



Etats fondamentaux et excitations de systèmes magnétiques frustrés, du classique au quantique

Laura Messio

► To cite this version:

Laura Messio. Etats fondamentaux et excitations de systèmes magnétiques frustrés, du classique au quantique. Matière Condensée [cond-mat]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2010. Français. NNT : . tel-00523976

HAL Id: tel-00523976

<https://theses.hal.science/tel-00523976>

Submitted on 6 Oct 2010

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 de DOCTORAT de l'UNIVERSITÉ
PIERRE ET MARIE CURIE - PARIS VI**

Spécialité : **PHYSIQUE**

Préparée au **LPTMC**

Ecole Doctorale : **P2MC (ED389)**

Présentée par **Laura MESSIO**

Pour obtenir le grade de
Docteur de l'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

**Etats fondamentaux et excitations
de systèmes magnétiques frustrés,
du classique au quantique**

Soutenue le 14 septembre 2010 devant un jury composé de

Benoît DOUÇOT	Examineur
Thierry GIAMARCHI	Président
Claire LHUILLIER	Directrice de thèse
Frédéric MILA	Rapporteur
Grégoire MISGUICH	Co-directeur de thèse
Didier POILBLANC	Rapporteur

Remerciements

Je remercie tout d'abord Frédéric Mila et Didier Poilblanc d'avoir accepté d'être mes rapporteurs, ainsi que Benoît Douçot et Thierry Giamarchi qui ont fait partie du jury.

Bien sûr, je remercie mes directeurs de thèse, Claire Lhuillier et Grégoire Misguich, qui m'ont, chacun à leur façon, apporté beaucoup. J'ai particulièrement apprécié la patience et la disponibilité de Claire : j'avais une directrice pour moi toute seule ! Et la culture de Grégoire qui trouvait toujours un modèle sur lequel la réponse à mes questions compliquées devenait triviale.

Je remercie tous ceux avec qui j'ai collaboré et discuté au cours de ces trois années (dans un ordre chronologique d'appartion) : Pascal Viot m'a permis de rencontrer Claire au moment de la recherche d'une thèse. Il m'a transmis une partie de ses connaissances en programmation et m'a aidé à adapter l'algorithme de Wang-Landau à notre modèle de spins. Jean-Christophe Domenge m'a passé le flambeau du problème des vortex en répondant à mes questions sur son travail antérieur. Laurent Pierre a toujours répondu de manière illuminante à mes questions mathématiques. Bernard Bernu m'a aidé dans l'élaboration du programme pour le développement en clusters. Olivier Cépas m'a fait découvrir le monde de l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya. Philippe Sindzingre m'a expliqué de nombreux résultats de diagonalisations exactes. Benoît Douçot m'a permis de comprendre (enfin) pourquoi certains i complexes disparaissaient ! Bjorn Fåk a éclairé un petit peu l'univers sombre des expériences. Et bien d'autres à qui je demande pardon de ne pas les nommer.

J'ai passé un peu plus de trois années très agréables au LPTMC, avec quelques excursions à l'IPhT. Je remercie tous les membres de ces deux laboratoires, des chercheurs bénévoles aux thésards qui resteront après mon départ. Merci aux amis et à ma famille qui me supportent encore aujourd'hui !

Résumé et mots-clés

Résumé

Etats fondamentaux et excitations de systèmes magnétiques frustrés, du classique au quantique

La première partie de cette thèse est consacrée aux systèmes magnétiques classiques. Une méthode de recherche exhaustive des états ne brisant aucune symétrie spatiale de divers réseaux est présentée. De nouveaux ordres de Néel sur le réseau kagome sont décrits. Leurs facteurs de structure statiques fournissent une grille d'analyse pour les résultats expérimentaux. Certains ordres ayant des spins non coplanaires sont les uniques états fondamentaux de Hamiltoniens d'Heisenberg. La chiralité, paramètre d'ordre discret, donne lieu à une transition de phase à température finie, étudiée sur un modèle générique. Nous montrons que des défauts topologiques $\mathbb{Z}_2$ prolifèrent aux murs de domaines chiraux. L'ordre de la transition (premier ordre ou classe d'universalité d'Ising) dépend des interactions entre spins. La théorie des bosons de Schwinger en champ moyen (SBMFT) permet de faire le lien entre physique de spins classiques et quantiques : elle permet de décrire à la fois des phases ordonnées à longue portée et des phases désordonnées, parmi lesquelles les liquides de spins topologiques. Les symétries et les moyens de les imposer en SBMFT sont analysés. Différentes phases se distinguent grâce aux flux, quantités invariantes de jauge ayant une signification physique aussi bien dans un système quantique que dans la limite classique. Les visons, excitations quantiques modifiant les flux, ont ainsi leur limite classique avec les vortex $\mathbb{Z}_2$. En relâchant certaines contraintes de symétrie, on obtient des phases chirales, dont la limite classique renvoie au premier chapitre de cette thèse, et dont la phase désordonnée fournit des liquides de spin chiraux. L'exemple de l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya sur le réseau kagome est étudié.

Mots-clés Ordre à longue portée, chiralité, vortex, transition de phase, bosons de Schwinger en champ moyen, liquides de spins, interaction Dzyaloshinskii-Moriya, flux.

Abstract

Ground states and excitations of frustrated magnetic systems, from the classical limit to the quantum case

The first part of this thesis is devoted to classical magnetic systems. A method for an exhaustive search of states that do not break any spatial symmetry on a given lattice is presented. New Néel states on the kagome lattice are described. Their static structure factors give a way to analyze experimental results. Some non-coplanar spin orders are the only ground states of Heisenberg Hamiltonians. The chirality is a discrete order parameter and give rise to a finite temperature phase transition, studied on a toy model. We show that $\mathbb{Z}_2$ topological defects proliferate near chirality domain walls. The order of the transition (first order or Ising like) depends on the spin interactions. The Schwinger boson mean-field theory (SBMFT) allows us to link classical and quantum spin physics : long-range ordered and disordered phases as topological spin liquids can be described in this frame. Symmetry and the way to impose them are analyzed. Different phases are distinguished by their fluxes. These are gauge invariant quantities having a signification as well in a quantum system as in the classical limit. Visons are quantum excitations that change fluxes. Thus, the $\mathbb{Z}_2$ vortices are their classical limit. By relaxing some symmetry constraints, chiral phases are obtained, whose classical limit sends back to the first chapter of this thesis, and whose disordered phase gives chiral spin liquids. The example of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction on the kagome lattice is studied.

Key words Long-range order, chirality, vortex, phase transition, Schwinger boson mean-field theory, spin liquids, Dzyaloshinskii-Moriya interaction, flux.

Table des matières

Remerciements	i
Résumé et mots-clés	iii
Table des matières	viii
Table des figures	x
Introduction	1
1 Les ordres à longue portée classiques	9
1 Les états classiques ordonnés	12
1.1 Symétries d'un état de spins	13
Notations et définitions	13
Exemple du réseau triangulaire	13
Recherche d'états réguliers	14
1.2 Groupes de symétrie algébriques sur le réseau triangulaire	15
1.3 Etats réguliers sur plusieurs réseaux	17
Recherche des états réguliers sur le réseau triangulaire	17
Etats réguliers sur le réseau triangulaire	17
Etats réguliers sur le réseau kagome	18
Autres types d'états réguliers possibles	20
1.4 Analogie avec les <i>groupes des symétries projectives</i> de Wen	20
1.5 Energie de modèles Heisenberg	21
Les états spiraux	21
Fondamentaux du Hamiltonien Heisenberg sur le réseau kagome	22
1.6 Facteurs de structure des états réguliers	24
Définitions des facteurs de structure.	25
Les facteurs de structure des états réguliers sur le réseau kagome	26
Applications à la Kapellasite et à la Volborthite.	27
2 La transition chirale	28
2.1 Possibilité d'une transition de phase chirale	28
Le théorème de Mermin-Wagner	29
Le modèle d'Ising F sur le réseau carré 2D	29
Exemple de symétries discrètes dans des modèles Heisenberg	30
Connexité de l'espace du paramètre d'ordre	31
Le modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau kagome	32
2.2 Les vortex	32
Définition d'un vortex	32
Le modèle Heisenberg AF sur le réseau triangulaire : $E_{op} \sim SO_3$	34
Le modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau kagome avec fondamental cuboc2 : $E_{op} \sim O_3$	35
Relation entre la présence de vortex $\mathbb{Z}_2$ et la transition chirale	35
2.3 Le modèle Ising- $\mathbb{RP}_3$: transition chirale et vortex	36

	Reformulation du modèle	37
	Calcul de la vorticit� d'une plaquette	38
	Nucl�ation de vortex au voisinage des murs de domaines de chiralit�	39
	L'ordre de la transition	41
3	Articles	42
2	Des liquides de spin aux ordres de N�el en bosons de Schwinger	61
1	Les bosons de Schwinger	63
1.1	Les op�rateurs bosoniques	63
1.2	Rotation des spins	64
1.3	Invariance de jauge locale	65
1.4	Les flux : des observables invariantes de jauge	66
1.5	Le Hamiltonien bosonique	67
2	L'approximation de champ moyen	67
2.1	Le Hamiltonien de champ moyen	68
2.2	R�seau p�riodique	69
2.3	L'autocoh�rence et l'ajustement des param�tres	70
2.4	La transformation de Bogoliubov	71
2.5	Exemple d�taill� : un lien isol�	73
	Lien AF : $J_{12} = 1$	73
	Lien ferromagn�tique : $J_{12} = -1$	74
2.6	Effets des fluctuations du nombre de bosons par site sur les observables du syst�me	75
3	Des bosons de Schwinger aux �tats de N�el semi-classiques	76
3.1	Possibilit� de condensation � la limite thermodynamique	77
3.2	Brisure de sym�trie et �tats coh�rents	79
3.3	Exemple du mod�le AF sur le r�seau triangulaire	81
	Ansatz (0)	82
	Ansatz (π)	83
3.4	Analyse de taille finie de l'ordre � longue port�e	84
	Le spectre de spinons	84
	Les facteurs de structure	86
3	Flux et sym�tries en SBMFT : classification des liquides de spins	91
1	Groupes des sym�tries projectives et Ans�tze sym�triques	92
1.1	D�finitions	92
	Le groupe d'invariance de jauge	92
	Le groupe des sym�tries projectives (PSG)	92
	Les groupes des sym�tries projectives alg�briques	93
1.2	Ans�tze sym�triques sur les r�seaux triangulaire et kagome	94
	Calcul des PSG alg�briques sur le r�seau triangulaire	94
	Ans�tze sym�triques sur le r�seau triangulaire	95
	Ans�tze sym�triques sur le r�seau kagome	95
2	Les flux	96
2.1	G�n�ralit�s sur les flux	97
	Les diff�rents flux	97
	Simplification de champ moyen	97
	Composition des boucles pour les flux	97
	Nombre de flux ind�pendants d'un r�seau	98
	Flux et sym�tries du PSG	98
	Signification et pertinence des flux	99

2.2	Les flux dans l'espace des spins $S = 1/2$	99
	Les flux des B_{ij}	99
	Les flux des A_{ij}	100
2.3	Les flux dans la limite classique	101
	Signification géométrique des flux	101
	Valeur des flux pour des ordres de Néel particuliers	102
2.4	Les flux autour de boucles non locales	102
	Réseaux périodiques respectant les symétries du réseau infini	103
	Ansätze symétriques sur un réseau périodique	103
	Conditions aux limites antipériodiques	105
2.5	Lien entre visons des SL et vortex $\mathbf{Z}_2$ des phases ordonnées	106
3	Relaxation de contraintes de symétrie sur les Ansätze	109
3.1	Les symétries brisées dans les ordres classiques réguliers	109
3.2	Relaxation de contraintes sur le réseau triangulaire	110
	Les PSG algébriques sans σ sur le réseau triangulaire	110
	Les Ansätze AF premiers voisins sans σ sur le réseau triangulaire	110
	Le condensat de l'Ansatz $(\pm\pi/3)$ sur le réseau triangulaire	111
3.3	Relaxation de contraintes sur le réseau kagome	112
4	Résumé et perspectives	112
4	Application de la SBMFT : l'interaction DM sur kagome	115
1	L'interaction Dzyaloshinskii-Moriya en SBMFT	116
1.1	Expression du Hamiltonien en fonction des opérateurs bosoniques	116
	Les nouveaux opérateurs de lien	117
	Le nouvel Hamiltonien	117
1.2	Les Ansätze respectant les symétries du réseau	118
2	Résultats	118
2.1	Le diagramme de phases	118
2.2	Les spectres de spinon	119
2.3	Les facteurs de structure	120
3	Elargissement des PSG à des liquides de spins chiraux	121
3.1	Détermination des Ansätze symétriques modulo T	122
	PSG algébriques	122
	Ansätze compatibles avec les PSG algébriques	124
3.2	Calcul de l'énergie grâce au développement en puissances de κ	124
3.3	Résultats numériques	125
3.4	Conclusion	125
4	Article	127
	Conclusion	137
A	Les ordres réguliers classiques : suppléments	139
1	Etats réguliers sur le réseau hexagonal : calculs	139
2	Etats réguliers sur le réseau hexagonal : récapitulatif	140
3	Etats réguliers sur le réseau kagome : calculs	140
4	Fondamentaux du Hamiltonien Heisenberg sur le réseau triangulaire	143
5	Fondamentaux du Hamiltonien Heisenberg sur le réseau hexagonal	143
6	Les facteurs de structure des états réguliers sur le réseau triangulaire	145
7	Les facteurs de structure des états réguliers sur le réseau hexagonal	145

B	Méthodes numériques	147
1	La méthode Wang-Landau	147
1.1	La méthode Monte Carlo	147
1.2	L'algorithme de Wang-Landau	148
2	La méthode Nelder-Mead	149
2.1	Quelques définitions	149
2.2	La méthode	149
2.3	L'algorithme	150
C	Les bosons de Schwinger en champ moyen	153
1	Réglage des λ_i , efficacité du simplexe	153
1.1	Unicité des λ_i respectant la contrainte	153
1.2	Méthode numérique de résolution	154
2	Réglage des A_{ij} et B_{ij}	154
2.1	Conséquence de l'autocohérence sur les dérivées de l'énergie	154
2.2	Borne supérieure au module des A_{ij} et B_{ij}	155
3	Expulsion du flux : conditions et limitations	156
3.1	Développement de Tchernyshyov	156
3.2	Développement en κ avec Dzyaloshinskii-Moriya	158
3.3	Brisure spontanée des symétries du réseau	158
4	Périodicité en θ du Hamiltonien utilisé en SBMFT pour DM	160
5	Certains Ansätze particuliers	161
5.1	Réseau triangulaire	161
5.2	Réseau kagome	161
6	L'approche large N	165
6.1	Etats cohérents	165
6.2	Fonction de partition : intégrale de chemin	166
6.3	Prise en compte des contraintes	167
6.4	Transformation de Hubbard-Stratonovich	167
6.5	Approximation large N, méthode du point selle	168
D	Liste des abréviations et définitions	171
	Bibliographie	173

Table des figures

1	Frustration sur un triangle AF	3
2	Exemples de réseaux frustrés pour une interaction AF	3
1.1	Etat fondamental classique sur les réseaux carré et triangulaire pour une interaction AF premiers voisins	10
1.2	Représentation de l'ordre par le désordre	11
1.3	Exemples de configuration sur une chaîne infinie de spins	12
1.4	Symétries du réseau triangulaire et kagome	14
1.5	Effet d'une symétrie du réseau sur un état régulier	15
1.6	Etats réguliers sur le réseau triangulaire	18
1.7	Etats réguliers sur le réseau kagome	19
1.8	Premiers, deuxièmes et troisièmes voisins sur le réseau kagome	22
1.9	Etats fondamentaux sur le réseau kagome pour le modèle $J_1 - J_2 - J_3 - J'_3$	23
1.10	Configurations à 6 sous-réseaux sur le kagome	25
1.11	Facteurs de structure des états réguliers du réseau kagome	26
1.12	Facteurs de structure de la Kapellasite et de la Volborthite	27
1.13	Connexité d'un espace topologique	31
1.14	Etat fondamental du modèle $J_1 - J_2$ sur kagome pour $J_1 < 0$ et $J_2 > -J_1/3$: l'état cuboc2	32
1.15	Diagramme de phase du modèle $J_1 - J_2$ sur kagome	33
1.16	Familles de boucles sur un réseau pour un modèle avec chiralité	33
1.17	Connexité simple d'un espace topologique	34
1.18	Premier groupe d'homotopie de SO_3	35
1.19	Densité de vortex et chiralité en fonction de la température sur le modèle kagome $J_1 - J_2$ avec fondamental cuboc2	36
1.20	Exemple de configuration du modèle Ising- $\mathbb{RP}_3$ sur un réseau carré	37
1.21	Calcul de la vorticité sur une plaquette carrée	39
1.22	Les vortex dans le modèle $\mathbb{RP}_3$ et Ising- $\mathbb{RP}_3$	40
1.23	Attraction des vortex par un mur de domaine	41
1.24	Définition de la vorticité d'un mur de domaine	41
1.25	Distribution des énergie à T_c pour le modèle Ising- $\mathbb{RP}_3$	42
2.1	Répartition du nombre de bosons sur un site du lien AF	77
2.2	Vecteurs de base des réseaux direct et réciproque du réseau triangulaire	81
2.3	Ansatz (0) sur le réseau triangulaire	82
2.4	Ansatz (π) sur le réseau triangulaire	83
2.5	Aimantation de l'Ansatz (π) sur le réseau triangulaire pour $\kappa > \kappa_c$	85
2.6	Ansatz ($\pi, 0$) sur le réseau kagome	85
2.7	Spectres de spinons et facteurs de structure pour différents κ	88
2.8	Zoom du facteur de structure d'une phase LRO	89
3.1	Invariance d'un Ansätze par une symétrie du réseau	93

3.2	Symétries du réseau kagome	96
3.3	Effet de la réflexion σ sur le flux d'un losange du réseau triangulaire	99
3.4	Réseau triangulaire périodique à 12 sites avec les Ansätze (0) et (π)	104
3.5	Corrélations entre spins pour différentes conditions aux limites	105
3.6	Lien entre visons et vortex	108
3.7	Ansatz $(\pi/3)$ sur le réseau triangulaire	111
3.8	Etat tétraédrique, obtenu en faisant condenser l'Ansatz $(\pm\pi/3)$	111
3.9	Flux autour d'un losange à huit côtés sur kagome	112
4.1	L'interaction Dzyaloshinskii-Moriya sur le réseau kagome	116
4.2	Symétries du réseau kagome avec DM	117
4.3	Les quatre Ansätze respectant les symétries du réseau kagome avec DM.	118
4.4	Energie du fondamental sur le réseau kagome avec DM en SBMFT	119
4.5	Diagramme de phases du réseau kagome AF avec DM en SBMFT	120
4.6	Spectres de spinons avec DM en SBMFT	120
4.7	Comparaison de facteurs de structure statiques	121
4.8	Symétries réduites du réseau kagome avec DM	122
4.9	Ansätze respectant des symétries réduites sur le réseau kagome.	124
4.10	Energie du développement en κ pour les Ansätze $(\phi, 0)$ et (ϕ, π)	125
4.11	Diagramme de phases du réseau kagome AF avec DM en SBMFT avec possibilité d'états chiraux	126
4.12	Spectre de spinons et de magnons d'un état chiral	126
4.13	Chiralité des états fondamentaux SBMFT sur kagome avec DM	127
A.1	Symétries des réseaux hexagonal et kagome	139
A.2	Etats réguliers sur le réseau hexagonal	141
A.3	Etats fondamentaux sur le réseau triangulaire pour le modèle $J_1 - J_2 - J_3$	144
A.4	Etats fondamentaux sur le réseau hexagonal pour le modèle $J_1 - J_2 - J_3$	144
A.5	Facteurs de structure des états réguliers du réseau triangulaire	145
A.6	Facteurs de structure des états réguliers du réseau hexagonal	145
B.1	Simplexes à une, deux et trois dimensions.	149
B.2	Exemple de trajectoire d'un simplex en 2D. Les lignes rouges-oranges sont des courbes de niveau.	150
B.3	Description de l'algorithme du simplex.	151
C.1	Exemple de réseau frustré pour les flux en A_{ij}	158
C.2	Réseau et interactions avec brisure spontanée de symétrie en SBMFT	159
C.3	Energies propres obtenues par diagonalisations exactes pour une interaction AF et DM premiers voisins sur de petits clusters	160
C.4	Ansatz (0) sur le réseau triangulaire	162
C.5	Ansatz (π) sur le réseau triangulaire	162
C.6	Ansatz $(0, 0)$ sur le réseau kagome	164
C.7	Ansatz $(\pi, 0)$ sur le réseau kagome	164
C.8	Ansatz $(0, \pi)$ sur le réseau kagome	165
C.9	Ansatz (π, π) sur le réseau kagome	165

Introduction

La découverte en 1986 de supraconductivité à haute température critique dans certains isolants de Mott (lorsqu'ils sont dopés [57]) a généré une explosion du nombre des réalisations expérimentales de systèmes magnétiques bi-dimensionnels et a renouvelé le besoin de nouvelles théories pour expliquer les résultats obtenus. La frustration des interactions magnétiques ouvre la possibilité de nouvelles phases, classiques et quantiques, qui feront l'objet de cette thèse.

Les isolants de Mott En physique du solide, la théorie des bandes permet de déterminer si un matériau cristallin est conducteur, semi-conducteur ou isolant : s'il possède une bande partiellement remplie, il est conducteur car une énergie infinitésimale suffit à déplacer un électron. Mais cette théorie très simple possède ses limites : certains matériaux théoriquement conducteurs se sont révélés isolants.

L'échec de la théorie des bandes pour ces matériaux a été expliqué par Mott en 1946 (qui écrivit une revue plus tard [79]) grâce à l'interaction coulombienne entre électrons de valence. Elle crée une répulsion importante entre les électrons et les localise principalement chacun autour d'un atome distinct. Le modèle de Hubbard avec un remplissage de $1/2$ (un électron par site) et des interactions entre plus proches voisins est le Hamiltonien prototype le plus simple pour décrire un isolant de Mott :

$$H_{Hub} = t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}, \quad (1)$$

où $c_i^\dagger$ est l'opérateur fermionique de création d'un électron de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ au site i . Le terme en t est un terme d'énergie cinétique, qui fait passer un électron sur un site voisin. Le terme en U ($U > 0$) est le terme de répulsion coulombienne qui défavorise les états possédant plusieurs électrons sur un même site.

