay, K. Penc, P. Fazekas, F. Mila, Phys. Rev. B **70**, 014428 (2004).
- [22] B. Normand and A.M. Oleś, Phys.Rev. B **78**, 094427 (2008).

-
- [23] G. Jackeli, D.A. Ivanov, Phys. Rev. B **76**, 132407 (2007).
- [24] S. di Matteo, G. Jackeli, C. Lacroix, N. Perkins, Phys. Rev. Lett. **93**, 077208 (2004).
- [25] K. Kugel and D. Khomskii, Sov. Phys. Usp. **25**, 232, (1982).
- [26] F. Vernay, A. Ralko, F. Becca and F. Mila, Phys. Rev. B **74**, 054402 (2006)
- [27] Josephson, B. D., 1964, Rev. Mod. Phys. **36**, 216.
- [28] L. B. Ioffe, M. V. Feigelman, A. Ioselevich, D. Ivanov, M. Troyer, and G. Blatter, Nature **415**, 503 (2002).
- [29] R. Moessner et S.L. Sondhi, Phys. Rev. Lett. **86**, 1881 (2001).
- [30] A. Fabricio Albuquerque, H.G. Katzgraber, M. Troyer, and G. Blatter, Phys. Rev. B **78**, 014503 (2008).
- [31] R. Siddhartan, B.S. Shastry, A.P. Ramirez, A. Hayashi, R.J. Cava and S.Rosenkranz, Phys.Rev.Lett. **83**, 1854 (1999)
- [32] A.P. Ramirez, A. Hayashi, R.J. Cava, R.B.Siddhartan and S.Shastry, Nature **399**, 333-336 (1999).
- [33] C. Castelnovo, R. Moessner, S.L. Sondhi, Nature **451**, 42-45 (2008).
- [34] L. Pauling, J. Am. Chem. Soc. **57**, 2680 (1935).
- [35] Z. Hiroi, K. Matsuhira, S. Takagi, T. Tayama, T. Sakakibara, J. Phys. Soc. Jpn **72** (2003).
- [36] N. Shannon, G. Misguich and K. Penc, Phys.Rev. B **69**, 224403 (2004).
- [37] M.Fisher, J. Stephenson, Phys.Rev. **132**, 1411 (1963).
- [38] P.W. Kasteleyn, Physica **27**, 1209 (1961).
- [39] V.Y. Chernyak and M. Chertkov, arXiv :0902.0320
- [40] F.Wang, F.Y. Wu, Phys. Rev. E **75**, 040105R (2007).
- [41] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (1996).
- [42] J. Cardy, *Conformal Field Theory and Statistical Mechanics*, dans *Exact Methods in Low Dimensional Statistical Mechanics and Quantum Computing* (Les Houches, 2008).
- [43] C.L. Henley, J. Stat. Phys **89**, 483 (1997).
- [44] E. Fradkin, D. Huse, R. Messner, V. Oganesyan, S.L. Sondhi, Phys. Rev. B **69**, 224415 (2004).
- [45] F. Alet, Y. Ikhlef, J.L. Jacobsen, G. Misguich, V. Pasquier, Phys. Rev. E **74**, 041124 (2006).
- [46] C. Castelnovo, C. Chamon, C. Mudry, P. Pujol, Annals of Physics **322**, 903 (2007).
- [47] S. Papanikolaou, E. Luijten, E. Fradkin, Phys. Rev. B **76**, 134514 (2007).
- [48] P. Fendley, R. Moessner, S.L. Sondhi, Phys. Rev. B **66**, 214513 (2002).
- [49] J. Kondev et C.L. Henley, Nucl. Phys. B **532**, 635 (1998).