Interactions effectives, modèle d'Heisenberg Reprenons le modèle de l'équation (1) pour un remplissage de $1/2$. Si $t = 0$, toute configuration avec exactement un électron sur chaque site est un état fondamental. Il y en a 2^{N_s} avec N_s , le nombre de sites du réseau (il reste la liberté de spin pour chacun des électrons). Le premier état excité est d'énergie U . Pour un t petit ($|t| \ll U$) la dégénérescence de l'état fondamental est levée, mais les 2^{N_s} états à un électron par site restent d'énergies beaucoup plus faibles que celles des autres états. Les propriétés de basse énergie du système vont donc dépendre exclusivement des interactions de spin. Pour obtenir un Hamiltonien fonction des opérateurs vectoriels de spin $\mathbf{S}_i$, on peut traiter le terme d'énergie cinétique par la théorie des perturbations, ce qui nous donne, au deuxième ordre en t et dans le sous-espace de dimension 2^{N_s} le modèle de Heisenberg antiferromagnétique (AF) suivant :

$$H = \frac{4t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (2)$$

En prenant en compte le champ cristallin, en allant à des ordres supérieurs, ou encore en considérant le couplage spin-orbite, ce Hamiltonien minimal peut être modifié par :

- des anisotropies spatiales [55],
- des anisotropies de spin (un cas extrême est le modèle d’Ising),
- des interactions seconds, troisièmes, ...voisins ([16], [10]),
- des interactions Dzyaloshinskii-Moriya [27] [28] (dont l’effet sur le fondamental du réseau kagome sera étudié dans une partie de cette thèse),
- des échanges à plus de deux spins (4 spins [18], 6 spins, ...),
- des termes biquadratiques [54] ($\propto (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2$) favorisant des phases nématiques.

Malgré l’apparente simplicité du Hamiltonien (2), on ne connaît pas exactement son fondamental même sur un réseau aussi simple que le réseau carré. Diverses méthodes (Monte-Carlo [11], méthode des perturbations [41], méthodes variationnelles [42], [58]) suggèrent qu’il est dans une phase ordonnée, avec des corrélations à longue portée, c’est à dire que l’état fondamental à deux sous-réseaux de spins opposés obtenu classiquement est habillé par les fluctuations quantiques. Ces fluctuations renormalisent le paramètre d’ordre, ici l’aimantation alternée, d’un facteur ~ 0.6 [100]. Il en est de même sur d’autres réseaux (hexagonal [31], triangulaire [6]), avec d’autres valeurs du facteur de renormalisation, dépendant de la frustration. Plus la frustration sera importante, plus l’aimantation sera diminuée par les fluctuations quantiques.

La frustration Elle se définit comme l’impossibilité de minimiser ensemble tous les termes de l’énergie totale. L’exemple le plus simple et le plus souvent utilisé de frustration est celui de la Fig.1 : un triangle AF avec des spins classiques Heisenberg, où la configuration d’énergie minimale est celle où les spins sont coplanaires et pointent vers les sommets d’un triangle équilatéral. Malgré la simplicité de cette définition de la frustration, elle se révèle ambiguë dans certaines situations :

- un modèle peut ne pas être frustré classiquement et l’être quantiquement. Par exemple, le réseau carré AF est classiquement non frustré. Quantiquement, il l’est : l’énergie sur un lien est minimisée par une configuration singulet alors que l’on ne peut pas mettre simultanément quatre singulets sur les liens partant d’un site. C’est ce qui différencie le réseau carré AF de son équivalent F et cause la renormalisation de l’aimantation classique par les fluctuations quantiques.
- un système peut être frustré ou non selon la façon dont on écrit le Hamiltonien. Le réseau triangulaire AF (Hamiltonien (2)) est frustré au niveau classique : dans le fondamental, tous les spins sont coplanaires et forment des angles de 120° entre voisins, qui ne minimisent pas l’énergie de lien $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$. Si l’on réécrit le Hamiltonien (à des constantes additives et multiplicatives près) comme la somme suivante sur tous les triangles élémentaires :

$$H = \sum_{\Delta} (\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j + \mathbf{S}_k)^2, \quad (3)$$

alors, le système devient non frustré selon notre définition.

- Sur le réseau triangulaire, qui peut être perçu comme non frustré, un nombre fixé de paramètres (trois angles, contre deux pour le réseau carré) suffisent à caractériser complètement un état fondamental. La frustration est parfois caractérisée par la dégénérescence macroscopique de l’état fondamental classique, qui est alors fonction de la taille du réseau. C’est notamment le cas des modèles AF sur des réseaux composés de triangles ou de tétraèdres à sommets partagés, entre autres les réseaux kagome [14] (2D) et pyrochlore [88] (3D), représentés Fig.2.

La dégénérescence macroscopique est (parfois partiellement) levée par le phénomène d’ordre par le désordre, décrit par Villain [103]. Classiquement, ce phénomène entropique se

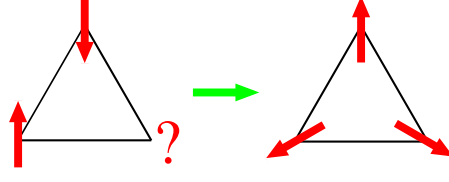


FIG. 1 – Frustration sur un triangle AF avec des spins classiques Heisenberg. Si l'on minimise l'énergie sur un lien, comme à gauche, alors, on ne peut pas placer le troisième spin en minimisant simultanément les énergies des deux liens restants. Le meilleur compromis est la configuration de droite avec des spins à 120° les uns des autres. En effet, à une constante près, l'énergie est $(\sum_{i=1}^3 \mathbf{S}_i)^2$.

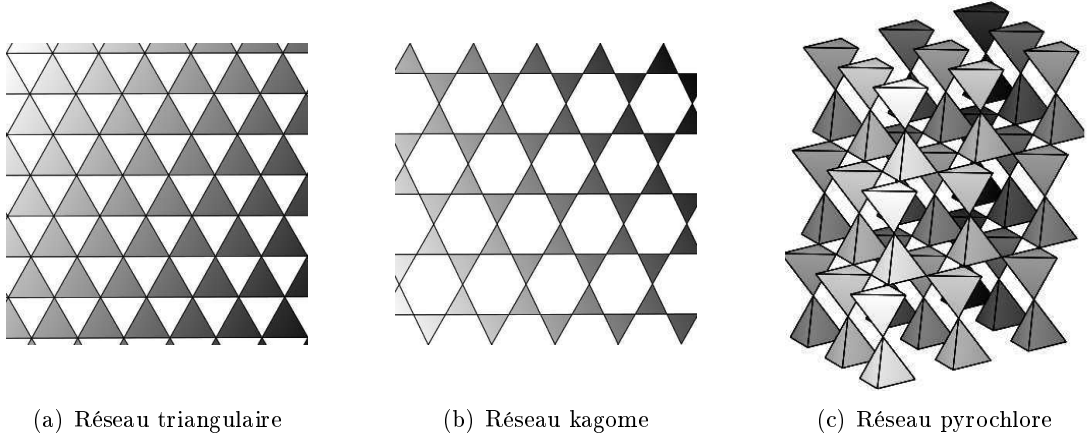


FIG. 2 – Exemples de réseaux frustrés pour une interaction AF premiers voisins. A gauche, le réseau triangulaire, avec une géométrie triangulaire à côtés partagés. Au milieu, le réseau kagome et à droite, le réseau pyrochlore. Ces deux réseaux possèdent des géométries à sommet partagés, générant une dégénérescence macroscopique du fondamental.

produit à très basse température et découle des fluctuations autour des états fondamentaux. Quantiquement, l'ordre par le désordre désigne plutôt un effet déjà présent à température nulle, provenant de l'abaissement de l'énergie par résonnances entre états.

Sur le réseau kagome AF classique, la dégénérescence macroscopique a été étudiée grâce à des développements hautes températures [35], [89] et à des simulations Monte-Carlo [89], [14] [118]. Quantiquement, l'état fondamental de ce modèle est toujours sujet à de nombreux débats. Même s'il est maintenant quasiment certain qu'aucun ordre magnétique à longue portée n'est le fondamental, des études en ondes de spins tendent à favoriser l'ordre $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ [35], alors que les résultats de diagonalisations exactes sont plus cohérents avec des corrélations à courte portée $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ [53] [46].

Chiralité et vortex de modèles classiques On a vu sur le passage du réseau carré au réseau triangulaire que la frustration influait sur le paramètre d'ordre classique : d'une configuration colinéaire caractérisée par un point de la sphère $\mathcal{S}_2$, on passe à une configuration coplanaire caractérisée par une rotation de SO_3 . Cette modification n'est pas anodine car la topologie de l'espace du paramètre d'ordre a été modifiée. On peut former des boucles non contractibles dans SO_3 , ce qui montre l'existence de défauts topologiques appelées vortex (pour une revue sur les défauts topologiques, voir [64]). L'importance de

ces excitations est généralement connue grâce à la transition de Kosterlitz-Thouless [51] (KT) entre une phase où les vortex sont liés et une phase où ils sont libres. Mais la nature des vortex est différente dans ces deux situations. Dans la transition KT, les vortex ont une charge topologique appartenant au groupe $\mathbb{Z}$, alors que pour un paramètre d'ordre SO_3 , la charge est $\mathbb{Z}_2$. Plusieurs auteurs ([48], [47], [23], [114], [9]) ont étudié l'effet de ces vortex $\mathbb{Z}_2$ et la possibilité d'une transition analogue à la transition KT. Mais jusqu'à présent, une éventuelle transition reste difficile à mettre en évidence : si la transition KT sépare une phase avec des corrélations algébriques d'une phase avec des corrélations exponentielles, la transition des vortex $\mathbb{Z}_2$, elle, séparerait deux phases possédant toutes les deux des corrélations exponentielles. La question de l'existence ou non d'une transition ne sera pas abordée dans cette thèse, dans laquelle nous allons plutôt montrer l'importance de ces excitations en présence de chiralité.

La frustration permet de passer de fondamentaux colinéaires à des fondamentaux coplanaires. L'étape suivante est d'arriver à des états non coplanaires. Elle a été franchie seulement dans de très rares situations : d'abord, sur le réseau triangulaire avec échange à quatre corps [50] [52], puis sur le réseau kagome avec interactions Heisenberg premiers et seconds voisins [26]. Le paramètre d'ordre passe de SO_3 à O_3 : un paramètre ± 1 supplémentaire est nécessaire pour fixer l'état fondamental. Ce paramètre discret, appelé chiralité, peut prendre une valeur moyenne non nulle à température finie sans contredire le théorème de Mermin-Wagner [65], générant une transition de phase chirale [76], [26] du second ordre ou faiblement du premier ordre.

Les états classiques non coplanaires seront l'objet de la première partie de cette thèse. Le nouveau type de transition dont ils sont le siège, mélangeant des degrés de libertés continus (des spins Heisenberg), discrets (la chiralité) et des excitations topologiques (vortex $\mathbb{Z}_2$) n'a encore jamais été étudié auparavant et nous mettrons en évidence des particularités intéressantes de ces systèmes.

Phases quantiques Dans un système quantique, l'aimantation est réduite par les fluctuations, comparativement au cas classique, d'autant plus fortement que le système est frustré. Dans le cas extrême, l'aimantation s'annule et l'état fondamental ne possède plus d'ordre à longue portée, comme c'est le cas sur le réseau kagome AF [105] [117]. De nombreuses phases sans brisure de la symétrie de rotation des spins ont été découvertes, dont voici quelques exemples.

Les cristaux de liens de valence (VBC) peuvent briser certaines symétries du réseau et sont une extension à des dimensions supérieures de la phase obtenue sur la chaîne de Majumdar-Gosh [60]. Ils possèdent des excitations avec un gap et des corrélations de liens singulets à longue portée. Le modèle de dimères quantiques de Rokhsar et Kivelson [91] n'est pas un modèle de spins, mais par analogie entre dimères et liens singulets, on obtient des phases VBC sur une partie du diagramme de phase. Des fondamentaux VBC ont été trouvés, par exemple sur le réseau hexagonal [30] et une telle phase a été proposée comme fondamental du réseau kagome AF [97] par Singh et Huse. La dégénérescence d'un VBC est liée au nombre de symétries brisées dans l'état fondamental.

Les liquides de spins (SL) ne brisent aucune symétrie et se caractérisent par des excitations fractionnaires déconfinées, appelées spinons, de spin $S = 1/2$ [80] (alors qu'une excitation élémentaire de phase ordonnée, comme le retournement d'un spin, est une excitation de $\Delta S = 1$). Les SL se divisent en deux familles : les liquides de spins topologiques (TSL) et les liquides de spin algébriques (ASL). Les premiers possèdent des excitations avec un gap et une dégénérescence topologique [71] (comme par exemple, le modèle de dimères quantiques sur le réseau triangulaire [75]). Les seconds ont des excitations non gappées [112] [36] [37].

Une phase possédant toutes les caractéristiques d'un liquide de spins mais brisant la symétrie par renversement du temps sera un liquide de spins chiral (topologique ou algébrique), caractérisé par sa chiralité ou d'autres quantités équivalentes [113] [34].

Caractériser un SL par l'absence de brisure spontanée de symétrie est insuffisant : il existe des VBC dits *explicites* (par opposition aux VBC *spontanés*) ne brisant aucune symétrie du réseau¹. Un VBC se distingue d'un SL par ses corrélations dimères-dimères et surtout par sa dégénérescence conventionnelle, dépendant des symétries du Hamiltonien, alors qu'un SL possède une dégénérescence dite topologique.

Toutes ces phases quantiques sont encore mal comprises, comme par exemple (i) la raison de la grande densité d'excitations de spin 0 de basse énergie sur le réseau kagome AF [105], (ii) la statistique des excitations fractionnaires : bosonique, fermionique ou anyonique [116], ... La raison en est en partie le peu de techniques à notre disposition pour les étudier. En effet, contrairement au cas classique, où l'on peut toujours faire des mesures grâce à des simulations Monte-Carlo (on est limité exclusivement par la puissance des ordinateurs), ce n'est pas le cas pour des systèmes quantiques, sauf cas particuliers (sur des réseaux bipartites par exemple) à cause du *problème de signe*. Les diagonalisations exactes (ED, [73]) permettent d'obtenir très précisément le bas du spectre, mais la taille des réseaux reste limitée par la mémoire des ordinateurs : un nombre de sites $N_s \sim 40$ est la limite supérieure actuelle. Les approximations large- N sont des approches complémentaires très intéressantes.

Les bosons de Schwinger en champ moyen Les approches large- N ont été introduites par Affleck et Marston [2] avec une décomposition fermionique des opérateurs de spin, et étendue par Arovas et Auerbach [3] à des opérateurs bosoniques. Elles consistent à élargir la symétrie SU_2 des spins en chaque site à SU_N : le nombre de *couleurs* de bosons passe alors de 2 à N . Read et Sachdev ont utilisé l'élargissement au groupe Sp_N [87], qui permet d'utiliser la technique de la décomposition bosonique sur tout type de réseau. C'est cette méthode qui sera au centre de la partie quantique de cette thèse.

Pour $N \rightarrow \infty$, on sait (en théorie) résoudre exactement un modèle SU_N ou Sp_N . On peut corriger l'état avec des développements en $1/N$ (calcul effectué par exemple en [101], la marche à suivre est expliquée dans [4]). Sans aucune correction, l'état obtenu à large N nous fournit une solution de champ moyen d'un modèle à N fini, d'où le nom de théorie des bosons de Schwinger en champ moyen (SBMFT).

Le champ moyen s'effectue dans un espace de Hilbert élargi : le spin sur chaque site fluctue et c'est sa moyenne qui est fixée, grâce à un paramètre continu κ qui permet en quelque sorte de faire varier continûment la valeur du spin sur site. Contrairement à son équivalent fermionique qui donne des états fondamentaux principalement dimérisés [90], la SBMFT donne accès à la fois à des phases possédant des corrélations de spins à longue portée et à des phases désordonnées. En faisant varier κ , on peut passer d'une phase à l'autre. La distinction entre ces deux types de phases n'est réelle qu'à la limite thermodynamique, où les bosons condensent dans un mode de spinons si les spins s'ordonnent. Nous verrons comment les différencier grâce aux effets de taille finie et comment retrouver la limite classique lorsque κ tend vers l'infini.

L'espace des paramètres de champ moyen est gigantesque : il faut un paramètre complexe par lien ij du réseau, ce qui a poussé les personnes utilisant cette technique à faire des suppositions sur l'état de champ moyen. Sachdev [92] s'est limité aux Ansätze dérivés d'ordres classiques fondamentaux dans son étude du réseau kagome AF. Plus tard, Wang et Vishwanath [108] ont recherché tous les états respectant les symétries du réseau, in-

¹Ces deux types de VBC peuvent cependant avoir des propriétés différentes. Par exemple, en 1D, les spinons sont confinés ou déconfinés selon le cas.

dépendamment de toute considération énergétique. Pour cela, ils ont utilisé la technique des groupes des symétries projectives de Wen [112], étendue des systèmes fermioniques aux systèmes bosoniques, qui prend en compte l'invariance des observables physiques lors d'un changement de jauge U_1 . Tous les états obtenus ont exactement les mêmes symétries. Ils se distinguent uniquement par des quantités invariantes de jauge : les flux.

Dans cette thèse, nous allons essayer de poser sur la SBMFT un regard objectif et de proposer des outils pour répondre aux questions sur les liquides de spins par l'intermédiaire de cette méthode. Les groupes de symétrie projectifs de Wen nous permettent de classer différents liquides de spins selon leurs flux, mais que représentent physiquement ces quantités ? Ont-elles un sens en dehors de la théorie de champ moyen ? Conservent-elles un sens lorsqu'on augmente continûment la valeur de κ jusqu'à atteindre la limite classique ? Nous répondrons par l'affirmative à ces questions.

La possibilité de faire varier continûment κ est une grande richesse de la SBMFT. Sachdev a utilisé cette caractéristique pour établir des liens entre les phases ordonnées et désordonnées reliées par une transition de phase continue [93]. Il fait ainsi correspondre les phases ordonnées colinéaires avec les VBC et les phases non colinéaires avec les TSL, ce qui permet de faire l'analogie entre visons et vortex $\mathbb{Z}_2$, que l'on rencontre dans les deux dernières phases. Les visons [94] sont des excitations créées par paires, portant une charge topologique $\mathbb{Z}_2$, responsables de la dégénérescence topologique des TSL : un vison qui parcourt une boucle non triviale sur le réseau avant de s'annihiler avec son vison partenaire change le secteur topologique de la fonction d'onde.

Nous allons, nous aussi, utiliser le paramètre κ pour faire des parallèles entre phases ordonnées et désordonnées en SBMFT, mais en possédant des outils supplémentaires : les PSG et les flux. De plus, nous disposerons des résultats obtenus dans la première partie de la thèse sur des modèles de spins classiques : états éguliers, chiralité et vortex $\mathbf{Z}_2$.

Nous constaterons qu'un type de phase n'a pas encore été exploré en SBMFT : les liquides de spins topologiques chiraux. En effet, les PSG utilisés jusqu'ici ne permettaient pas la brisure de symétrie par renversement du temps T , mais un élargissement de la définition des PSG permet d'obtenir des phases la brisant. Peu de modèles de spins possèdent une brisure spontanée de T . Wen *et al.* [113] et Haldane *et al.* [34] ont étudié leur caractérisation. Nous nous aiderons de la limite classique pour proposer des modèles où ces phases ont de grandes chances d'être présentes.

Plan de la thèse

- La première partie concerne l'étude de systèmes classiques. D'abord, une méthode permettant de déterminer tous les états classiques respectant les symétries du réseau sera décrite. Elle nous mènera à considérer des états fondamentaux non coplanaires, possédant de la chiralité et des vortex $\mathbf{Z}_2$. La transition chirale s'accompagne d'une brusque augmentation de la densité de vortex, qui sera expliquée. En fonction des interactions, la transition sera classée comme étant du premier ordre ou appartenant à la classe d'universalité d'Ising.
- Dans une deuxième partie, la méthode générale de la théorie des bosons de Schwinger en champ moyen (SBMFT) sera revue. Le formalisme y sera expliqué, avec notamment l'invariance de jauge locale U_1 . Puis, on passera à l'approche de champ moyen. L'inconvénient principal du champ moyen est d'induire des fluctuations du nombre de bosons sur site, dont l'effet sur le calcul de valeurs moyennes est détaillé. Enfin, la brisure de symétrie par rotation des spins d'un système à la limite thermodynamique sera étudiée.
- La troisième partie sera consacrée à des quantités invariantes de jauge en SBMFT :

les flux. Après la description de la méthode permettant d'imposer des symétries spatiales à un Ansatz de champ moyen (autrement dit, à ses flux), nous verrons comment ces flux permettent de classifier les différents liquides de spins. L'expression du flux sous la forme d'un opérateur de spin sera donnée, ainsi que la signification du flux dans la limite classique. La compréhension de cette quantité nous permettra de retrouver les états du premier chapitre grâce à la relaxation de certaines contraintes de symétrie. Les Ansätze obtenus par cette méthode donnent accès à des liquides de spins chiraux, qui pourraient être les états fondamentaux de Hamiltoniens pour lesquels l'état classique est lui-même chiral.

- Enfin, en quatrième partie, nous appliquerons la SBMFT au réseau kagome AF, perturbé par une interaction Dzyaloshinskii-Moriya. Nous obtiendrons le diagramme de phase en champ moyen et calculerons les facteurs de structure statiques et dynamiques en différents points de ce diagramme. Ce diagramme comporte une phase chirale.

Chapitre 1

Les ordres à longue portée classiques, existence de phases non coplanaires

Lorsque l'on cherche l'état fondamental d'un réseau de spins S en interaction, le premier réflexe est de se placer dans la limite classique, c'est à dire la limite $S \rightarrow \infty$ pour laquelle on néglige la non-commutativité des composantes de l'opérateur de spin ¹. Un état classique est alors décrit par un vecteur unitaire à trois composantes $\mathbf{S}_i$ (spin Heisenberg) en chaque site i du réseau : $\mathbf{S}_i \in \mathcal{S}_2$. Dans certaines situations, les directions des spins sont fortement contraintes. Elles peuvent par exemple être limitées à un plan (spins XY : $\mathbf{S}_i \in \mathcal{S}_1$), où encore, à un nombre fini d'orientations (modèle de Potts : $\mathbf{S}_i \in \mathbb{Z}_p$, dont le cas particulier du modèle d'Ising $p = 2$ est bien connu). Nous allons nous limiter aux spins Heisenberg, prenant leurs valeurs sur la surface de la sphère à 3 dimensions $\mathcal{S}_2$.

La limite classique simplifie grandement la recherche du fondamental d'un système. Prenons l'exemple du Hamiltonien de Heisenberg antiferromagnétique (AF) premiers voisins :

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (1.1)$$

Alors que l'on ne connaît pas exactement ses états fondamentaux quantiques sur les réseaux carré, triangulaire ou kagomé, ses états fondamentaux classiques sont relativement simples :

- Le réseau carré n'est pas frustré : on peut le diviser en deux sous-réseaux A et B tels que le spin d'un site A n'interagit qu'avec des spins B et vice-versa. L'ordre est donc AF, les spins des sous-réseaux A et B sont colinéaires et opposés (Fig.1.1(a)). Pour décrire un fondamental, deux paramètres sont nécessaires (par exemple, les angles latitude et longitude donnant l'orientation d'un spin). L'ensemble des fondamentaux est en bijection avec $\mathcal{S}_2 \sim SO_3/SO_2$, où SO_n est le groupe des rotations à n dimensions.
- Le réseau triangulaire est frustré : on ne peut pas le diviser en deux sous-réseaux comme précédemment. Sur chaque triangle, l'énergie est minimisée en orientant les trois spins à 120 degrés les uns des autres (ils sont donc dans un plan). Une fois que les spins d'un triangle sont choisis, on peut remplir les sites du réseau de proche en proche pour que l'énergie sur chaque triangle soit minimale. Le fondamental possède ainsi trois sous-réseaux (Fig.1.1(b)). Les trois directions de spin associées sont coplanaires.

¹Cette limite se justifie simplement en disant que le commutateur de deux composantes du spin est en $\mathcal{O}(S)$ (par exemple $[S_x, S_y] = iS_z$), ce qui est négligeable devant S^2 lorsque S tend vers l'infini. Plus rigoureusement, elle se justifie grâce aux états cohérents de spin, qui forment une base surcomplète de l'espace des spins, en bijection avec la sphère $\mathcal{S}_2$. Le recouvrement de deux états cohérents distincts tend vers 0 lorsque $S \rightarrow \infty$. Par conséquent, dans cette limite, l'effet des superposition quantiques d'états est inexistant : les fluctuations quantiques sont nulles.

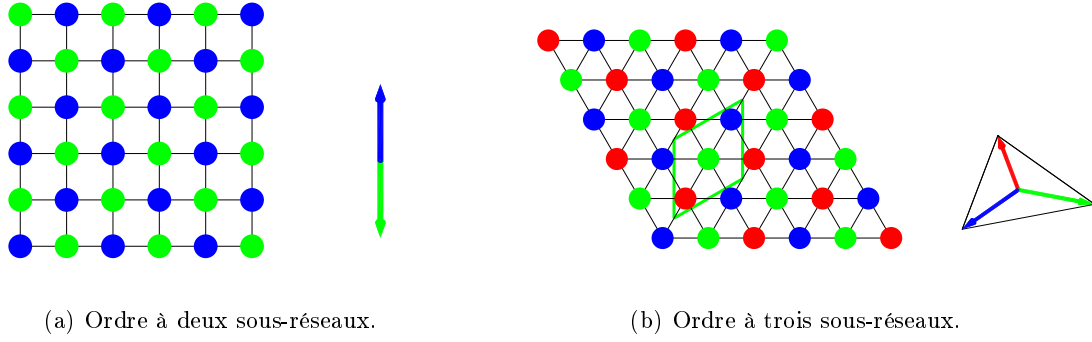


FIG. 1.1 – Etat fondamental classique sur les réseaux carré et triangulaire pour une interaction AF premiers voisins (Hamiltonien 1.1). L'orientation d'un spin est celle du vecteur de la couleur de son site.

Pour décrire un fondamental, trois paramètres sont nécessaires (deux pour définir la direction perpendiculaire aux spins, et le dernier pour indiquer l'angle de l'un des spins dans le plan). L'ensemble des fondamentaux est en bijection avec SO_3 .

- Enfin, le réseau kagomé, pouvant être considéré comme un réseau triangulaire auquel il manque un quart des sites, est lui aussi frustré. Il faut là aussi minimiser l'énergie sur chacun des triangles, mais à cause des sites manquants au milieu des hexagones, on n'a plus une unique façon de remplir le réseau de proche en proche après le choix de l'orientation des spins sur un premier triangle. Il y en a en fait une infinité. L'entropie à température nulle (en supposant qu'elle est définie avec des degrés de liberté continus) évolue comme le nombre de sites du réseau alors qu'elle en était indépendante pour les modèles précédents. Il faut cette fois une infinité de paramètres pour décrire un fondamental sur un réseau infini.

Au moins l'un des états fondamentaux de chacun de ces trois modèles possède des spins tous coplanaires. Sur le réseau triangulaire, tous les états fondamentaux sont coplanaires. Pour le réseau kagomé, les fondamentaux coplanaires sont dégénérés avec de nombreux autres non coplanaires. Ils sont éliminés si l'on prend en compte le phénomène d'ordre par le désordre. Ce phénomène est un effet entropique de très basse température qui sélectionne les états fondamentaux possédant la plus grande quantité d'états d'énergie proche (Villain *et al.*, [104], voir Fig.1.2). Dans le cas du kagome, il reste cependant encore une infinité d'états coplanaires fondamentaux. Ajouter une faible interaction seconds voisins lève complètement la dégénérescence : ce modèle sur kagome est un point critique (mais nous verrons d'autres modèles pour lesquels l'ordre par le désordre permet de lever complètement la dégénérescence). En fonction du signe du couplage seconds voisins, l'état fondamental est celui dénommé $\sqrt{3}\sqrt{3}$ ou le $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, que nous décrirons ultérieurement.

On pourrait alors conclure un peu rapidement qu'il existe toujours un état fondamental coplaire (et éventuellement d'autres états de même énergie, coplanaires ou non), ce qui est souvent pris comme hypothèse dans la littérature. Une partie de ces états coplanaires se trouve dans l'ensemble des états spiraux, caractérisés par un vecteur d'onde $\mathbf{Q}$, dont l'orientation d'un spin à la position $\mathbf{x}$ sur le réseau est décrite par

$$\mathbf{S}_{\mathbf{x}} = \cos(\mathbf{Q}\mathbf{x})\mathbf{u} + \sin(\mathbf{Q}\mathbf{x})\mathbf{v}, \quad (1.2)$$

avec $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$, deux vecteurs unitaires perpendiculaires. Mais l'hypothèse de coplanarité est erronée, comme le prouve le modèle $J_1 - J_2$ sur kagome (interaction premiers et seconds

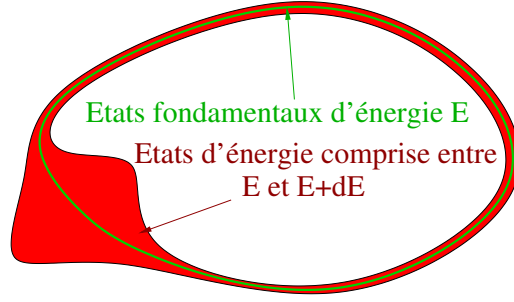


FIG. 1.2 – Représentation de l'ordre par le désordre. L'aire des différentes surfaces est proportionnelle à la densité d'états. A très basse température, l'énergie du système va fluctuer dans une gamme d'énergie $[E, E + dE]$. C'est dans la zone où les fluctuations de faible énergie vont permettre l'accès au maximum d'états que le système aura le plus de probabilité de se trouver (dans le renflement de la zone rouge).

voisins) pour lequel un ordre de Néel² à 12 sous-réseaux a été mis en évidence par Domenge *et al.*, [26], ainsi que le modèle à échange multiple sur le triangulaire (Kubo et Momoi, [52]), avec un ordre tétraédrique à 4 sous-réseaux.

Bien que tous les fondamentaux obtenus jusqu'alors brisent (au moins partiellement) l'invariance par rotation globale des spins, ils ont tout de même une certaine régularité, au sens où, si l'on se place sur un site et que l'on regarde dans la direction du spin qui s'y trouve, les spins environnants vont former un paysage similaire à celui de n'importe quel autre site. Cela reste vrai dans une certaine limite pour les états spiraux. Dans la première section de ce chapitre, nous allons formaliser cette notion de régularité d'un état de spins et expliquerons la manière de trouver tous les états respectant une régularité spécifique. Plusieurs exemples seront présentés, ainsi que des applications de cette méthode.

Lorsque le Hamiltonien respecte la symétrie par retournement des spins ($\mathbf{S}_i \rightarrow -\mathbf{S}_i$), l'existence d'états fondamentaux dans lesquels les spins ne sont pas coplanaires a des conséquences importantes sur la topologie de l'ensemble des fondamentaux, car chaque fondamental possède une chiralité ± 1 . Ce paramètre rappelle l'aimantation du fondamental du modèle d'Ising ferromagnétique (F), qui donne lieu à une transition du second ordre (dans la classe d'universalité d'Ising) entre une phase aimantée à basse température et désordonnée à haute température. La chiralité donne elle aussi lieu à une transition, mais sa classe d'universalité peut être modifiée par la présence d'ingrédients supplémentaires au modèle d'Ising :

- Les spins sont continus. Des oscillations infinitésimales des spins ont une énergie infiniment faible, ce qui est le signe de la présence de modes de Goldstone, ou ondes de spins.
- La topologie du paramètre d'ordre, en plus de présenter une chiralité, peut permettre l'existence de défauts ponctuels, ou vortex.

Dans la seconde section de ce chapitre, nous détaillerons cette transition sur l'exemple du modèle $J_1 - J_2$ sur kagome, puis sur un modèle simplifié que nous présenterons. L'ordre de la transition sera étudié, ainsi que l'influence des vortex sur celle-ci.

²Un état de Néel est à l'origine un état possédant une maille de deux sites avec des spins opposées. Mais le terme a été étendu à tout état possédant une maille avec un nombre fini de sites, chacun ayant son orientation de spin.

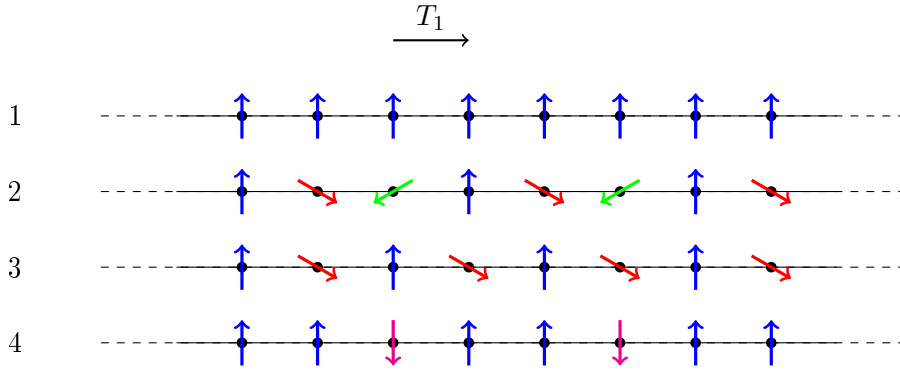


FIG. 1.3 – Exemples de configuration sur une chaîne infinie de spins Heisenberg. Les configurations 1, 2 et 3 sont régulières pour la translation T_1 , mais pas la 4.

1 Les états classiques ordonnés : régularité, intérêt

Dans cette section, nous allons définir rigoureusement la *régularité* d'une configuration de spins classiques, définition dépendant des symétries du Hamiltonien. Parmi ces symétries, un sous-groupe va focaliser notre attention : celui des symétries du réseau S_R . Pour avoir un rapide aperçu de ce qu'est la régularité d'un état, prenons l'exemple d'une chaîne infinie de spins Heisenberg dont les interactions sont invariantes par translation T_1 d'un cran et par rotation globale des spins ou inversion globale des spins. Plusieurs configurations sont représentées sur la Fig.1.3. Seule la configuration 1, où tous les spins sont orientés dans la même direction est invariante par T_1 . La notion de régularité par rapport à T_1 est moins restrictive que celle d'invariance. La configuration 2 ou 3 est régulière car aucun site ne se distingue de ses voisins, contrairement à la configuration 4. Comment cette régularité se traduit-elle mathématiquement ? Tout simplement par le fait que la translation T_1 a exactement le même effet sur la configuration 2 ou 3 qu'une transformation globale des spins, ce qui n'est pas le cas pour 4. Nous allons montrer comment formaliser cette définition de la régularité et comment l'utiliser pour trouver de façon exhaustive tous les états réguliers d'un Hamiltonien sur un réseau.

On peut se demander l'utilité d'un tel inventaire ! L'une des réponses est qu'aucune méthode exacte ne permet de trouver les fondamentaux classiques d'un Hamiltonien, exceptés dans des cas particuliers, lorsque les réseaux et les Hamiltoniens sont simples. Une des méthodes fréquemment utilisées est la simulation Monte Carlo, qui possède plusieurs limitations :

- son résultat peut être un minimum local d'énergie et non global,
- les conditions aux limites (souvent périodiques) peuvent frustrer l'ordre du réseau infini,
- enfin, elle ne sert qu'à un ensemble des paramètres du Hamiltonien fixé, ce qui oblige à effectuer de nombreuses simulations pour tracer un diagramme de phases.

Les états réguliers fournissent un ensemble d'états candidats au fondamental qui ont un grand intérêt. En effet, par symétrie, on peut déduire pour certains de ces états qu'ils sont des états stationnaires en énergie (soit un minimum local, soit un maximum local, soit un point selle). De plus, on constate empiriquement que les états fondamentaux de nombreux systèmes ont une certaine régularité.

Une autre réponse à la question de l'utilité de l'inventaire provient de la remarque suivante : pour le réaliser, on n'a utilisé aucune considération énergétique mais uniquement des considérations de symétrie du système. Or, on ne connaît en général pas le Hamiltonien

d'un composé qui vient d'être synthétisé, ou alors, de manière très approximative. Il peut comporter des composantes faibles qui peuvent modifier complètement la structure de l'état fondamental. Mais on connaît ses symétries. Les quantités auxquelles on a accès sont des mesures expérimentales, comme par exemple les facteurs de structure. On peut alors les comparer à celles des états de l'inventaire obtenu grâce aux symétries du réseau et identifier un ordre candidat. Reste ensuite à identifier un Hamiltonien favorisant cet ordre et à en vérifier la compatibilité avec la chimie du composé.

1.1 Symétries d'un état de spins

Notations et définitions

On se place sur un réseau nommé R , constitué de sites i sur chacun desquels se trouve un spin classique $\mathbf{S}_i$, vecteur à n dimensions. Une configuration (ou état) est une application c qui associe un spin à chaque site du réseau :

$$\begin{aligned} c : R &\rightarrow \mathcal{S}_n \\ i &\mapsto \mathbf{S}_i \end{aligned} \quad (1.3)$$

L'ensemble des configurations est noté C . Connaissant le Hamiltonien H du problème, on peut associer une énergie à chaque configuration de spins sur le réseau. Mais ici, on ne va pas s'intéresser à un Hamiltonien spécifique. Ce sont seulement ses symétries S_H (transformations de $C \rightarrow C$ ne modifiant pas l'énergie) qui vont nous intéresser, qui découlent des symétries du crystal que l'on considère. Elles sont donc accessibles même lorsque l'on n'a aucune idée des interactions auxquelles sont soumis les spins. Le groupe S_H possède entre autres deux sous-groupes qui vont nous intéresser : S_R , les symétries du réseau et S_S , les symétries des spins. Ces deux groupes sont constitués des éléments de S_H agissant uniquement sur les positions des spins pour S_R , uniquement sur leur orientation pour S_S . A chaque élément de S_R , on identifie la transformation de $R \rightarrow R$ correspondante, et à chaque élément de S_S , la transformation de $\mathcal{S}_n \rightarrow \mathcal{S}_n$ correspondante

$$\forall f \in S_R, \forall c \in C, \quad f(c) : i \mapsto \mathbf{S}_{f(i)}, \quad (1.4)$$

$$\forall g \in S_S, \forall c \in C, \quad g(c) : i \mapsto g(\mathbf{S}_i), \quad (1.5)$$

Dans la cadre de cette section, on se limite au cas où $S_H = S_S \times S_R$: toute symétrie du Hamiltonien est factorisable en une transformation agissant uniquement sur la direction des spins et une transformation agissant uniquement sur leur position³.

Pour une configuration de spins donnée, on définit le *groupe des symétries de l'état* S_e comme le *sous-groupe de S_H laissant l'état invariant*. Ce sous-groupe caractérise les propriétés physiques de l'état. Nous allons en étudier un exemple sur le réseau triangulaire.

Exemple du réseau triangulaire

Prenons l'exemple du réseau triangulaire à deux dimensions, avec des spins Heisenberg et avec des interactions telles que S_R possède toutes les symétries du réseau triangulaire et S_S toutes les symétries de la sphère $\mathcal{S}_2$ conservant les angles. S_S est isomorphe à O_3 . S_R est engendré par quatre transformations : deux translations T_1 et T_2 , une rotation R_6 de $\frac{\pi}{3}$ autour d'un site du réseau et une réflexion σ (Fig.1.4). On est bien dans un cas où $S_H = S_S \times S_R$.

³Mais ce n'est pas toujours le cas, par exemple, $S_H \neq S_S \times S_R$ dans le cas où l'on applique un champ magnétique alterné sur deux sous-réseaux du réseau carré. La translation le long du côté d'un carré n'est pas dans S_R , l'inversion des spins n'est pas dans S_S , mais la composition des deux est dans S_H . Dans ce cas, il suffit de remplacer S_R par S_H/S_S pour pouvoir utiliser ce qui suit.

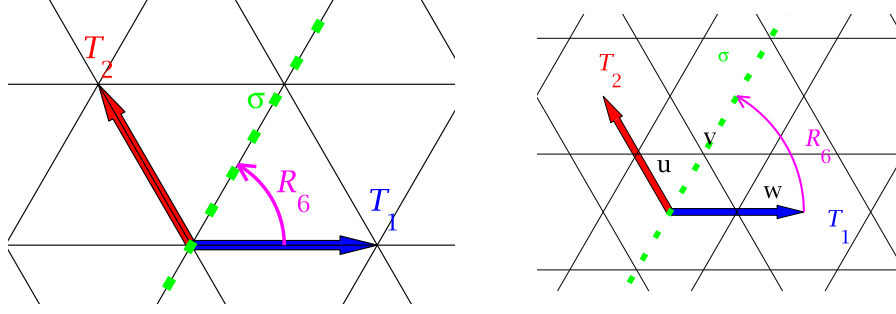


FIG. 1.4 – Symétries du réseau triangulaire et kagome. Des générateurs des symétries du réseau S_R sont représentés : les deux translations T_1 et T_2 , la rotation R_6 et la réflexion σ .

On décrit les coordonnées d'un point dans le repère formé des deux vecteurs de base $\mathbf{T}_1$ et $\mathbf{T}_2$ (Fig.1.4) et ayant pour origine l'un des sites. L'effet des générateurs définis ci-dessus sur les coordonnées est

$$\begin{aligned} T_1 : (r_1, r_2) &\mapsto (r_1 + 1, r_2) \\ T_2 : (r_1, r_2) &\mapsto (r_1, r_2 + 1) \\ \sigma : (r_1, r_2) &\mapsto (r_2, r_1) \\ R_6 : (r_1, r_2) &\mapsto (r_1 - r_2, r_1) \end{aligned} \quad (1.6)$$

Analysons le groupe des symétries S_e de l'état à trois sous-réseaux obtenu comme fondamental d'une interaction AF premiers voisins (Fig.1.1(b)). Les symétries de S_S sont réduites à deux éléments : l'identité et la réflexion dans le plan des spins appelée σ_S : la symétrie SO_3 est complètement brisée car $\{I, \sigma_S\} \sim O_3/SO_3$. De S_R , il ne reste que les transformations générées par T_1^3 , T_2^3 , σ et R_6^2 . Mais de S_H , il reste beaucoup plus de symétries que celles générées par ces symétries conservées, car beaucoup ne sont pas factorisables en un élément de S_R laissant l'état invariant et un de S_S le laissant aussi invariant. Par exemple, l'une des symétries que l'on n'a pas encore considérées est la composée de T_1 avec la rotation des spins d'un angle $\frac{2\pi}{3}$ transformant le spin rouge en le spin bleu sur la Fig.1.1(b).

Le dénombrement des éléments de S_e nous mène à la conclusion qu'il y en a finalement deux fois autant que d'éléments de S_R : S_e est isomorphe à $S_R \times \{I, \sigma_S\}$. Autrement dit, à chaque élément X de S_R , on peut associer un élément G_X de S_S tel que l'état soit invariant par $G_X X$. On peut alors écrire $S_e = \{G_X X, X \in S_R\} \times \{I, \sigma_S\}$. Les symétries du réseau, bien qu'elles ne soient pas conservées au sens strict, le sont à un élément de S_S près. C'est ce qui donne cette régularité à l'état : aucun lien, aucun site ne joue de rôle particulier, ce qui se traduit par le schéma en Fig.1.1 : une symétrie du réseau ne modifie aucune observable invariante par transformation de S_S des spins (comme par exemple, les corrélations spin-spin).

Recherche d'états réguliers

Connaissant S_H , on cherche tous les états dont le groupe de symétrie S_e peut se factoriser par un sous-groupe $S_e = \{G_X X, X \in S_R\}$, avec $G_X \in S_S$ (si on veut un maximum de régularité, X parcourt tout le groupe S_R , mais il est aussi possible de se limiter à un sous-groupe de S_R , comme on le fera par la suite pour obtenir des états spiraux par exemple). Le quotient S_e/S_e est le sous-groupe de S_S laissant l'état invariant.