-
- [50] J. Villain, R. Bidaux, J.P. Carton, R. Conte, *J. Phys. (Paris)* **41**, 1263 (1980).
- [51] S.M. Bhattacharjee, J.F. Nagle, *Phys.Rev. A* **31**, 3199 (1995).
- [52] H. Tasaki, *Prog. Theor. Phys.* **99**, 489(1998).
- [53] C. Castelnovo, C. Chamon, C. Mudry, P. Pujol, *Annals of Physics* **318**, 316 (2005).
- [54] G. Misguich, D. Serban, V. Pasquier, *Phys.Rev.Lett.* **89** (2002) 137202.
- [55] V. Elser et C. Zeng, *Phys. Rev. B* **48**, 13647 (1993).
- [56] R. Moessner, S.L. Sondhi, P. Chandra, *Phys. Rev. B* **64**, 144416 (2001).
- [57] P.W. Leung, K.C. Chiu et K.R. Runge, *Phys. Rev. B* **54**, 12938 (1996).
- [58] O. Syljuasen, *Phys. Rev. B* **73**, 245105 (2006).
- [59] A. Ralko, D. Poilblanc et R. Moessner, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 037201 (2008).
- [60] E. Ardonne, P. Fendley et E. Fradkin, *Annals Phys.* **310**, 493 (2004).
- [61] A. Ralko, M. Ferrero, F. Becca, D. Ivanov et F. Mila, *Phys. Rev. B* **71**, 224109 (2005).
- [62] D. Ivanov, *Phys. Rev. B* **70**, 094430 (2004).
- [63] A. Ralko, M. Ferrero, F. Becca, D. Ivanov et F. Mila, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 140404 (2007).
- [64] T. Senthil et M.P. Fisher, *Phys. Rev. B* **63**, 134521 (2001).
- [65] D. Poilblanc, F. Alet, F. Becca, A. Ralko, F. Trouselet, F. Mila, *Phys. Rev. B* **74**, 014437 (2006).
- [66] A. Ralko, F. Mila et D. Poilblanc, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 127202 (2007).
- [67] D. Poilblanc, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 157206 (2008).
- [68] N. Read et B. Chakraborty, *Phys. Rev. B* **40**, 7133 (1989).
- [69] S.A. Kivelson, D.S. Rokhsar, J.P. Sethna, *Phys. Rev. B* **35**, 8865 (1987).
- [70] S.A. Kivelson, *Phys. Rev. B* **39**, 259 (1989).
- [71] F. Wilczek, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1144 (1982).
- [72] D. Poilblanc, A. Läuchli, M. Mambrini, F. Mila, *Phys. Rev. B* **73**, 100403(R) (2006).
- [73] F. Pollmann, P. Fulde, K. Shtengel, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 136404 (2008).
- [74] F. Pollmann, J.J. Betouras, K. Shtengel, P. Fulde, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 170407 (2006).
- [75] H. Bethe, *Z. Physik* **71**, 205 (1931).
- [76] C Lanczos - *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 1950.
- [77] O. Starykh, A. Furusaki, L. Balents, *Phys. Rev. B* **72**, 094416 (2005).
- [78] F.H.L. Essler, A.M. Tsvelik, G. Delfino, *Phys. Rev. B* **56**, 11001 (1997).
- [79] C.K. Majumdar and D.K. Ghosh, *J. Math. Phys.* **10**, 1388 (1969).
- [80] I. Affleck and S. Qin, *Journal of Physics A* **32**, 7815 (1999).

-
- [81] P.F. Maldague, Phys. Rev. B **16**, 2437 (1977).
- [82] W.Kohn, Phys. Rev. **133**, A 171 (1964).
- [83] R.M. Fye, M.J. Martins, D.J. Scalapino, J. Wagner, W. Hanke, Phys. Rev. B **44**, 6909 (1991).
- [84] E. Dagotto, A. Moreo, F. Ortolani, J. Riera, D.J. Scalapino, Phys. Rev. B **45**, 10107 (1992).
- [85] H. Nakano, Y. Takahashi, M. Imada, J.Phys.Soc.Jpn. **76**, 034705 (2007).
- [86] D. B. McWhan, A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman, T. M. Rice, Phys. Rev. B **7**, 1920 (1973).
- [87] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M.J. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).
- [88] M. Cappone, L. Capriotti, F. Becca, S. Caprara, Phys. Rev. B **63**, 085104 (2001).
- [89] J. Kondo, Prog. Th. Phys. **32**, 37 (1964).
- [90] C. Lacroix, Can. J. Phys. **79**, 1469 (2001).
- [91] P.E. Jönsson, K. Takenaka, S. Niitaka, T. Sasagawa, S. Sugai, H. Takagi, Phys. Rev. Lett. **99**, 167402 (2007).
- [92] I. A. Nekrasov, Z. V. Pchelkina, G. Keller, Th. Pruschke, K. Held, A. Krimmel, D. Vollhardt, V.I. Anisimov, Phys. Rev. B **67**, 085111 (2003).
- [93] P. Fulde, K. Penc, N. Shannon, Ann. Phys.(Leipzig) **11**, 892 (2002).
- [94] D. Poilblanc, Phys. Rev. B **76**, 115104 (2007).
- [95] D. Poilblanc, K. Penc, N. Shannon, Phys. Rev. B **75**, 220503(R) (2007).
- [96] S. Wessel, Phys. Rev. B **78**, 075112 (2008).
- [97] J. Merino, Phys. Rev. Lett. **99**, 036404 (2007).
- [98] M. Miyazaki, C. Hotta, S. Miyahara, K. Matsuda, N. Furukawa, J. Phys. Soc. Jap. **78**, 014707 (2009).
- [99] F. Pollmann, P. Fulde, E. Runge, Phys. Rev. B **73**, 125121 (2006).
- [100] E. Gagliano, C. Balseiro, Phys. Rev. Lett. **59**, 2999 (1987).
- [101] C.A. Stafford, A.J. Millis, B.S. Shastry, Phys. Rev. B **43**, 13660 (1991).