Il est évident que l'on ne peut pas choisir les G_X n'importe comment. Ils doivent vérifier les règles de multiplication du groupe S_R . Soient X , Y et Z , trois éléments de S_R tels

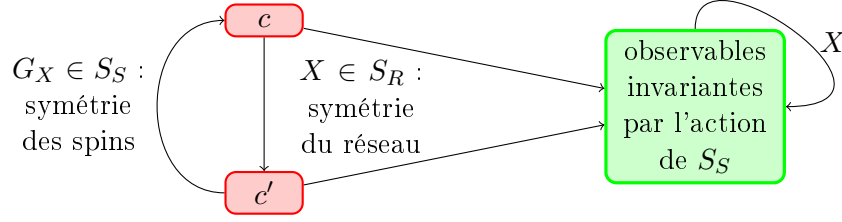


FIG. 1.5 – Effet d’une symétrie du réseau X sur une configuration régulière c . Les observables invariantes par les opérations du groupe S_S des symétries des spins ne sont pas modifiées par X si l’état est régulier. Il existe alors une transformation G_X de S_S qui annihile l’effet de X .

que $Z = XY$. alors, l’état ayant subi Z doit être identique à celui ayant subi Y puis X : $G_Z Z = G_X X G_Y Y$. Comme les éléments de S_S et de S_R commutent, l’équation se simplifie en $G_Z = G_X G_Y$. Pour trouver tous les $\mathcal{S}_e$ possibles, il est nécessaire de vérifier les règles de multiplication entre les générateurs de S_R et leur image dans $\mathcal{S}_e$. Ces règles donnent un nombre restreint d’équations facilement solubles et chaque solution fournit un candidat pour $\mathcal{S}_e$. Un candidat est appelée *groupe de symétrie algébrique* et n’est rien d’autre qu’une représentation linéaire du groupe des symétries du réseau S_R dans l’espace O_3 . Chaque candidat peut être soit le produit de 3 représentations irréductibles de dimension 1, soit le produit d’une représentation irréductible de dimension 1 par une de dimension 2, soit une de dimension 3..

Tous ces candidats ne seront pas viables : certains ne seront compatibles avec aucun état de spins. Nous allons poursuivre notre exemple sur le réseau triangulaire, puis nous élargirons au réseau kagome (le réseau hexagonal est en Annexe A.1 et 2) en cherchant sur ces deux réseaux les groupes de symétrie algébriques, puis les états de spins respectant au moins l’un de ces groupes de symétrie ⁴.

1.2 Groupes de symétrie algébriques sur le réseau triangulaire

Les symétries du réseau triangulaire possèdent quatre générateurs, qui peuvent être choisis comme T_1 , T_2 , R_6 et σ , définis précédemment et représentés Fig. 1.4. Les règles de multiplication entre ces éléments de S_R sont complètement décrites par ce système (I représente l’élément neutre du groupe) :

$$\begin{cases} T_1 T_2 = T_2 T_1 \\ T_1 R_6 = R_6 T_2^{-1} \\ T_2 R_6 = R_6 T_1 T_2 \\ T_1 \sigma = \sigma T_2 \\ R_6^6 = I \\ \sigma^2 = I \\ R_6 \sigma = \sigma R_6^5. \end{cases}$$

On peut remarquer à ce stade que les symétries de certains autres réseaux ayant aussi un réseau de Bravais triangulaire vérifient exactement les mêmes relations des générateurs, par

⁴Un état qui respecte plusieurs groupes de symétrie algébriques est un état qui ne brise pas totalement S_S : chaque G_X associé à une transformation spatiale X n’est pas unique puisqu’il peut être composé avec une transformation non triviale de S_S ne modifiant pas l’état.

exemple les réseaux hexagonaux et kagome. Ils auront donc exactement les mêmes groupes de symétrie algébriques que le réseau triangulaire.

On cherche des éléments G_{T_1} , G_{T_2} , G_{R_6} et G_σ de S_S ayant les mêmes propriétés de multiplication, de façon à construire un groupe de symétrie algébrique $\mathcal{S}_e = \{G_X X, X \in S_R\}$, éventuellement sous-groupe des symétries S_e d'un état de spins. Comme $S_S \sim O_3$, on peut associer à chaque G_X une matrice de O_3 (groupe des matrices orthonormales). Le groupe O_3 est l'ensemble des matrices orthonormales de taille 3×3 . Chacun de ses éléments M peut se repérer par un triplet $(\varepsilon, \theta, \mathbf{n})$, où ε est le déterminant de M , et θ et $\mathbf{n}$ sont l'angle ($\in [0, \pi]$) et l'axe de la rotation εM . On nomme M_1 , M_2 , M_R et M_σ les matrices associées aux G_X , avec une correspondance évidente, et on choisit des triplets $(\varepsilon_1, \theta_1, \mathbf{n}_1), \dots$ pour les repérer dans O_3 . Les quatres matrices définies ci-dessus doivent vérifier :

$$\begin{cases} M_1 M_2 = M_2 M_1 \\ M_1 M_R = M_R M_2^{-1} \\ M_2 M_R = M_R M_1 M_2 \\ M_1 M_\sigma = M_\sigma M_2 \\ M_R^6 = I \\ M_\sigma^2 = I \\ M_R M_\sigma = M_\sigma M_R^5. \end{cases} \quad (1.7)$$

Reste à trouver toutes les solutions de ce système. Les matrices M_1 et M_2 commutent (Eq.1.7, première ligne). De plus, elles sont semblables (Eq.1.7, quatrième ligne), c'est à dire qu'elles représentent la même transformation, dans deux bases différentes obtenues l'une de l'autre par rotation. Cela nous laisse quatre catégories de solutions :

$$\begin{cases} M_1 = M_2 = I \\ \theta_1 = \theta_2 = \pi \text{ et } \mathbf{n}_1 \perp \mathbf{n}_2 \\ M_1 = M_2 \neq I \\ M_1 = M_2^{-1} \neq I \text{ et } \theta \neq \pi. \end{cases}$$

La dernière catégorie est vide car la troisième ligne de l'Eq.1.7 ne peut pas être vérifiée. A une relation de similarité globale près (ce qui revient à définir les trois axes de notre repère à notre convenance), nous allons détailler les solutions de chacune de ces catégories et leur donner un indice. Cela fera au final 40 solutions. La rotation d'axe α et d'angle θ sera notée $R_{\alpha\theta}$.

Premier cas : $M_1 = M_2 = I$. 28 solutions distinctes :

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_e^0(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_R) &\leftrightarrow M_1 = M_2 = I, M_\sigma = \varepsilon_\sigma I, M_R = \varepsilon_R I \\ \mathcal{S}_e^1(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_R) &\leftrightarrow M_1 = M_2 = I, M_\sigma = \varepsilon_\sigma I, M_R = \varepsilon_R R_{z\pi} \\ \mathcal{S}_e^2(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_R) &\leftrightarrow M_1 = M_2 = I, M_\sigma = \varepsilon_\sigma R_{z\pi}, M_R = \varepsilon_R I \\ \mathcal{S}_e^3(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_R) &\leftrightarrow M_1 = M_2 = I, M_\sigma = \varepsilon_\sigma R_{z\pi}, M_R = \varepsilon_R R_{z\pi} \\ \mathcal{S}_e^4(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_R) &\leftrightarrow M_1 = M_2 = I, M_\sigma = \varepsilon_\sigma R_{z\pi}, M_R = \varepsilon_R R_{x\pi} \\ \mathcal{S}_e^5\left(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_R, \theta \in \left\{\frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}\right\}\right) &\leftrightarrow M_1 = M_2 = I, M_\sigma = \varepsilon_\sigma R_{z\pi}, M_R = \varepsilon_R R_{x\theta}. \end{aligned}$$

Deuxième cas : $\theta_1 = \theta_2 = \pi$ et $\mathbf{n}_1 \perp \mathbf{n}_2$. 4 solutions distinctes :

$$\mathcal{S}_e^6(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_R) \leftrightarrow M_1 = R_{x\pi}, M_2 = R_{y\pi}, M_\sigma = -\varepsilon_\sigma \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, M_R = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon_R & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Troisième cas : $M_1 = M_2 \neq I$. 8 solutions distinctes :

$$\mathcal{S}_e^7(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_R) \leftrightarrow M_1 = M_2 = R_{z\frac{2\pi}{3}}, M_\sigma = \varepsilon_\sigma I, M_R = \varepsilon_R R_{x\pi}$$

$$\mathcal{S}_e^8(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_R) \leftrightarrow M_1 = M_2 = R_{z\frac{2\pi}{3}}, M_\sigma = \varepsilon_\sigma R_{z\pi}, M_R = \varepsilon_R R_{x\pi}$$

1.3 Etats réguliers sur plusieurs réseaux

Recherche des états réguliers sur le réseau triangulaire

Maintenant que l'on connaît les groupes de symétrie algébriques sur le réseau triangulaire, on peut passer à la dernière étape qui est la recherche pour chacun de ces groupes des états invariants selon l'action de ses éléments. Cette étape assez laborieuse est détaillée dans ce paragraphe à titre d'exemple. Elle ne le sera pas pour les réseaux suivants. Les états trouvés sont récapitulés dans le paragraphe suivant.

Commençons par les groupes $\mathcal{S}_e^i$, i allant de 0 à 5. Puisque $M_1 = M_2 = I$, aucune translation n'a d'effet sur un état respectant ces groupes. Conclusion : à une rotation globale des spins près, seul l'état ferromagnétique (Fig.1.6(a)) peut avoir les symétries de ces groupes. Comme cet état respecte les symétries de $\mathcal{S}_e^0(1, 1)$, il est bien régulier. Son groupe de symétrie S_e est donc factorisable par $\mathcal{S}_e^0(1, 1)$, le quotient étant le sous-groupe de S_S laissant l'état invariant : O_2 .

Le groupe $\mathcal{S}_e^0(-1, 1)$ est un exemple trivial de groupe de symétrie algébrique avec lequel aucun état n'est compatible. En effet, supposons qu'un état respecte ces symétries. Soit $\mathbf{S}_{(x,y)}$ le spin sur le site de coordonnées (x, y) . La transformation σ laisse le site $(0, 0)$ inchangé, donc $\mathbf{S}_{(0,0)} = M_\sigma \mathbf{S}_{(0,0)}$, ce qui est impossible pour un vecteur unitaire puisque $M_\sigma = -I$.

Certaines propriétés du réseau, similaires à celle utilisée juste avant pour éliminer $\mathcal{S}_e^0(-1, 1)$, vont nous permettre d'éliminer d'autres groupes avec lesquels aucun état n'est compatible. Parmi elles : $\sigma(0, 0) = (0, 0)$ et $R_6(0, 0) = (0, 0)$, ce qui implique que les matrices M_σ et M_R doivent avoir un vecteur invariant non nul en commun. Parmi les groupes $\mathcal{S}_e^6(\varepsilon_\sigma, \varepsilon_R)$, seul $\mathcal{S}_e^6(-1, 1)$ vérifie cette condition. Le spin à l'origine peut alors prendre deux directions opposées : $\mathbf{S}_{(0,0)} = \pm(1, 1, 1)/\sqrt{3}$, ce qui donne le même état, à un retournement global des spins près. On obtient 4 sous-réseaux, avec les spins pointant aux sommet d'un tétraèdre (Fig.1.6(b)).

$\mathcal{S}_e^7(\varepsilon_\sigma, 1)$ et $\mathcal{S}_e^8(\varepsilon_\sigma, 1)$ ne sont possibles que si $\mathbf{S}(0, 0) = \pm(1, 0, 0)$ et pour une seule valeur de ε_σ (respectivement 1 et -1). L'unique état compatible (toujours à une transformation de O_3 près) est l'état à trois sous-réseaux, avec les spins à $2\pi/3$ les uns des autres (Fig.1.6(c)).

$\mathcal{S}_e^7(-1, -1)$ ne donne aucun état.

$\mathcal{S}_e^7(1, -1)$ permet un continuum d'état : le spin à l'origine peut se trouver dans n'importe quelle direction du plan Oyz . L'état obtenu possède trois sous-réseaux et les spins pointent vers les coins d'un triangle équilatéral (Fig.1.6(d)).

Etats réguliers sur le réseau triangulaire

On récapitule ici et sur la Fig.1.6 les quatre états réguliers obtenus précédemment :

- L'état ferromagnétique (Fig.1.6(a)) : tous les spins ont la même direction. C'est par exemple l'état fondamental d'un Hamiltonien F premiers voisins.
- L'état tétraédrique (Fig.1.6(b)) : les spins des quatre sous-réseaux sont orientés vers les sommets d'un tétraèdre. Cet état possède une chiralité : le retournement des spins donne un état non accessible par une rotation globale des spins. C'est l'un des états fondamentaux du modèle $J_1 - J_2$ (premiers et seconds voisins) pour un certain domaine de paramètres, mais dans ce modèle, il est dégénéré avec des états spiraux où

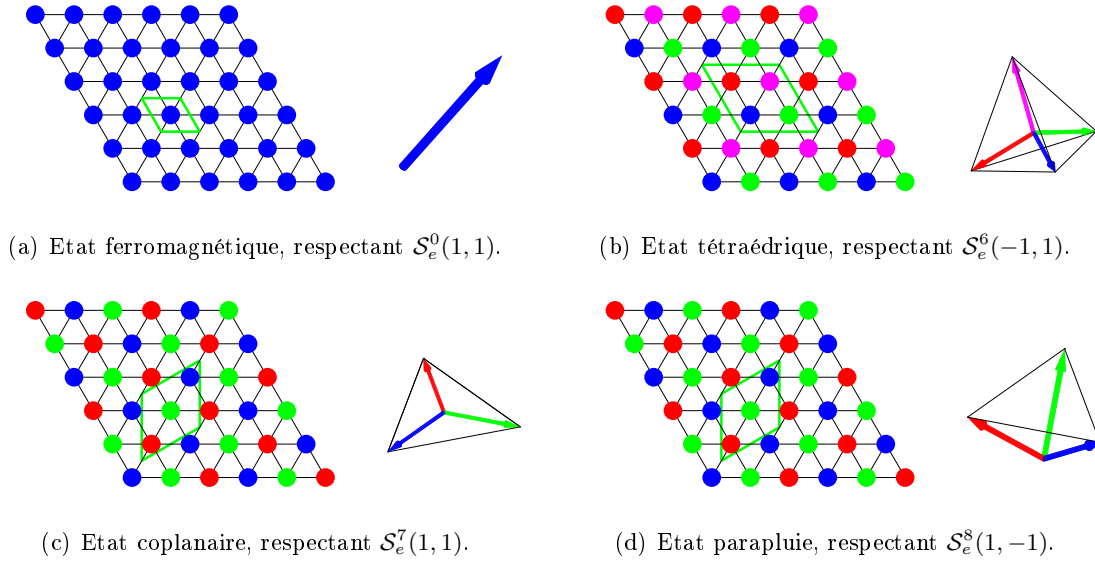


FIG. 1.6 – Etats réguliers sur le réseau triangulaire. Pour chacun, l'un des groupes de symétrie algébriques le laissant invariant est donné.

tous les spins sont dans un même plan, favorisés par l'ordre par le désordre. C'est par contre l'unique fondamental du modèle d'échange multiple pour un certain domaine de paramètres (Kubo et Momoi, [52]).

- L'état coplanaire (Fig.1.6(c)) : les spins des trois sous-réseaux sont orientés vers les sommets d'un triangle équilatéral et sont coplanaires. Cet état n'est pas chiral (il le serait si l'on avait des spins XY car alors, on ne pourrait plus passer continûment d'une configuration à celle où les spins ont été retournés : on a besoin de sortir du plan des spins pour cela). On a vu que c'était le fondamental d'un Hamiltonien AF premiers voisins.
- L'état parapluie (Fig.1.6(d)) : les spins des trois sous-réseaux sont orientés vers les sommets d'un triangle équilatéral (l'état coplanaire est un cas particulier de parapluie, ainsi que l'état F). C'est l'état fondamental d'un Hamiltonien AF premiers voisins avec un champ magnétique uniforme, mais cet exemple est mauvais car $S_S \neq O_3$.

Etats réguliers sur le réseau kagome

Les groupes de symétrie algébriques sont les mêmes que ceux du réseau triangulaire, pour les symétries de la Fig.1.4. La recherche des états réguliers est décrite en Annexe A.3.

Les huit états réguliers obtenus sont décrits ici et sur la Fig.1.7 :

- L'état ferromagnétique (Fig.1.7(a)) : tous les spins ont la même direction.
- L'état $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ (Fig.1.7(b)) : les spins des trois sous-réseaux sont orientés vers les sommets d'un triangle équilatéral et sont coplanaires. La maille de cet état possède 3 sites. Cet état n'est pas chiral.
- L'état $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ parapluie (Fig.1.7(c)) : les spins des trois sous-réseaux sont orientés vers les sommets d'un triangle équilatéral et ne sont pas forcément coplanaires (cas particuliers : les deux états précédents, F et $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ coplanaire).
- L'état cuboctaédrique 1 (Fig.1.7(d)), abrégé cuboc1 : les spins des douze sous-réseaux sont orientés vers les sommets d'un cuboctaèdre. Deux spins voisins sont à 120° . Cet état est chiral et n'a jamais été étudié jusqu'alors, bien qu'il ait été proposé comme

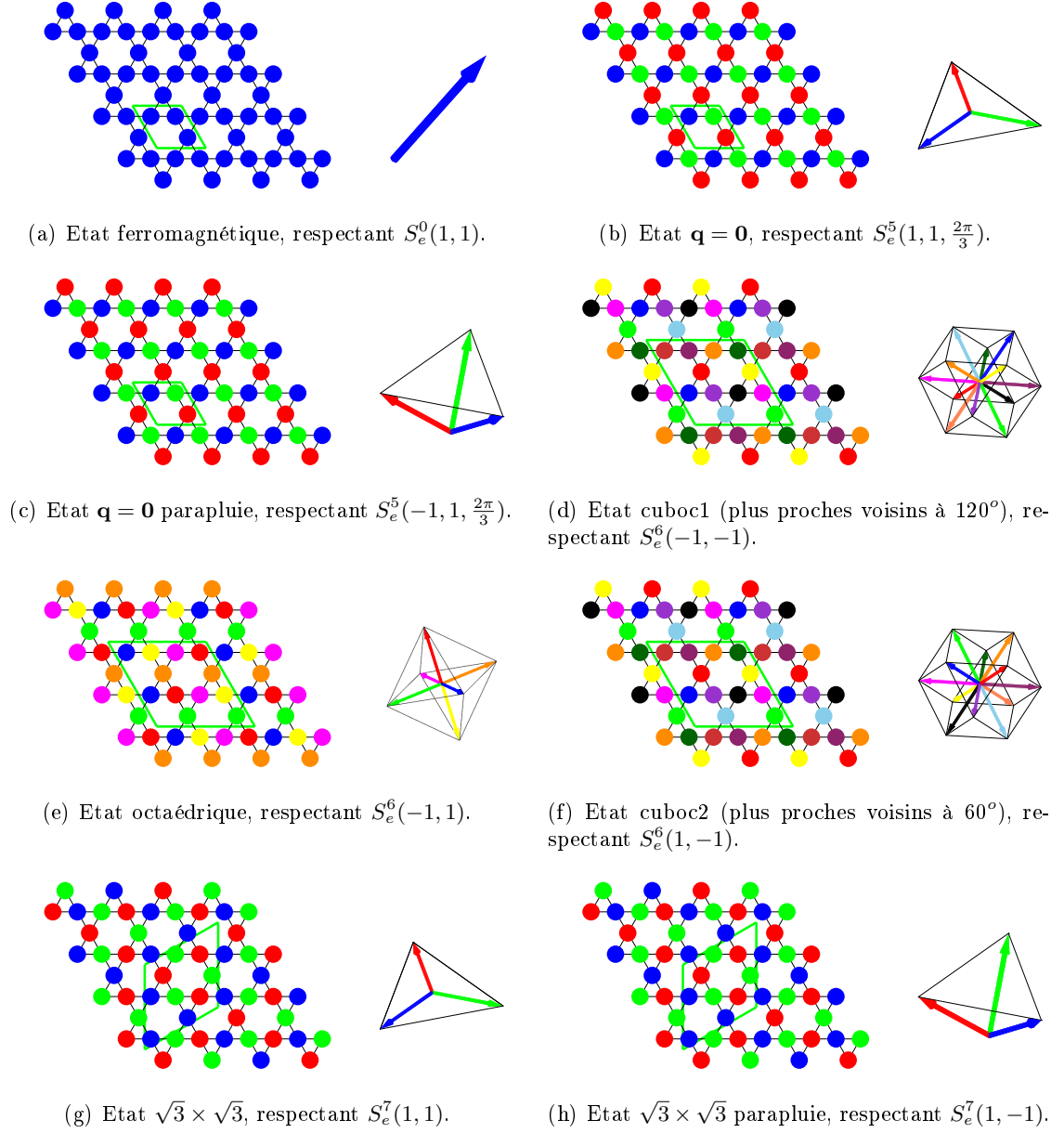


FIG. 1.7 – Etats réguliers sur le réseau kagome. Pour chacun, l'un des groupes de symétrie algébriques le laissant invariant est donné.

ordre à longue portée pour la Kapellasite [44].

- L'état octaédrique (Fig.1.7(e)) : les spins des six sous-réseaux sont orientés vers les sommets d'un octaèdre. Deux spins voisins sont à 90° . Cet état est chiral et n'a jamais été étudié jusqu'alors.
- L'état cuboctaédrique 2 (Fig.1.7(f)), abrégé cuboc2 : les spins des douze sous-réseaux sont orientés vers les sommets d'un cuboctaèdre. Deux spins voisins sont à 60° . Cet état est chiral et a été étudié par Domenge *et al.* [26] sur un modèle de Heisenberg premiers et seconds voisins.
- L'état $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$: les spins des trois sous-réseaux sont orientés vers les sommets d'un triangle équilatéral et sont coplanaires. La maille de cet état possède 9 sites. Cet état n'est pas chiral.
- L'état $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ parapluie : les spins des trois sous-réseaux sont orientés vers les sommets d'un triangle équilatéral et ne sont pas forcément coplanaires (cas particuliers : l'état précédent et l'état F).

Autres types d'états réguliers possibles

Ici, on s'est placé dans la situation où $S_S = O_3$ avec des spins de $\mathcal{S}_2$. Mais on peut imaginer des modèles complètement différents. Si les spins sont XY ou Ising, on obtient $S_S = O_2$ ou O_1 , ce qui réduit la liste des états réguliers aux états coplanaires ou colinéaires.

Mais des cas plus intéressants existent. Par exemple, si les interactions sont invariantes par renversement local d'un spin $\mathbf{S}_i \rightarrow -\mathbf{S}_i$, alors, un spin n'est plus décrit que par une direction de l'espace, c'est à dire un point de $\mathcal{S}_2/\mathbf{Z}_2$. Le groupe des transformations de spin S_S devient alors $O_3/\mathbf{Z}_2 \sim SO_3$. Les PSG algébriques sont moins nombreux, mais plus d'états sont compatibles (on a déjà tous les états obtenus précédemment dans lesquels on ne garde que la direction des spins). On obtient des états nématiques.

Ainsi, des ordres réguliers nématiques, quadripolaires, ... sont possibles en modifiant l'espace des spins et ses symétries.

1.4 Analogie avec les groupes des symétries projectives de Wen

On peut établir une analogie avec la théorie des groupes des symétries projectives (PSG) établie par Wen pour des problèmes de fermions en champ moyen [112].

Afin de minimiser un Hamiltonien de spins $S = 1/2$, les opérateurs de spins sont transformés en opérateurs fermioniques $f_\uparrow$ et $f_\downarrow$. On fait alors une approximation de champ moyen sur ce nouvel Hamiltonien, en prenant en compte la contrainte du nombre de fermions par site

$$f_\uparrow^\dagger f_\uparrow + f_\downarrow^\dagger f_\downarrow = 1 \quad (1.8)$$

et on obtient un état fondamental pour ce Hamiltonien de champ moyen.

Comme la contrainte n'est respectée qu'en moyenne, on sort de l'espace de Hilbert des spins (l'état possède des composantes à 0 ou 2 fermions sur certains sites). On doit y retourner en projetant l'état fondamental du Hamiltonien de champ moyen dans l'espace d'origine. A cause de l'invariance de jauge locale, deux états fermioniques différents mais reliés par une transformation de jauge donnent exactement le même état de spins après projection. Pour la même raison, un état non invariant selon l'une des symétries du réseau peut le devenir après projection.

Les PSG permettent de trouver tous (à une transformation de jauge près) les états de champ moyen respectant les symétries du réseau après projection. Pour cela, il suffit de remarquer que les quantités devant respecter les symétries du réseau sont celles conservant le nombre de fermions par site, et que les transformations n'affectant pas ces quantités sont les transformations de jauge. Alors, si pour chaque transformation du réseau X , il existe

une transformation de jauge G_X telle que $G_X X$ laisse l'état invariant, l'état projeté sera invariant par X .

Dans notre problème classique, on veut que les quantités invariantes par les symétries de spin S_S respectent les symétries du réseau (par exemple, les corrélations de spins $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$). Les transformations ne les affectant pas sont évidemment les transformations globales des spins S_S , qui ont joué le rôle des transformations de jauge.

1.5 Energie de modèles Heisenberg

Maintenant que nous avons une collection d'états réguliers sur plusieurs réseaux, il serait intéressant de connaître des situations dans lesquelles ce sont les états fondamentaux. Le Hamiltonien le plus simple à tester est le Hamiltonien de Heisenberg

$$H = \frac{J_1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{J_3}{2} \sum_{\langle\langle\langle ij \rangle\rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.9)$$

où les sommes portent sur tous les couples de points à la même distance (le lien ij est pris une fois dans chaque sens). Nous arrêterons aux troisièmes voisins. Pour chaque jeu de paramètres $\{J_i, i = 1, 2, 3\}$, et pour un réseau périodique, nous allons chercher l'état fondamental parmi les états réguliers décrits précédemment et parmi le continuum des états *spiraux*, décrits dans le paragraphe suivant.

Les états spiraux

Si l'on se place sur un réseau périodique de N_m mailles de m sites (le nombre de sites est alors $N_s = N_m m$), on peut exprimer H en fonction de la transformée de Fourier des spins :

$$\mathbf{S}_{i\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_{\mathbf{x}} \mathbf{S}_{i\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}}. \quad (1.10)$$

On repère un site par le vecteur $\mathbf{x}$ indiquant sa maille et par i , son indice dans la maille. Les $\mathbf{S}_{i\mathbf{q}}$ sont regroupés dans des vecteurs $\mathbf{S}_{\mathbf{q}}$ à m composantes (chacune étant elle-même un vecteur à trois composantes).

$$H = \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{-\mathbf{q}}^t (M_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}}). \quad (1.11)$$

$$(M_{\mathbf{q}})_{ij} = \sum_{\mathbf{v}} J_{(i\mathbf{0}, j\mathbf{v})} e^{i\mathbf{q}\mathbf{v}} \quad (1.12)$$

La plus petite des valeurs propres des matrices $M_{\mathbf{q}}$ est une borne inférieure de l'énergie par site (car la contrainte sur la longueur des spins impose entre autre $\sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{S}_{i\mathbf{q}}|^2 = N_m$). On note le vecteur d'onde correspondant $\mathbf{Q}$.

Si le réseau est un réseau de Bravais ($m = 1$), la borne inférieure est atteinte pour l'état tel que

$$\mathbf{S}_{\mathbf{q}} = \frac{\sqrt{N_s}}{2} (\delta_{\mathbf{q}, \mathbf{Q}} (\mathbf{u} - i\mathbf{v}) + \delta_{\mathbf{q}, -\mathbf{Q}} (\mathbf{u} + i\mathbf{v})), \quad (1.13)$$

avec $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ deux vecteurs unitaires orthogonaux. Cela donne dans l'espace direct l'état spiral :

$$\mathbf{S}_{\mathbf{x}} = \cos(\mathbf{Q}\mathbf{x}) \mathbf{u} + \sin(\mathbf{Q}\mathbf{x}) \mathbf{v}, \quad (1.14)$$

qui respecte bien l'unitarité de chacun des spins. On a alors construit un état fondamental, qui, certes, n'est pas unique : on peut faire une rotation globale des spin, ou, si plusieurs valeurs propres des matrices $M_{\mathbf{q}}$ sont égales à la valeur propre minimale, construire des

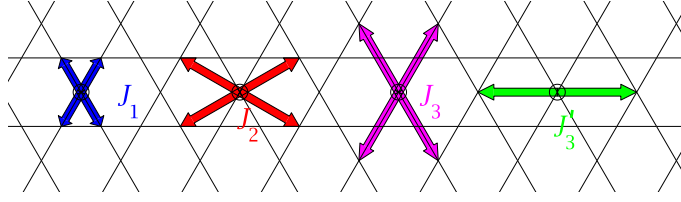


FIG. 1.8 – Premiers, deuxièmes et troisièmes voisins sur le réseau kagome

états non coplanaires de même énergie [103]. Mais il a l'intérêt de montrer qu'il existe toujours un état coplaire fondamental pour des interactions Heisenberg sur un réseau de Bravais. Un état spiral quelconque (dont le vecteur d'onde $\mathbf{Q}$ n'est pas un point particulier de la ZdB, comme un coin, le centre ou un milieu de côté) possède un groupe de symétrie S_e restreint : aucune rotation ou réflexion du réseau combinée avec un élément de S_S ne fait partie de son groupe de symétrie. Les états spiraux sont obtenus en ne prenant plus en compte dans S_R que les translations et en se limitant aux cas où M_1 et M_2 ont le même axe de rotation.

Si le réseau n'est pas un réseau de Bravais, il n'y a pas de manière automatique de générer un état fondamental, ni de montrer qu'il existe un état fondamental coplaire. On élargit la définition d'un état spiral donnée ci-dessus à celle-ci, valable sur n'importe quel réseau et contenant aussi des états non coplanaires : un état spiral est un état invariant par l'action des transformations $G_{T_1}T_1$ et $G_{T_2}T_2$, où G_{T_1} et G_{T_2} sont deux rotations globales des spins d'angles Q_1 et Q_2 autour d'un même axe. Un état spiral se caractérise donc par un axe de rotation des spins, un vecteur d'onde $\mathbf{Q}$ et autant de vecteurs unitaires que de sites dans la maille (un pour le réseau triangulaire, deux pour l'hexagonal et trois pour le kagome). On dit qu'il est commensurable si $\mathbf{Q}$ est une fraction des vecteurs de base du réseau réciproque. Dans ce cas, c'est un ordre de Néel, avec un nombre fini de sous-réseaux. Dans le cas contraire, l'ordre est incommensurable et possède une infinité de sous-réseaux. Des simulations Monte Carlo sur un réseau périodique seront toujours frustrées par les conditions aux limites.

Parmi tous les états réguliers décrits précédemment, tous sont des états spiraux particuliers, exceptés ceux obtenus de $\mathcal{S}_e^6$. Par la suite, lorsque nous parlerons d'états spiraux, nous exclurons ces cas particuliers.

Nous allons chercher les états fondamentaux classiques, non pas parmi l'ensemble des configurations classiques (qui est beaucoup trop grand), mais parmi le sous-ensemble comprenant les états réguliers et les états spiraux. Nous allons nous concentrer sur le réseau kagome, car c'est celui qui possède le plus de particularités. Ce que nous obtenons est donc une proposition de fondamental, le fondamental absolu se trouvant peut-être hors du sous-ensemble des états explorés. Les réseaux triangulaire et hexagonal sont étudiés dans l'Annexe A.4 et 5.

Fondamentaux du Hamiltonien Heisenberg sur le réseau kagome

Sur le réseau kagomé, un site possède 4 premiers voisins (J_1), 4 seconds voisins (J_2), et deux types de troisièmes voisins : 4 dans la première catégorie (J_3) et 2 dans la deuxième (J'_3). Ces différents voisins sont représentés sur la figure 1.8. Le Hamiltonien est

$$H = \frac{J_1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{J_2}{2} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{J_3}{2} \sum_{\langle\langle\langle ij \rangle\rangle\rangle_1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{J'_3}{2} \sum_{\langle\langle\langle ij \rangle\rangle\rangle_2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (1.15)$$

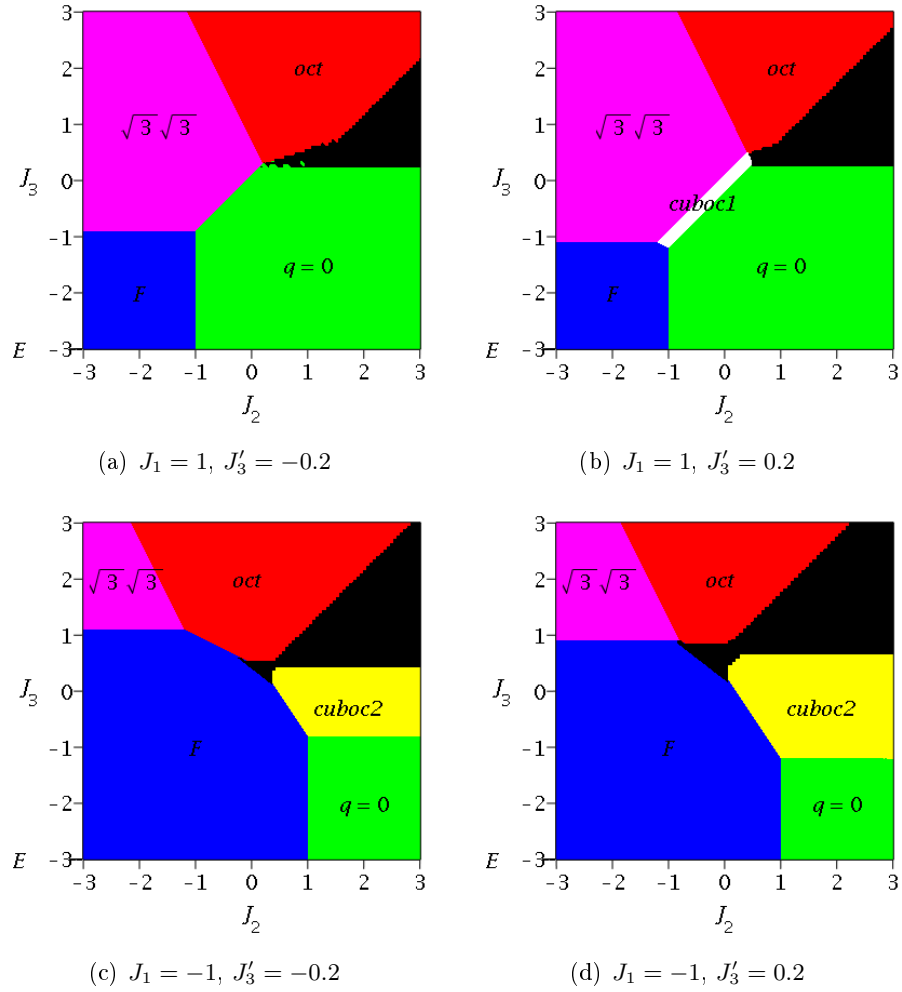


FIG. 1.9 – Etats fondamentaux sur le réseau kagome pour le modèle $J_1 - J_2 - J_3 - J'_3$ (Eq.1.15). En noir : états spiraux.

Les états fondamentaux sont récapitulés sur la Fig. 1.9 pour $J_1 = -1$ et 1 , $J'_3 = -0.2$ et 0.2 en fonction de J_2 et J_3 . Les énergies par site des états réguliers (décrits subsection 1.3 et représentés page 19) sont :

- pour l'état F : $E_f = 2J_1 + 2J_2 + J'_3 + 2J_3$,
- pour l'état $q = 0$: $E_0 = -J_1 - J_2 + J'_3 + 2J_3$,
- pour l'état octaédrique : $E_6 = J'_3 - 2J_3$,
- pour l'état cuboc1 : $E_1 = -J_1 + J_2 - J'_3$,
- pour l'état cuboc2 : $E_2 = J_1 - J_2 - J'_3$,
- pour l'état $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$: $E_3 = -J_1 + 2J_2 - J'_3/2 - J_3$.

Pour chaque jeu de paramètres, le fondamental choisi est celui présentant le maximum de régularité (si un état spiral est dégénéré avec l'un des états réguliers, c'est ce dernier qui est favorisé). En faisant ce choix, on oublie le phénomène d'ordre par le désordre, mais le but est de montrer que les états réguliers sont compétitifs énergétiquement. Lorsqu'un état spiral est le fondamental, cela signifie par conséquent qu'aucun état régulier ne l'est.

On remarque sur les diagrammes de phases Fig.1.9 que les états spiraux occupent une surface non nulle de l'espace des paramètres. Parmi les huit états réguliers, seuls trois ne sont pas spiraux : les états cuboc1, cuboc2 et l'état octaédrique. Le fait que l'un de ces états soit l'unique fondamental du Hamiltonien Eq.1.15 contredit la supposition souvent faite de la coplanarité des fondamentaux des Hamiltoniens Heisenberg.

Le cuboc2 a déjà été trouvé comme étant le fondamental pour un Hamiltonien $J_1 - J_2$ pour $J_1 < 0$ et $J_2 > |J_1|/3$ ([26]). On le retrouve sur le diagramme de phases Fig.1.9 dans tout un domaine de paramètres : il n'est pas déstabilisé par l'ajout d'interactions J'_3 et J_3 au modèle $J_1 - J_2$. L'état cuboc1 et l'état octaédrique, qui n'ont jamais été étudiés auparavant, sont les états fondamentaux sur tout un domaine des paramètres. Ces trois GS aux spins non coplanaires sont intéressants car comme on le verra à la section suivante, ils donnent lieu à une transition de phase chirale à température finie. Mais est-ce que l'on a réellement une chance de les observer ?

La grande dégénérescence du kagome AF premiers voisins ($J_1 > 0$, $J_2 = J_3 = J'_3 = 0$) est levée pour un J'_3 positif infinitésimal, qui favorise l'ordre cuboc1. L'observation de cet ordre paraît donc envisageable. L'état octaédrique n'est pas l'unique fondamental dans les zones rouges de la Fig.1.9. En effet, toute configuration du type de la Fig.1.10(a) possède la même énergie pour le Hamiltonien (1.15). Il y a donc des configurations colinéaires de même énergie, qui risquent d'être favorisées à faible température par le phénomène d'ordre par le désordre. Cependant, l'ordre octaédral reste intéressant car sa dégénérescence pourrait être levée par de faibles interactions non Heisenberg.

La méthode de recherche des états réguliers nous a donc permis de proposer systématiquement un état fondamental au modèle de Heisenberg premiers, seconds et troisièmes voisins, pour une large gamme de paramètres. La découverte d'une nouvelle phase provient la plupart du temps de l'exploration point à point du fondamental dans l'espace des paramètres (par exemple, par un Monte Carlo classique minimisant l'énergie). C'est ainsi que le cuboc2 a été trouvé par Domenge *et al.*. Cette nouvelle méthode a ici permis de mettre à jour des zones de paramètres pour lesquels deux nouveaux états de Néel : le cuboc1 et l'ordre octaédrique, pourraient être les états fondamentaux. Pour confirmer cette supposition, il faudrait maintenant effectuer un Monte Carlo dans ces zones sur des réseaux de grandes taille, afin de vérifier qu'aucun état n'est plus bas en énergie.

1.6 Facteurs de structure des états réguliers

Une autre application possible de la méthode de recherche des états réguliers est celle-ci : on ne connaît d'un matériau que ses symétries, mais on a des mesures expérimentales des corrélations de spins et on cherche les ordres de spins possibles. Si l'on trouve parmi

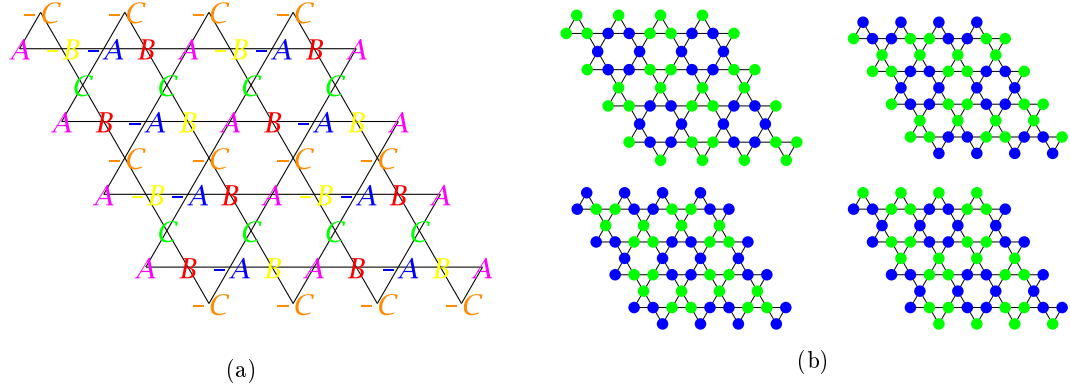


FIG. 1.10 – (a) Configuration à 6 sous-réseaux sur le kagome possédant la même énergie que l'état octaédrique pour le Hamiltonien (1.15). Les lettres opposées représentent des spins opposés. Deux sites portant des lettres différentes ont des orientations relatives quelconques. (b) Configurations particulières colinéaires (les deux couleurs représentent des spins opposés).

les états réguliers un état possédant les mêmes corrélations, on peut ensuite chercher les interactions avec des informations plus précises.

Nous allons d'abord définir les facteurs de structure, puis nous les calculerons pour les états réguliers du réseau kagome (les facteurs de structure des autres réseaux sont en Annexe A.6 et 7). Enfin, nous comparerons ces calculs à deux matériaux récemment synthétisés : la Kapellasite et la Volborthite.

Définitions des facteurs de structure.

Les diffusions de neutrons inélastiques d'un matériau permettent d'obtenir son facteur de structure dynamique $S(\mathbf{Q}, \omega)$. Une partie du signal provient de la structure atomique du matériau, mais les neutrons portant un spin, une partie concerne sa structure magnétique (l'art des expérimentateurs consistant entre autre en la séparation de ces deux parties). La dépendance de ce signal en ω (ou de façon équivalente, en énergie) ne nous concerne pas pour l'instant, puisqu'on ne s'intéresse qu'à l'état fondamental. C'est donc le facteur de structure statique $S(\mathbf{Q})$ (aussi appelé facteur de structure à temps égaux), obtenu en intégrant le précédent en ω , ou par un bombardement élastique de neutron, qui nous intéresse. La contribution des spins à ce signal dépend uniquement des corrélations instantanées des spins. On oublie la partie du signal qui ne provient pas des spins. La formule de $S(\mathbf{Q})$ pour un réseau périodique est :

$$S(\mathbf{Q}) = \frac{1}{N_Q} \sum_i \sum_j e^{-i\mathbf{Q}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.16)$$

avec N_Q le nombre de vecteurs d'onde de la zone de Brillouin étendue (égal à N_s/r : le nombre de sites N_s divisé par le remplissage r , $r = 1$ pour un réseau de Bravais, $r = 2/3$ pour le réseau hexagonal, $r = 3/4$ pour le réseau kagome). La zone de Brillouin étendue (ZdBE) est la zone de Brillouin (ZdB) du réseau auquel on a ajouté des sites de façon à obtenir un réseau de Bravais. Pour le réseau triangulaire, la ZdBE est identique à la ZdB. Pour transformer le réseau hexagonal en réseau de Bravais, il faut ajouter un site au centre de chaque hexagone. Sa ZdBE aura donc une surface trois fois plus grande que sa ZdB. Pour le réseau kagomé, la ZdBE aura une surface quatre fois plus grande que la ZdB.

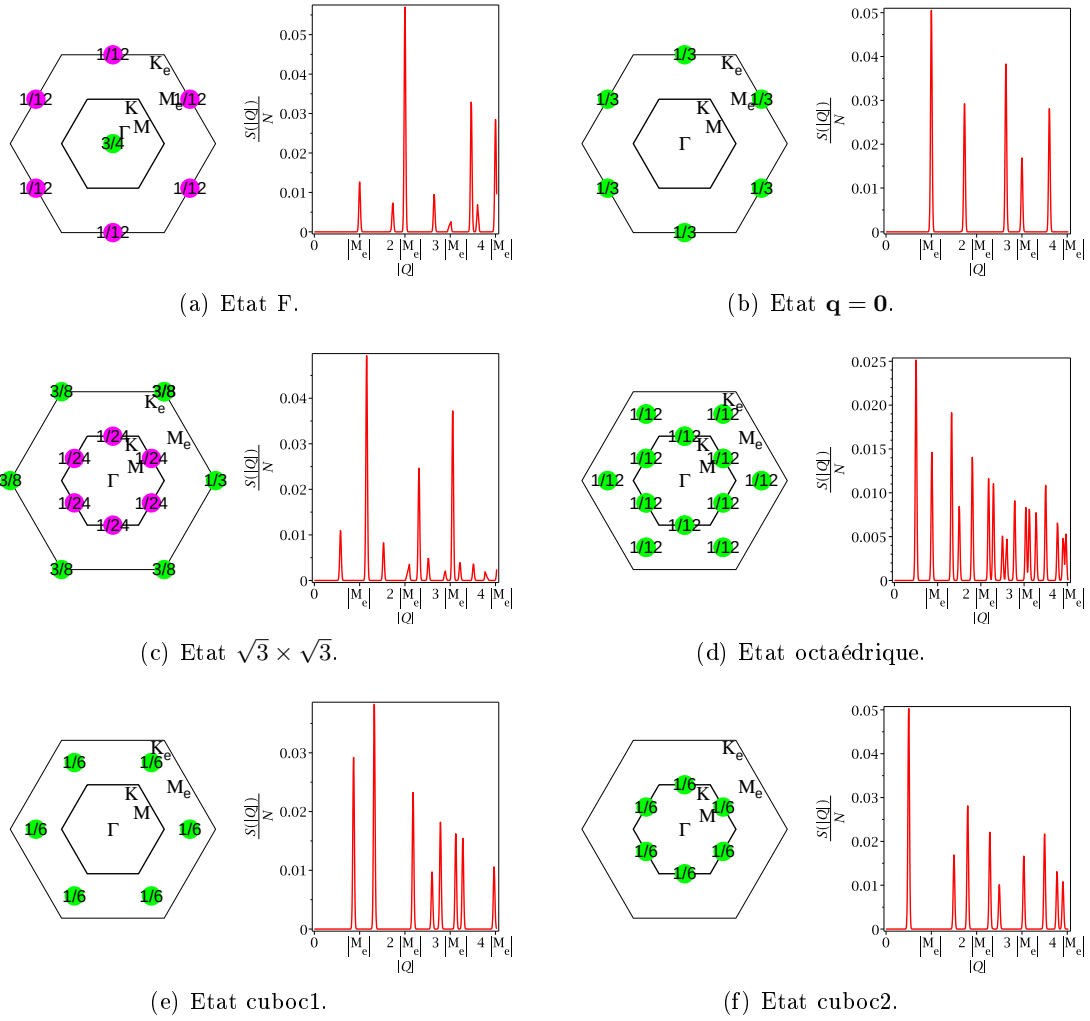


FIG. 1.11 – Facteurs de structure $S(\mathbf{Q})/N_s$ et $S(|\mathbf{Q}|)/N_s$ des états réguliers du réseau kagome. Pour chaque pic de Bragg de $S(\mathbf{Q})$, la valeur numérique de l'intensité est donnée. Pour $S(|\mathbf{Q}|)$, Ils sont représentés légèrement élargis.

$S(\mathbf{Q})$ vérifie la règle de somme :

$$\sum_{\mathbf{Q}} S(\mathbf{Q}) = N_s S^2. \quad (1.17)$$

$S(\mathbf{Q})$ est en réalité accessible aux expérimentateurs seulement dans le cas où ils possèdent un cristal du matériau étudié. Des poudres peuvent leur donner $S(|\mathbf{Q}|)$, c'est à dire la quantité précédente moyennée sur toutes les directions du vecteur $\mathbf{Q}$ de norme fixée :

$$S(|\mathbf{Q}|) = \frac{\int S(\mathbf{Q}') \delta(|\mathbf{Q}| - |\mathbf{Q}'|) d\mathbf{Q}'}{\int \delta(|\mathbf{Q}| - |\mathbf{Q}'|) d\mathbf{Q}'}. \quad (1.18)$$

Le $\mathbf{Q}'$ de l'intégrale parcourt la ZdB du réseau.

Les facteurs de structure des états réguliers sur le réseau kagome

Ils sont récapitulés sur la Fig.1.11.

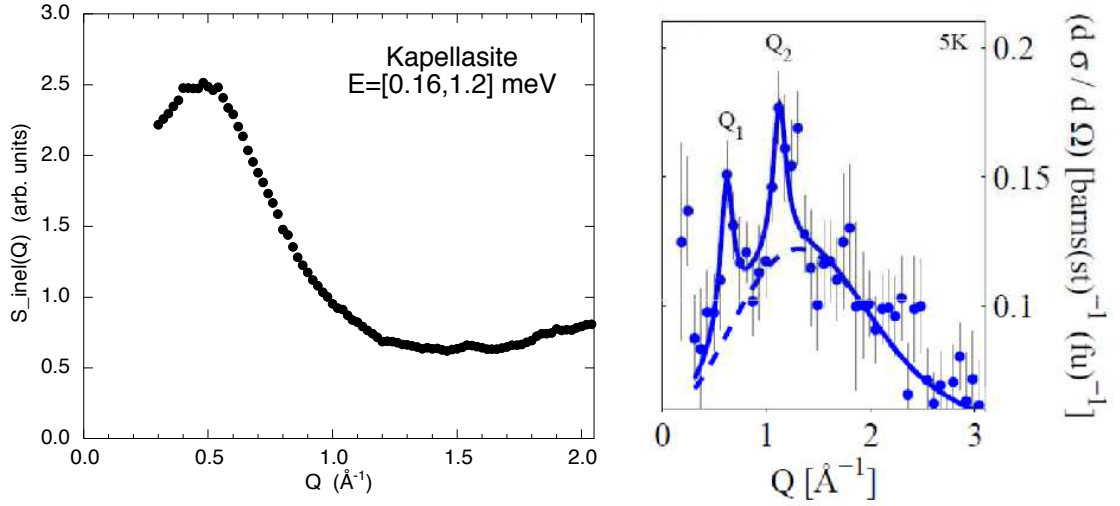


FIG. 1.12 – Facteurs de structure de la Kapellasite (à gauche, ressemble à la Fig.1.11(f)) et de la Volborthite (à droite, ressemble à la Fig.1.11(d)). En prenant une distance entre atomes de cuivre de $3.165\text{\AA}$, $M_e/2$ se trouve à $0.573\text{\AA}^{-1}$

Applications à la Kapellasite et à la Volborthite.

Nous allons maintenant analyser des résultats expérimentaux de deux composés dont on ne connaît pas exactement les propriétés magnétiques : la Kapellasite $\text{CuZn}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ [21] et la Volborthite $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_7(\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ [45]. Tous deux ont des atomes de cuivre formant des plans kagome de spins $1/2$. Leurs facteurs de structure statiques ont été mesurés respectivement par Fåk (communication privée) et Nielsen *et al.* [81]. Ils sont reproduits en Fig.1.12.

Le facteur de structure statique de la Kapellasite ressemble beaucoup à celui de l'ordre régulier cuboc2 (Fig.1.11(f)), avec un premier pic vers $M_e/2$ et pas d'autres pics avant une distance de l'ordre de $2M_e$. Pourtant le pic expérimental n'est pas un pic de Bragg : le fondamental de la Kapellasite ne possède pas d'ordre de Néel. Ce pic traduit l'existence d'un ordre à courte portée en certains vecteurs d'onde et le relier à un ordre de Néel est utile : si le spin S était plus grand, les fluctuations quantiques seraient plus faibles et l'état fondamental pourrait devenir un ordre de Néel. On peut donc obtenir des informations sur les vecteurs d'onde des états de Néel voisins à partir de l'ordre à courte portée, et ainsi, proposer des Hamiltoniens possibles ayant pour état fondamental classique cet ordre de Néel.

Le cuboc2 est l'état fondamental classique sur kagome pour une interaction premiers voisins F et deuxièmes voisins AF . Ces interactions sont-elles possibles sur la Kapellasite ? Le caractère F ou AF d'un couplage dépend de la position des atomes d'oxygène permettant un échange entre atomes de cuivre. Qualitativement, on peut dire que si l'angle $\text{Cu}-\text{O}-\text{Cu}$ est proche de 90° , l'échange est F , mais le calcul précis du couplage à partir des positions des atomes est difficile. Les règles de Goodenough-Kanamori-Anderson donnent une estimation des valeurs des couplages, mais sont souvent une approximation trop violente. La Kapellasite est justement dans un cas où le signe du couplage premiers voisins est ambigu. De plus, il semblerait que le couplage troisièmes voisins ([43]) ne soit pas négligeable devant celui premiers voisins. Dans l'article [44], Janson *et al.* ont cherché le fondamental classique pour $J_1 > 0$ et $J'_3 > 0$ et ils ont obtenu le cuboc1. Le facteur de structure statique obtenu expérimentalement appuierait plutôt l'hypothèse d'un ordre cuboc2, lui aussi compatible avec un J'_3 AF important, mais avec un couplage premiers

voisins F.

Le facteur de structure statique de la Volborthite présente des analogies avec celui de l'ordre octaédrique (Fig.1.11(d)) et l'on a vu que cet ordre était le fondamental pour des interactions allant jusqu'aux troisièmes voisins, avec tout un continuum d'états dont certains sont colinéaires. Cependant, on soupçonne le Hamiltonien d'être anisotrope, avec deux couplages premiers voisins J et J' (qui pourraient même être de signes opposés [45], ce qui rendrait alors l'utilisation des états réguliers infondée). L'anisotropie risque d'étendre la zone des fondamentaux spiraux de la Fig.1.9 mais peut laisser des états réguliers fondamentaux si elle est faible.

Grâce à la détermination d'un ordre de Néel dont les vecteurs d'onde correspondent aux bosses des facteurs de structure statiques, on a pu proposer un Hamiltonien pour ces deux composés. De nombreuses extensions sont possibles. Cette analyse est classique et suppose les composés parfaits. En réalité, il y a de nombreux défauts qui peuvent altérer les facteurs de structure théoriques et dont il faudrait étudier l'influence. On peut aussi étendre l'analyse en gardant des réseaux parfaits, mais en ajoutant les fluctuations quantiques aux facteurs de structure pour assister à la réduction ou la disparition des pics de Bragg. On peut calculer les facteurs de structure dynamiques avec nos Hamiltoniens supposés afin de comparer aux expériences future. Dans un chapitre ultérieur, nous utiliserons la technique des bosons de Schwinger en champ moyen pour calculer des facteurs de structure dynamiques en prenant en compte les fluctuations quantiques et ainsi, avoir accès à des facteurs de structure d'états sans ordre à longue portée.

2 La transition chirale : rôle des vortex et ordre de la transition

Après s'être intéressé à l'état fondamental de modèles de spins Heisenberg, c'est à dire, à leur état à température strictement nulle, nous allons étudier l'effet de la température en restant dans une approximation classique.

Certains des ordres réguliers détaillés précédemment ont des spins non coplanaires, ce qui se traduit par une chiralité scalaire non nulle pour certains triplets ijk de sites :

$$\sigma_{ijk} = (\mathbf{S}_i \wedge \mathbf{S}_j) \cdot \mathbf{S}_k \neq 0. \quad (1.19)$$

Un système qui respecte la symétrie d'inversion des spins $\mathbf{S}_i \rightarrow -\mathbf{S}_i$ peut très bien avoir des états fondamentaux chiraux, repérés par un indice discret $\sigma = \pm 1$. Malgré la présence d'ondes de spin qui détruisent les corrélations de spin à longue portée dès que $T \neq 0$, la chiralité locale reste non nulle à basse température. Sur des exemples, nous verrons en Sec.2.1 qu'elle donne lieu à une transition de phase à température non nulle.

Ces systèmes possèdent aussi des défauts ponctuels, appelés vortex (Sec.2.2). Grâce à un modèle jouet, nous expliquerons en Sec.2.3 le lien entre vorticit  et chiralit  et la raison pour laquelle la transition observ e est parfois du premier, parfois du second ordre, malgr  le caract re Ising du param tre d'ordre (± 1).

2.1 Possibilit  d'une transition de phase chirale

Lorsqu'une transition de phase se produit, elle est la plupart du temps associ e   une modification des sym tries du syst me et s pare une phase basse temp rature d'une phase haute temp rature plus sym trique (la transition de Kosterlitz Thouless [51] est une exception). Connaissant l'espace du param tre d'ordre E_{op} d'un syst me (E_{op} est l'ensemble des  tats fondamentaux), c'est   dire le groupe des sym tries de S_H bris es  

$T = 0$, et sachant qu'elles sont toutes restaurées lorsque $T \rightarrow \infty$, on peut avoir une idée des transitions possibles.

Lorsque les symétries restaurées sont continues, le théorème de Mermin-Wagner nous donne la température critique : $T_c = 0$. Nous expliquerons rapidement ce théorème avant de passer à un cas d'école de symétrie discrète, restaurée à $T_c \neq 0$: la transition d'Ising. Quand les deux types de symétrie doivent être restaurées, comme c'est le cas dans les systèmes chiraux, les deux types de transition se produisent donnant une transition à $T_c = 0$ et une transition chirale à $T_c \neq 0$. Nous en verrons quelques exemples.

Le théorème de Mermin-Wagner

Un état fondamental régulier (au sens de la section précédente) possède de l'ordre à longue portée, caractérisé par une aimantation alternée m qui peut être choisie comme le produit de l'aimantation d'un sous-réseau A : $\|\sum_{i \in A} \mathbf{S}_i\|$ par le nombre de sous-réseaux. A température nulle, l'aimantation est maximale : $m(T = 0) = N_s$, avec N_s le nombre de sites du réseau. Mais pour une température infinitésimale, cette aimantation disparaît : $m(T > 0) = 0$.

En effet, le théorème de Mermin-Wagner [65] énonce qu'aucune symétrie continue ne peut être spontanément brisée en dimension spatiale $d \leq 2$ pour des interactions à courte portée, car des excitations de grande longueur d'onde (ondes de spin ou modes de Goldstone) d'énergie tendant vers 0 avec la taille du système désordonnent totalement les spins. La température critique de la transition restaurant les symétries continues est donc $T_c = 0$. Seules des symétries discrètes peuvent donner lieu à une transition à température non nulle. L'exemple le plus connu d'une telle transition est la transition d'Ising.

Le modèle d'Ising F sur le réseau carré 2D

Les spins d'Ising ne peuvent prendre que deux orientations opposées. L'énergie d'une configuration est donnée par

$$- \frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j, \quad (1.20)$$

où chaque lien est parcouru dans les deux sens. Dans l'état fondamental, les spins sont tous identiques : l'espace du paramètre d'ordre E_{op} peut être choisi égal à $\sim \{-1, 1\}$. On ne peut pas passer continûment d'un fondamental à l'autre. Les excitations sont toutes gappées. Le théorème de Mermin-Wagner ne s'applique donc pas ici car il n'y a aucune symétrie continue. L'aimantation diminue en effet de façon continue avec la température, pour atteindre 0 en $T_c = 2.269J$ lors d'une transition critique. Cette transition est particulièrement importante en physique statistique car d'autres modèles possèdent les mêmes propriétés à grande échelle, près de la température critique. Les quantités thermodynamiques de ce système ont été calculées analytiquement par Onsager [82]. Les exposants critiques sont les suivants :

$$\alpha = 0, \quad \beta = 1/8, \quad \nu = 1, \quad \eta = 1/4, \quad \gamma = 7/4, \quad \delta = 15, \quad \Delta = 15/8.$$

Chacun de ces exposants caractérise le comportement du système à la transition :

$$m \sim |t|^\beta \Phi_\pm(h/|t|^\Delta),$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu},$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma},$$

$$C_v \sim |t|^{-\alpha},$$

$$G(r) \sim r^{2-d-\eta} \Gamma\left(\frac{r}{|t|^{-\nu}}, \frac{h}{|t|^{\Delta}}\right),$$

$$h_c \sim |m|^\delta \text{ si } t > 0,$$

où t est la température réduite $(T - T_c)/T_c$, m est l'aimantation, ξ est la longueur de corrélation (taille des amas), χ est la susceptibilité magnétique, C_v est la chaleur spécifique, G est la fonction de corrélation de spin, h_c est un champ magnétique caractéristique et $\Phi_\pm$ et f sont des fonctions universelles.

Le modèle d'Ising est purement discret : il ne possède aucune symétrie continue. Nous allons maintenant voir des exemples où des symétries discrètes et continues coexistent.

Exemple de symétries discrètes dans des modèles Heisenberg

Choisissons un Hamiltonien invariant par rotation et réflexion des spins : $S_s = O_3$, et par toutes les symétries du réseau S_R .

Commençons par un cas sans symétrie discrète pour bien comprendre ce qui entraîne une brisure de symétrie discrète. Sur le réseau triangulaire, si l'état fondamental est l'état AF premiers voisins (Fig. 1.1(b)), $S_e \sim S_R \times \{I_S, \sigma_S\}$: les symétries du réseau sont toutes respectées modulo une transformation de S_S , et seules deux transformations de spin ne modifient pas l'état : l'identité I_S et la réflexion σ_S dans le plan des spins. $E_{op} \sim O_3/\{I_S, \sigma_S\} \sim SO_3$. On relie deux états fondamentaux quelconques par une rotation globale des spins. Par une succession de rotations infinitésimales, on construit donc un chemin continu reliant deux fondamentaux quelconques de E_{op} : on n'a pas de brisure de symétrie discrète. D'après le théorème de Mermin-Wagner, toutes les symétries sont restaurées dès que la température est non nulle.

Toujours sur le réseau triangulaire, prenons cette fois l'état fondamental à quatre sous-réseaux où les spins sont aux sommets d'un tétraèdre (Fig.1.6(b)). Ils ne sont pas coplanaires et possèdent une chiralité scalaire σ_{ijk} (Eq.1.19) non nulle sur chaque triangle ijk du réseau. $S_e \sim S_R \times \{I_S\}$: toutes les symétries de S_S sont brisées. $E_{op} \sim O_3$. Contrairement au cas précédent, on ne peut pas toujours relier deux états fondamentaux par une rotation globale des spins. Cela n'est possible que s'ils ont les mêmes chiralités. Dans le cas contraire, ils sont images l'un de l'autre par la transformation $\mathbf{S}_i \rightarrow -\mathbf{S}_i$, suivie d'une rotation. On distingue deux catégories d'état fondamentaux, de chiralités opposées, ce qui permet de d'associer à chaque état un paramètre d'Ising, valant ± 1 et appelé chiralité.

Cet état chiral est le fondamental d'Hamiltoniens possédant des interactions d'échange cyclique à quatre corps [50] [52]. Au dessus d'une certaine température critique non nulle, la symétrie $\mathbf{S}_i \mapsto -\mathbf{S}_i$ est restaurée lors d'une transition de phase qui a d'abord été crue critique. Puis, l'amélioration des simulations numériques a révélé qu'elle était faiblement du premier ordre [76].

Tout fondamental de spins non coplanaires possède une chiralité pouvant donner lieu à une transition chirale (pour H respectant les symétries données au début du paragraphe). C'est le cas pour l'état cuboc2, qui est le fondamental d'un modèle $J_1 - J_2$ sur kagome. L'étude de la transition chirale sera détaillée dans la suite de ce chapitre.

D'autres exemples d'états fondamentaux possédant une symétrie discrète, différente de la chiralité, existent :

- le réseau carré avec échanges premiers et deuxième voisins ($J_2 > J_1/2$) tels que l'état fondamental soit constitué de deux réseaux carrés ordonnés antiferromagnétiquement imbriqués l'un dans l'autre. Alors, $E_{op} \sim \mathcal{S}_2 \times \mathcal{S}_2$. Mais en réalité, l'ordre par le désordre sélectionne les états colinéaires, ce qui donne $E_{op} \sim \mathcal{S}_2 \times \mathbb{Z}_2$: des lignes ferromagnétiques de spins se forment dans l'une des deux directions possibles, brisant

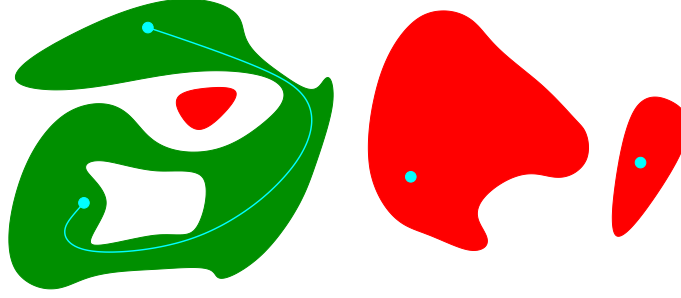


FIG. 1.13 – Exemple d’un espace connexe et d’un espace non connexe, inclus dans $\mathbb{R}^2$. L’espace vert est connexe : on peut relier un couple quelconque de ses points par un chemin continu dans cet espace. Dans le rouge, c’est impossible. L’espace rouge comporte trois composantes connexes.

la symétrie par rotation de 90° et générant un paramètre d’ordre $\mathbb{Z}_2$. Cette symétrie est restaurée lors d’une transition d’Ising [15] [109].

- le réseau carré avec échanges premiers et troisièmes voisins tels que l’état fondamental soit un état spiral de vecteur d’onde (q, q) ou $(q, -q)$ incommensurable. $E_{op} \sim \{I, \sigma\} \times SO_3$: toute rotation des spins combinée ou non avec la réflexion du réseau selon l’axe $(1, 0)$ appliquée à un état fondamental donne un nouvel état fondamental. La symétrie par réflexion du réseau est restaurée à température finie lors d’une transition de phase supposée dans la classe d’universalité d’Ising [10].

Nous n’avons pour l’instant vu que des exemples où les symétries discrètes fournissaient un paramètre d’Ising. Sur les réseaux triangulaire [19] [56] et hexagonal [31], le même type de transition que la précédente pourrait se produire, avec cette fois un paramètre discret à trois valeurs dans le fondamental, selon la direction du réseau privilégiée. La transition pourrait se trouver dans la classe d’universalité du modèle de Potts $q = 3$ (revue de ce modèle : [115]), mais elle n’a pas été étudiée jusqu’à présent à notre connaissance.

Sur le réseau kagomé, si l’on fait l’hypothèse que les ordres colinéaires sont favorisés dans la zone où l’ordre octaédrique est fondamental, on a alors un paramètre discret à quatre valeurs possibles, correspondant aux quatre GS de la Fig.1.10(b). Continuant sur notre lancée, on peut proposer une transition à température finie dans la classe d’universalité du modèle de Potts $q = 4$ (ce modèle est un point tricritique).

Connexité de l’espace du paramètre d’ordre

La non-coplanarité des spins d’un modèle n’est pas suffisante pour affirmer que le système est le siège d’une transition chirale. Par exemple, si l’on applique un champ magnétique dépendant du site sur le réseau triangulaire, de façon à favoriser une orientation des spins selon les 4 sommets d’un tétraèdre fixé, l’état fondamental sera unique et aucune symétrie discrète ne pourra être brisée, bien que les spins possèdent une chiralité scalaire non nulle.

L’information dont on a besoin pour déterminer si l’état fondamental possède une symétrie discrète se trouve dans l’espace du paramètre d’ordre E_{op} . Si l’on peut relier n’importe quel couple de points de E_{op} par un chemin continu dans cet espace, aucune symétrie discrète n’est brisée à $T = 0$. E_{op} est alors connexe (Fig.1.13) et toutes les symétries brisées sont restaurées à température nulle. Par contre, s’il comporte plusieurs composantes connexes, disons un nombre n , un état fondamental possédera un paramètre d’ordre discret à n valeurs possibles, dépendant de la composante connexe dans laquelle il se trouve. Ce paramètre d’ordre peut donner lieu à une transition de phase à température

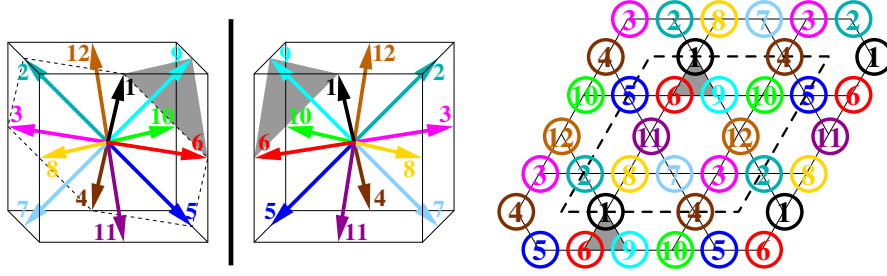


FIG. 1.14 – Etat fondamental du modèle $J_1 - J_2$ sur kagome pour $J_1 < 0$ et $J_2 > -J_1/3$: l'état cuboc2. L'état associé aux orientations des spins de gauche (obtenues par réflexion des spins de droite dans un plan miroir) n'est pas relié continûment dans E_{op} à l'état de droite car ils se trouvent chacun dans une composante connexe différente de E_{op} . Un état fondamental est donc chiral.

finie, sans déroger au théorème de Mermin-Wagner.

Le modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau kagome

On s'intéresse au domaine de paramètres où le fondamental est l'état cuboc2 (Fig.1.7(f) page 19). L'espace du paramètre d'ordre est isomorphe à O_3 , qui possède deux composantes connexes : dans l'état fondamental, la symétrie par retournement des spins est brisée (Fig.1.14).

On définit un paramètre d'ordre m_σ associé à cette symétrie :

$$m_\sigma = \frac{3}{2N_s} \sum_{\langle ijk \rangle} (-1)^{\alpha_{ijk}} (\mathbf{S}_i \wedge \mathbf{S}_j) \cdot \mathbf{S}_k, \quad (1.21)$$

où la somme porte sur tous les triangles du réseau à N_s sites et $\alpha_{ijk} = 0$ (resp. 1) sur les triangles pointe en haut (resp. pointe en bas) dont les sommets ijk sont parcourus dans le sens trigonométrique.

Plusieurs quantités thermodynamiques ont été évaluées numériquement par un algorithme Monte Carlo de *parallel tempering* en fonction de la température T : la chiralité moyenne, la chaleur spécifique, l'énergie moyenne par site. L'analyse en taille finie de ces quantités (qui sera détaillée ultérieurement sur un autre exemple) mène à la conclusion que la transition chirale est du premier ordre pour $1/3 < J_2/|J_1| < 0.45$ [25] (Fig.1.15).

2.2 Les vortex

Le modèle $J_1 - J_2$ sur kagome donne lieu à une transition chirale qui peut être soit du premier ordre, soit du second ordre, selon la valeur de J_1 et de J_2 . La symétrie brisée étant $\mathbb{Z}_2$, la transition pourrait se trouver dans la classe d'Ising lorsqu'elle est continue.

Cependant, deux éléments rendent cette transition différente d'une transition d'Ising. D'abord, les ondes de spins, c'est à dire les oscillations à grande longueur d'onde des spins, d'énergie tendant vers 0 lorsque la longueur d'onde tend vers l'infini. Enfin, l'existence de défauts topologiques ponctuels appelés vortex, que nous allons définir.

Définition d'un vortex

Soit un modèle de spins dont on connaît E_{op} . Peut-il posséder des vortex ? On divise le réseau en mailles de façon à ce que l'on puisse associer un élément de E_{op} à chaque

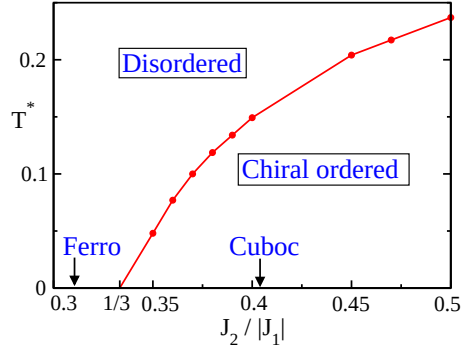


FIG. 1.15 – Diagramme de phase du modèle $J_1 - J_2$ sur kagome. Température de transition T^* en fonction de $J_2/|J_1|$. Lorsque $J_2/|J_1| < 0.45$, la transition est du premier ordre. Au dessus, elle est continue ou très faiblement du premier ordre.

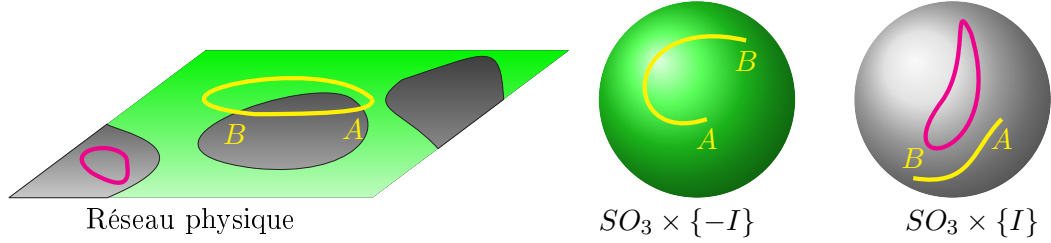


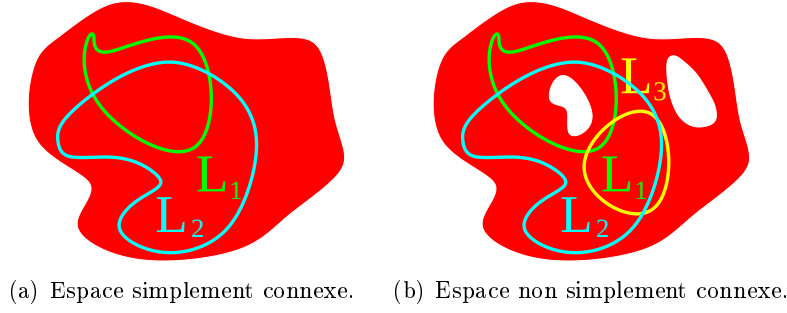
FIG. 1.16 – Sur le réseau d'un modèle dont $E_{op} \sim O_3$, les domaines de chiralité sont représentés en vert et gris. Une boucle sur ce réseau peut rester dans un domaine de chiralité constante, comme la boucle magenta, ou traverser des murs de domaine, comme la boucle jaune. Dans ce dernier cas, la vorticité de la boucle n'est pas définie.

maille, connaissant uniquement ses spins. Par exemple, si l'état est ferromagnétique, un site par maille sera suffisant, puisque l'orientation d'un spin est suffisante pour caractériser complètement un état fondamental. Si l'état est chiral, il faudra au moins trois sites par maille pour connaître la chiralité du fondamental. Les mailles forment un nouveau réseau R' .

On choisit une boucle orientée passant par les mailles $i_0, \dots, i_{n-1}, i_n \equiv i_0$ et entourant une plaquette élémentaire de R' . A chaque maille on associe un élément de E_{op} et on forme ainsi une boucle dans $E_{op} : M_{i_0}, \dots, M_{i_{n-1}}, M_{i_n}$. Le chemin choisi reliant M_i à M_{i+1} est le plus court.

Si deux M_i consécutifs ne font pas partie de la même composante connexe de E_{op} , on ne peut pas trouver de chemin les joignant dans E_{op} : la vorticité de la boucle n'est pas définie (Fig.1.16). Si tous les M_i sont dans la même composante connexe de E_{op} , on a bien formé une boucle de E_{op} qui peut être soit contractible (on peut la déformer continûment jusqu'à la réduire à un point), dans ce cas la maille élémentaire ne porte pas de vortex, soit non contractible : on a repéré un coeur de vortex (CV).

L'existence de vortex équivaut donc à l'existence de boucles non contractibles dans E_{op} . Le groupe des classes de boucles d'un espace topologique est appelé premier groupe d'homotopie et est noté π_1 [64] [49]. Deux boucles sont dans la même classe si elles sont continûment déformables l'une en l'autre. Si π_1 ne comporte que l'élément neutre, on dit que l'espace est *simplement* connexe (exemples : $\mathbb{R}$, ou $\mathcal{S}_2$) (Fig.1.17(a)) : toutes les boucles


 FIG. 1.17 – Les boucles L_1 et L_2 sont homotopes, mais pas les boucles L_1 et L_3 .

sont contractibles. Dans le cas contraire (Fig.1.17(b)), certaines boucles de l'espace ne sont pas contractibles (exemples : le tore, ou $\mathcal{S}_1$). À chaque plaquette élémentaire de R' sur laquelle la vorticité est définie, on associe l'élément de $\pi_1(E_{op})$ de sa boucle dans E_{op} .

La loi de composition des boucles correspond à la loi de composition du groupe π_1 : la vorticité v d'une boucle quelconque est donnée par la composition des vorticités des boucles élémentaires qu'elle contient⁵.

Après ces définitions, nous allons voir des exemples dans lesquels existent des vortex : le modèle Heisenberg AF sur le réseau triangulaire, et le modèle $J_1 - J_2$ sur kagome avec fondamental cuboc2.

Le modèle Heisenberg AF sur le réseau triangulaire : $E_{op} \sim SO_3$

Dans l'état fondamental, les spins sont coplanaires, à 120 degrés les uns des autres (Fig.1.6(c)) et l'on a vu que l'espace du paramètre d'ordre $E_{op} \sim SO_3$. Une maille du fondamental possède trois sites. À chaque maille (prenons par exemple les triangles pointe en haut pavant le réseau), on associe un état fondamental, en supposant que les fluctuations thermiques sont assez faibles pour que ce soit possible sans ambiguïté. Puis à ce fondamental, on associe un élément de SO_3 . On peut alors associer à une boucle passant par des mailles du réseau une boucle dans SO_3 .

Il existe deux classes de boucles dans SO_3 , ce que prouve l'existence d'un morphisme f du groupe des quaternions unitaires Q_1 dans SO_3 :

$$f : \quad Q_1 \rightarrow SO_3$$

$$(a, b, c, d) \mapsto \begin{pmatrix} 1 - 2b^2 - 2c^2 & 2dc - 2ba & 2db + 2ca \\ 2dc + 2ba & 1 - 2b^2 - 2d^2 & 2cb - 2da \\ 2db - 2ca & 2cb + 2da & 1 - 2c^2 - 2d^2 \end{pmatrix}. \quad (1.22)$$

Chaque élément de SO_3 possède deux antécédents q et $-q$ ($SO_3 \sim Q_1/\mathbb{Z}_2$). Il existe donc un homéomorphisme entre SO_3 et $\mathbb{RP}^3$ ($\mathbb{RP}^3$ est la sphère unité sur laquelle deux points antipodaux sont identifiés). Le premier groupe d'homotopie de Q_1 ne compte que l'élément neutre car $Q_1 \sim \mathcal{S}_3$. Celui de $\mathbb{RP}^3$ comporte deux éléments : un chemin fermé de $\mathbb{RP}^3$ dessiné sur $\mathcal{S}_3$ de façon à ce qu'il soit continu peut soit revenir à son point de départ, soit se terminer à l'antipode de son point de départ (Fig.1.18). $\pi_1(SO_3)$ a la même

⁵Il faut bien entendu respecter le sens et l'ordre des boucles élémentaires pour qu'en les suivant l'une après l'autre, on forme la grande boucle. Leur ordre n'est important que lorsque π_1 est non-Abélien. Le sens est important lorsque les vortex et les antivortex n'ont pas la même charge : pour $\pi_1 = \mathbb{Z}$ par exemple, mais pas pour $\pi_1 = \mathbb{Z}_2$.

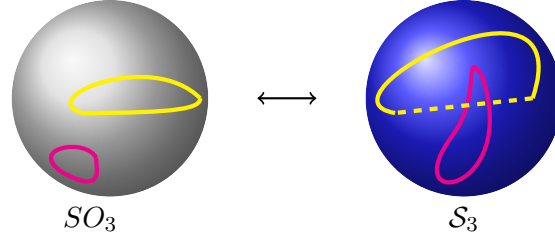


FIG. 1.18 – Le premier groupe d’homotopie de SO_3 est $\mathbb{Z}_2$. On peut représenter un chemin continu de SO_3 par un chemin continu sur $\mathcal{S}_3$ (sphère unité à 4D). Si ce chemin est fermé dans SO_3 (si c’est une boucle), il ne l’est pas forcément dans $\mathcal{S}_3$ car il peut se terminer à un point opposé à son point de départ. C’est le cas de la boucle bleue dont la classe d’homotopie dans SO_3 n’est pas la classe de l’élément neutre.

structure que tout groupe à deux éléments (par exemple, que le groupe additif $\mathbb{Z}_2 = \{0, 1\}$ ou multiplicatif $\{1, -1\}$).

Il existe une seule classe de boucles non triviales, donc un seul type de vortex. On appelle ce type de vortex les vortex $\mathbb{Z}_2$. Ils sont différents des vortex $\mathbb{Z}$ que l’on trouve dans le modèle XY car ils ont leurs propres antivortex : une boucle entourant deux coeurs de vortex (CV) possède toujours une vorticit   neutre. L’existence d’une transition de phase du type Kosterlitz-Thouless (KT) [51] pour les vortex $\mathbb{Z}_2$ est encore aujourd’hui sujet    d  bat. Des auteurs affirment l’observer ([48], [47]). Une diff  rence importante avec la transition KT est la d  croissance exponentielle des corr  lations de spin, m  me    basse temp  rature. La rigidit  , qui est un param  tre d’ordre de la transition KT, n’en est plus un pour cette transition   ventuelle : elle vaut 0 quelle que soit la temp  rature. Aucun param  tre d’ordre n’a   t   trouv   pour cette transition, mais une loi des p  rim  tres et des aires pour la vorticit   d’une grande boucle (respectivement    basse et haute temp  rature) a   t   propos  e pour diff  rencier les deux phases. D’autre part, des valeurs diff  rentes de la rigidit      taille finie ont   t   mesur  es ([9], [8], [114]).

Le mod  le $J_1 - J_2$ sur le r  seau kagome avec fondamental cuboc2 : $E_{op} \sim O_3$

Comme pr  c  demment, on divise le r  seau en un r  seau de mailles de 12 sites, pour pouvoir associer aux points de ce nouveau r  seau un   l  ment de O_3 .    une boucle du r  seau ne correspond pas obligatoirement    une boucle de O_3 car O_3 poss  de deux composantes connexes : on ne peut pas toujours relier par un chemin continu deux de ses points. C’est le cas uniquement si tous les points de la boucle se trouvent dans la m  me composante connexe de O_3 (Fig.1.16).

   une plaquette   l  mentaire du r  seau, on n’associe donc une vorticit   $v = 0$ ou 1 que si tous les   l  ments de O_3 sont dans la m  me composante connexe. On dit d’une telle plaquette qu’elle est uniforme.

Relation entre la pr  sence de vortex $\mathbb{Z}_2$ et la transition chirale

Gr  ce aux vorticit  s $v(p_u) = 0$ ou 1 de chaque plaquette   l  mentaire uniforme p_u , on d  finit une densit   de vortex n_v :

$$n_v = \frac{\sum_{p_u} v(p_u)}{\sum_{p_u} 1}. \quad (1.23)$$

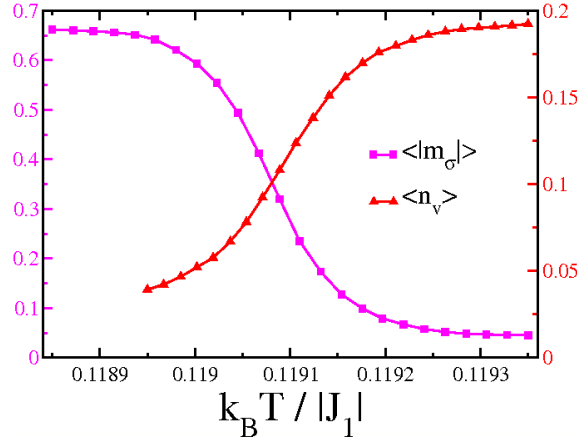


FIG. 1.19 – Evolution de la densité de vortex (rouge) et de la chiralité (magenta) en fonction de la température pour un échantillon de taille $L = 64$ et $J_2/|J_1| = 0.38$ sur le modèle $J_1 - J_2$ sur réseau kagome (extrait de [24]).

La moyenne de cette quantité est proche de zéro à basse température et augmente brusquement (Fig.1.19). En y comparant la chiralité moyenne, on observe que la température d'explosion du nombre de vortex correspond à la température de la transition chirale. Les principales difficultés de ce modèle sont la maille de 12 sites (qui nécessite des simulations numériques avec des réseaux très grands pour avoir un nombre raisonnable de plaquettes élémentaires) et le nombre de degrés de liberté très élevé à l'intérieur d'une maille (24 degrés de libertés car 12 spins, d'où une difficulté pour associer à ces 24 paramètres un élément de O_3). Pour étudier plus en détail les raisons de ce lien entre vortex et chiralité, nous allons utiliser un modèle simplifié.

2.3 Le modèle Ising– $\mathbb{R}P_3$: transition chirale et vortex

Les ingrédients que l'on veut trouver dans ce modèle sont au nombre de trois :

- des modes de Goldstone, donc un paramètre d'ordre continu,
- une variable d'Ising : la chiralité,
- des défauts topologiques $\mathbb{Z}_2$.

Pour les avoir, il suffit de prendre un espace du paramètre d'ordre isomorphe à O_3 . On choisit un modèle que l'on nomme Ising– $\mathbb{R}P_3$ où sur chaque site d'un réseau carré vit un élément de O_3 , autrement dit trois vecteurs unitaires $\mathbf{S}_i^a$ ($a = 1, 2, 3$) obéissant à la contrainte d'orthogonalité

$$\mathbf{S}_i^a \cdot \mathbf{S}_i^b = \delta^{a,b}, \quad (1.24)$$

et l'on choisit les interactions suivantes

$$H = - \sum_{a=1}^3 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i^a \cdot \mathbf{S}_j^a. \quad (1.25)$$

On considère ainsi trois modèles Heisenberg ferromagnétiques, couplés par la contrainte de l'Eq.1.24. Un exemple de configuration est donné Fig.1.20. A $T = 0$, l'énergie est minimisée par toute configuration où les trièdres sont orientés identiquement, et l'espace du paramètre d'ordre est O_3 comme voulu.

Nous allons tout d'abord reformuler ce modèle grâce à des quaternions, puis nous en ferons une étude numérique d'abord dans une version simplifiée, sans chiralité, puis, avec la chiralité. Enfin, nous expliquerons le lien entre les vortex et la transition chirale.

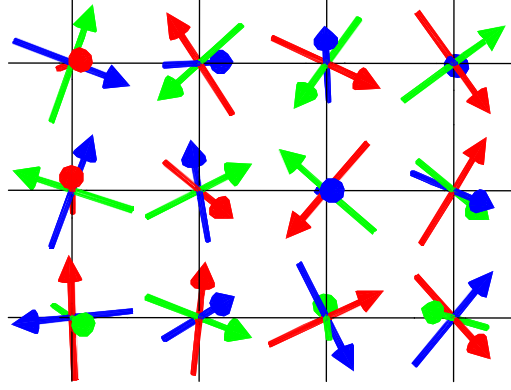


FIG. 1.20 – Exemple de configuration du modèle Ising- $\mathbb{R}P_3$ sur un réseau carré. Les spins $\mathbf{S}_i^a$ sont en rouge (resp. bleu, vert) pour $a = 1$ (resp. 2,3). Ils sont liés par la contrainte d'orthonormalité de l'Eq.1.24.

Reformulation du modèle

Chaque trièdre peut être décrit par sa chiralité $\sigma_i = \pm 1$ et par une matrice de SO_3

$$\mathbf{S}_i^1 = \sigma_i M_i \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_i^2 = \sigma_i M_i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_i^3 = \sigma_i M_i \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

L'Eq.1.25 devient alors

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \text{Tr} (M_i^t M_j). \quad (1.27)$$

La matrice $R_{\mathbf{n},\theta}$ d'une rotation d'un angle θ autour d'un axe $\mathbf{n} = (\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ s'écrit

$$R_{\mathbf{n},\theta} = \begin{pmatrix} \cos \theta + (1 - \cos \theta)x^2 & (1 - \cos \theta)xy + z \sin \theta & (1 - \cos \theta)xz - y \sin \theta \\ (1 - \cos \theta)xy - z \sin \theta & \cos \theta + (1 - \cos \theta)y^2 & (1 - \cos \theta)yz + x \sin \theta \\ (1 - \cos \theta)xz + y \sin \theta & (1 - \cos \theta)yz - x \sin \theta & \cos \theta + (1 - \cos \theta)z^2 \end{pmatrix}. \quad (1.28)$$

Grâce au morphisme surjectif de l'Eq.1.22, on peut lui associer deux quaternions unitaires : $\pm q = \pm(\cos \theta/2, z \sin \theta/2, y \sin \theta/2, x \sin \theta/2)$. De cette façon, on choisit un quaternion q_i pour chaque matrice M_i (le signe n'a pas d'importance). La matrice $M_i^t M_j$ correspond alors aux deux quaternions opposés $\pm q_i^{-1} q_j$. Cherchons maintenant à exprimer la trace de $M_i^t M_j$ en fonction de q_i et q_j .

$$\text{Tr} (M_i^t M_j) = 4 \cos^2 \theta/2 - 1 = 4 ((q_i^{-1} q_j)_1)^2 - 1, \quad (1.29)$$

où $(q_i^{-1} q_j)_1$ est la première des quatre composantes du quaternion $q_i^{-1} q_j$. Les règles de produit des quaternions nous donnent

$$((q_i^{-1} q_j)_1)^2 = \sum_{u=1}^4 q_{iu} q_{ju}. \quad (1.30)$$

Par conséquent, en associant à chaque matrice M_i un vecteur unitaire $\mathbf{v}_i$ de $\mathcal{S}_3$ ayant pour coordonnées les composantes de q_i , on peut réécrire l'énergie sous la forme

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j (4(\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j)^2 - 1). \quad (1.31)$$

On vérifie sur cette équation que le signe choisi pour q_i n'a aucune influence sur l'énergie.

Cette reformulation du modèle en terme de vecteurs unitaires à 4 dimensions rend très simple l'échantillonnage des configurations lors de simulations Monte Carlo. A partir de trois nombres aléatoires (r , η and ν) tirés uniformément et de manière indépendante sur $[0, 1]$, on peut échantillonner uniformément les points de $\mathcal{S}_3$:

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} \sqrt{r} \cos(2\pi\eta) \\ \sqrt{r} \sin(2\pi\eta) \\ \sqrt{1-r} \cos(2\pi\nu) \\ \sqrt{1-r} \sin(2\pi\nu) \end{pmatrix}. \quad (1.32)$$

Calcul de la vorticit   d'une plaquette

Cherchons la vorticit   d'une plaquette   l  mentaire carr  e $ijkl$ uniforme ($\sigma_i = \sigma_j = \sigma_k = \sigma_l$). Sur chaque site i , un   l  ment M_i de SO_3 indique l'orientation des tri  dres, ainsi que deux   l  ments $\pm q_i$ de Q_1 , correspondant aux deux vecteurs $\pm \mathbf{v}_i$ de $\mathcal{S}_3$. La matrice $M_{i \rightarrow j} = M_j M_i^{-1}$ est la matrice de rotation qui envoie le tri  dre i sur le tri  dre j . Elle indique le chemin    parcourir dans SO_3 pour passer de M_i    M_j . Bien s  r, si l'on multiplie les matrices des 4 liens autour de la plaquette $ijkl$, on obtient l'identit  

$$M_{l \rightarrow i} M_{k \rightarrow l} M_{j \rightarrow k} M_{i \rightarrow j} = I_3, \quad (1.33)$$

car on a form   une boucle dans SO_3 . Par contre, si l'on fait la m  me chose dans l'espace des quaternions unitaires Q_1 avec $q_{i \rightarrow j} = q_j q_i^{-1}$, on obtient le quaternion unit  , ou son oppos   (l'un des deux quaternions ant  c  dents de I_3 par le morphisme 1.22) :

$$q_{l \rightarrow i} q_{k \rightarrow l} q_{j \rightarrow k} q_{i \rightarrow j} = \pm 1_{Q_1}. \quad (1.34)$$

Le signe nous indique la classe d'homotopie de la boucle de SO_3 . Il y a quatre possibilit  s de chemin entre les points $\pm \mathbf{v}_i$ et $\pm \mathbf{v}_j$ sur $\mathcal{S}_3$, selon les signes choisis. On fixe arbitrairement $\mathbf{v}_i$ et on choisit le signe de $\mathbf{v}_j$ minimisant le chemin (c'est    dire tel que $\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j > 0$). Puis, de la m  me fa  on, on choisit les signes de $\mathbf{v}_k$ et de $\mathbf{v}_l$. Pour le dernier lien, le signe de $\mathbf{v}_i$ a d  j   t   fix   : on choisit un nouveau $\mathbf{v}'_i$ tel que $\mathbf{v}_l \cdot \mathbf{v}'_i > 0$. Si $\mathbf{v}_i = \mathbf{v}'_i$, on a form   une boucle dans $\mathcal{S}_3$ (boucle verte de la Fig.1.18) et la boucle de d  part de SO_3 est contractible. Si $\mathbf{v}_i = -\mathbf{v}'_i$, on a form   un chemin dans $\mathcal{S}_3$ qui commence et se termine en deux points oppos  s (boucle bleue de la Fig.1.18) et $ijkl$ porte un CV.

Reste    calculer $q_{l \rightarrow i} q_{k \rightarrow l} q_{j \rightarrow k} q_{i \rightarrow j}$. En utilisant les propri  t  s de composition des boucles, on peut d  composer la vorticit   de $ijkl$ en la somme des vorticit  s de quatres triangles dont les bases sont les quatre liens du carr   et les sommets sont un site fictif 0 auquel on associe le quaternion $q_0 = \pm 1$ et le vecteur $\mathbf{v}_0 = \pm(1, 0, 0, 0)$ (Fig.1.21), ce qui va nous permettre de trouver une formule tr  s simple pour la vorticit  . On assigne ainsi une vorticit      chaque lien, qui n'a aucun sens    elle seule, mais qui permet de conna  tre la vorticit   du carr   lorsqu'on lui associe les vorticit  s des autres liens du carr  . La valeur de q_0 n'a aucune importance et a   t   choisie de fa  on    simplifier les calculs. La changer modifie les vorticit  s de liens, mais pas la vorticit   de la plaquette : c'est un changement de jauge. En chaque site, on choisit $\mathbf{v}_i$ de fa  on    avoir $\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_0 > 0$. Alors, la vorticit   d'un lien ij est tout simplement donn  e par le signe de $\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j$. En r  capitulant, on obtient que la vorticit   du carr   est donn  e par

$$v(ijkl) = \frac{1}{2} \left(1 + \prod_{ijkl} \text{sgn}(\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j) \right), \quad (1.35)$$

ce qui ne d  pend pas du signe des $\mathbf{v}_i$ choisis.

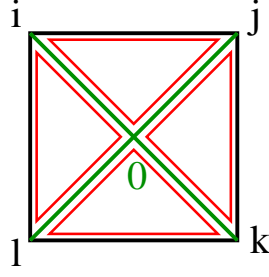


FIG. 1.21 – Calcul de la vorticité sur une plaquette carrée. Le carré $ijkl$ est une plaquette du réseau. On ajoute un site fictif 0. La vorticité de la boucle $ijkl$ est la composition des vorticités des boucles $ij0$, $jk0$, $kl0$ et $li0$ et ne dépend pas du trièdre placé en 0.

Pour étudier ce modèle Ising- $\mathbb{R}P^3$, nous utilisons la méthode Wang-Landau ([107], [106]), détaillée en Annexe B.1 sur des réseaux périodiques de tailles $L \times L$, puis nous faisons une analyse en taille finie. Dans la suite, nous résumerons succinctement les résultats obtenus sur les corrélations entre la vorticité et la chiralité, ainsi que sur l'ordre de la transition. Les détails se trouvent dans l'article [67].

Nucléation de vortex au voisinage des murs de domaines de chiralité

On considère d'abord le modèle simplifié où l'on a gelé les degrés de liberté chiraux en fixant par exemple $\sigma_i = +1$. Dans cette limite, on retrouve le modèle $\mathbb{R}P^3$, possédant des ondes de spin et des vortex $\mathbb{Z}_2$, étudié par exemple par Caffarel *et al.* [9]. Les vortex apparaissent vers une température $T \simeq 1.1$ (Fig.1.22(a)), mais aucun signe ne trahit une éventuelle transition de type KT. A basse température, les vortex sont majoritairement par paires. Une configuration de basse température est représentée Fig.1.22(a).

Reprenons le modèle Ising- $\mathbb{R}P^3$, avec chiralité. Une transition chirale est observée pour une température $T_c = 0.97$. Par l'étude des exposants critiques (chaleur spécifique, chiralité, susceptibilité chirale, cumulants de Binder), la transition semble se trouver dans la classe d'universalité d'Ising (détails dans l'article [67]).

La densité de vortex et une configuration à T_c sont données Fig.1.22(b). On remarque que la température d'apparition des vortex est 0.97, contre 1.1 dans le modèle sans chiralité. Il semble que la chiralité favorise la création de CV. Pour s'en assurer, nous avons étudié un réseau périodique de chiralité gelée : + dans une moitié, - dans une autre (Fig.1.23(a)). On forme ainsi deux anneaux identiques (deux demi-tores) séparées par deux murs de domaine. La densité de vortex à température fixée dépend de la distance r au mur de domaine. Plus on en est proche, plus elle est élevée (voir Fig.1.23(b)). C'est en effet une remarque que l'on aurait pu faire sur la Fig.1.22(b), où les CV semblent se concentrer à proximité des murs de domaine.

Comment expliquer l'attractivité des murs de domaines pour les vortex ? A cause des conditions aux limites périodiques, le nombre de vortex total est pair. Un vortex ne peut donc arriver qu'accompagné de son antivortex. A basse température, ils restent à proximité car s'éloigner l'un de l'autre coûte de l'énergie. Pourtant, sur la configuration de la Fig.1.22(b), ils semblent isolés. En réalité, il n'en est rien. La présence de murs de domaine permet l'existence d'une nouvelle sorte de paire vortex-antivortex : l'un des deux est un CV usuel, l'autre est le mur de domaine, qui porte alors une vorticité non triviale, que nous allons définir.

Choisissons une boucle parcourant des sites de chiralité identique sur notre réseau, de vorticité v . Soit v_u la somme modulo 2 des vorticités de toutes les plaquettes uniformes à

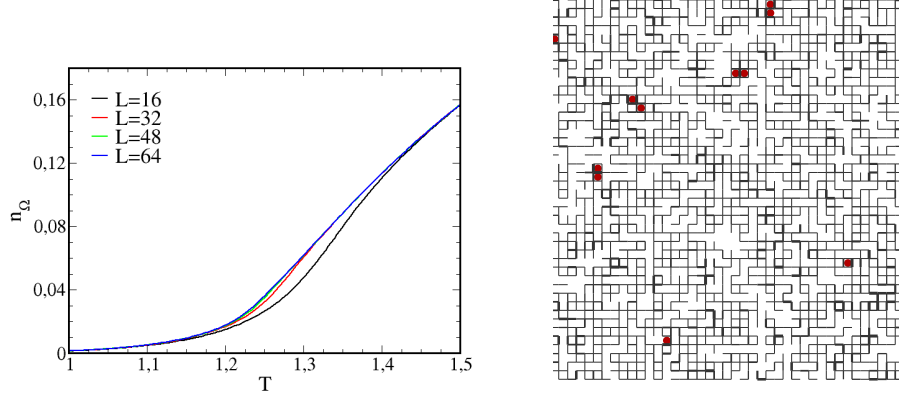
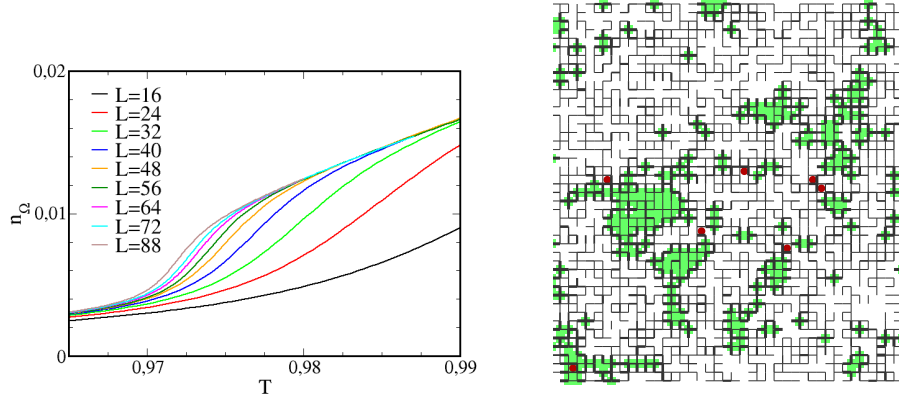

 (a) Modèle $\mathbb{RP}_3$. A droite, $T = 1.1$.

 (b) Modèle Ising- $\mathbb{RP}_3$. A droite, $T = 0.97$.

FIG. 1.22 – Evolution de la densité de vortex avec la température pour différentes tailles de réseau à gauche et exemple de configuration à droite (morceau de taille 45×45 d'un réseau de 72×72). Les points rouges représentent les coeurs de vortex. Les plaquettes blanches et vertes sont de chiralités opposées. L'épaisseur des traits noirs est proportionnelle à $1 - (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j)^2$. Noter la température d'apparition des vortex, différente dans les deux modèles. Ils apparaissent par paires dans le modèle $\mathbb{RP}_3$, et plutôt isolés et proches d'un mur de chiralité dans le modèle Ising- $\mathbb{RP}_3$.

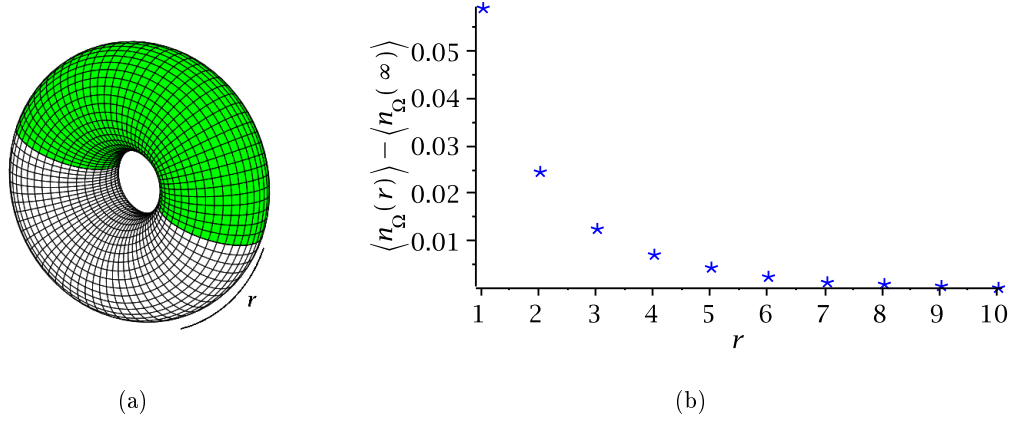


FIG. 1.23 – (a) Le réseau périodique est divisé en deux domaines de chiralité gelée. (b) Densité de vortex à la distance r du mur de domaine par rapport à la densité de vortex sans mur de domaine. Un mur de domaine favorise la présence de vortex.

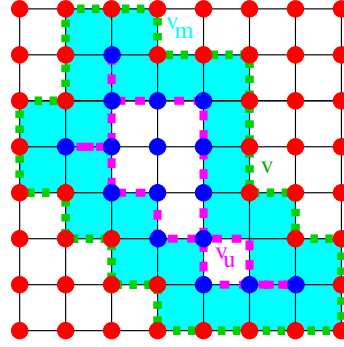


FIG. 1.24 – Définition de la vorticité d'un mur de domaine sur le modèle des trièdres. Les points rouges (bleus) représentent des sites de chiralité 1 (-1). La vorticité v_m du mur du domaine est obtenue en composant la vorticité v de la boucle verte avec la vorticité v_u de la boucle magenta.

l'intérieur la boucle. Si tous les sites à l'intérieur et sur la boucle sont de même chiralité, alors, $v = v_u$. Par contre, s'il y a des murs de domaines à l'intérieur, on peut avoir $v \neq v_u$, ce qui signifie que les plaquettes non prises en compte, c'est à dire les plaquettes non uniformes, portent une vorticité. En faisant ce raisonnement sur la plus petite boucle uniforme (en terme de surface) entourant un domaine sans sous-domaines (voir Fig.1.24) de vorticité v , et en remarquant que v_u est alors la vorticité de la plus grande boucle uniforme à l'intérieur du domaine, on en déduit que la vorticité du mur de domaine v_m est telle que $v_m + v_u = v$ (le signe $+$ est dû à la loi de composition additive sur $\mathbb{Z}_2$).

Ce nouveau type de paire vortex-antivortex modifie le rapport coût énergétique sur gain entropique de la création d'un CV. C'est ce qui explique l'apparition de CV appariés à un mur de domaine à des températures plus basses que celles où l'on observe des paires de CV.

L'ordre de la transition

Nous avons trouvé une transition chirale dans la classe d'universalité d'Ising, alors qu'un premier ordre faible est fréquent : Momoi *et al.* [77], Domenge *et al.* [25]. De plus, le

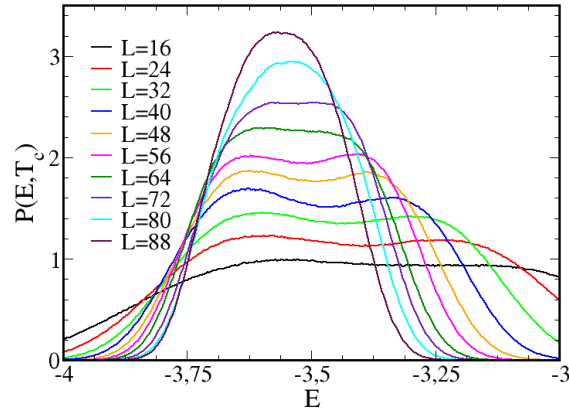


FIG. 1.25 – Distribution des énergies à T_c pour le modèle Ising- $\mathbb{R}P_3$. Pour $L \leq 60$, elle est bimodale, ce qui est généralement caractéristique d’une transition du premier ordre. Mais cette caractéristique disparaît aux grandes tailles.

comportement à petites tailles de notre modèle nous suggère que notre modèle est proche d’un point tri-critique : la distribution des énergies est bimodale à la température de transition pour $L \leq 60$ (Fig.1.25).

Pour confirmer cette hypothèse, nous avons utilisé plusieurs méthodes, détaillés dans l’article [67] :

- une analyse numérique de certaines perturbations du Hamiltonien, qui changent l’ordre de la transition.
- un développement haute température, suivi d’un champ moyen, qui permet de retrouver qualitativement l’évolution de la transition avec les paramètres précédents,
- enfin, une analogie avec le modèle d’Ising dilué possédant un point tri-critique.

En conclusion, le modèle Ising- $\mathbf{RP}_3$ que nous avons créé est un excellent modèle jouet car il permet de comprendre comment les degrés de liberté continus, en le différenciant du modèle d’Ising, peuvent soit laisser inchangées ses propriétés à grande distance, c’est à dire conserver la classe d’universalité de la transition chirale, soit les modifier, rendant la transition du premier ordre.

3 Articles

- [1] *Chirality and $\mathbb{Z}_2$ vortices in an Heisenberg spin model on the Kagomé lattice*, J.-C. Domenge, C. Lhuillier, L. Messio, L. Pierre, P. Viot, Phys. Rev. B, 77, 172413 (2008).
- [2] *Thermal destruction of chiral order in a two-dimensional model of coupled trihedra*, L. Messio, J.-C. Domenge, C. Lhuillier, L. Pierre, P. Viot, G. Misguich, Phys. Rev. B, 78, 054435 (2008).

Chirality and $\mathbb{Z}_2$ vortices in a Heisenberg spin model on the kagome lattice

J.-C. Domenge,^{1,*} C. Lhuillier,² L. Messio,² L. Pierre,² and P. Viot²

¹*Department of Physics and Astronomy and Center for Condensed Matter Theory, Rutgers University, Piscataway, New Jersey 08854-8019, USA*

²*Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, Université Pierre et Marie Curie, CNRS, UMR 7600, Case Courrier 121, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex, France*

(Received 18 April 2008; published 28 May 2008)

The phase diagram of the classical J_1 – J_2 model on the kagome lattice is investigated by using extensive Monte Carlo simulations. In a realistic range of parameters, this model has a low-temperature chiral-ordered phase without long-range spin order. We show that the critical transition marking the destruction of the chiral order is preempted by the first-order proliferation of $\mathbb{Z}_2$ point defects. The core energy of these vortices appears to vanish when approaching the $T=0$ phase boundary, where both $\mathbb{Z}_2$ defects and gapless magnons contribute to disordering the system at very low temperatures. This situation might be typical of a large class of frustrated magnets. Possible relevance for real materials is also discussed.

DOI: [10.1103/PhysRevB.77.172413](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.172413)

PACS number(s): 75.10.Hk, 75.30.-m, 75.40.-s

In classical spin systems, competing interactions commonly frustrate the conventional (π, π) Néel order, possibly leading to more exotic arrangements of the local spins. Prominent examples include helicoidal configurations,^{1–3} which usually break space inversion and time reversal. Noticeably, such spin chirality is a sufficient condition for multiferroic behavior, i.e., nonzero coupling between magnetization and electric polarization.^{4,5}

However, it is not uncommon that nonplanar magnetic orders effectively relieve the frustration even more than helicoidal configurations do. The associated magnetic order parameter is then three dimensional and, hence, also chiral. To date, two such orders have been exhibited, both on triangular-based lattices with competing interactions: A 4-sublattice tetrahedral order was found on the triangular lattice,⁶ while a 12-sublattice cuboctahedral order was more recently found on the kagome lattice.⁷

In two dimensions, complex magnetic orders might seem of purely theoretical interest since gapless spin waves destroy the spin long-range order at arbitrarily low temperatures. However, this disordering process is soft in the sense that at low but finite temperatures, the spin-spin correlations remain large enough to sustain emergent long-range orders. This is exemplified by the two above-mentioned models, wherein chiral long-range order persists up to finite temperatures, whereas long-range order in the spins is lost. Interestingly, the emergent chiral order parameter is Ising-type and in a straightforward extrapolation, one expects that these chiral phases will disappear through a critical transition in the two-dimensional (2D) Ising universality class. However, Momoi *et al.*⁶ showed that in the case of the tetrahedral order, this is only true in the “weak universality” sense.

We point out that such three-dimensional magnetic orders completely break the $SO(3)$ symmetry of Heisenberg interactions. Hence, the order parameter space is $SO(3)$, which supports point defects, namely vortices in two dimensions, around which the order parameter is rotated by 2π . However, note that the rotation of 4π is equivalent to the identity, so that the order parameter may only wind by $\pm 2\pi$, as can be more formally deduced from $\Pi_1 = \mathbb{Z}_2$. This evidences the peculiar topology of $SO(3)$ vortices compared to the well-

known $SO(2)$ vortices involved in the Berezinski–Kosterlitz–Thouless (BKT) transition. In particular, since $SO(3)$ rotations of 4π are equivalent to the identity, $SO(3)$ only supports vortices with a “winding number” unit, as can be more formally deduced through $\Pi_1[SO(3)] = \mathbb{Z}_2$. These $\mathbb{Z}_2$ vortices were first exhibited in an early numerical work by Kawamura and Miyashita⁸ on the antiferromagnetic Heisenberg model on the triangular lattice, wherein the defects were shown to proliferate rather abruptly at a finite temperature. To date, however, there is still no conclusive evidence that a genuine phase transition indeed takes place in this model. On the experimental front, the proof of existence of the $\mathbb{Z}_2$ vortices remains rather elusive, although they may have been indirectly probed in recent nuclear magnetic resonance (NMR) experiments on NaCr_2O_3 .⁹

In this Brief Report, we exhibit $\mathbb{Z}_2$ vortices in the J_1 – J_2 model on the kagome lattice and show that they are responsible for the first-order nature of the chiral transition and we study the effects of frustration on the core energy of these defects.

The Hamiltonian of this model reads

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J_2 + \sum_{\langle\langle i,k \rangle\rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_k, \quad (1)$$

where the first sum runs over pairs of nearest neighbors (at distance 1 on the kagome lattice) and the second sum over pairs of second nearest neighbors (at distance $\sqrt{3}$).

We are interested in the 12-sublattice antiferromagnetic ground state obtained for $J_1 < 0$ and $J_2 > |J_1|/3$ (Ref. 7). The associated order parameter has the symmetry of a cuboctahedron, with the scalar chirality $\sigma_{ijk} = \sqrt{2} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \times \vec{S}_k$ either +1 or –1, where (i, j, k) label the three sites of a triangle clockwise (Fig. 1).

On the kagome lattice, triangles pointing up and those pointing down carry opposite chirality in the ground state and the associated chiral long-range order is evidenced by a finite value of the staggered chirality,

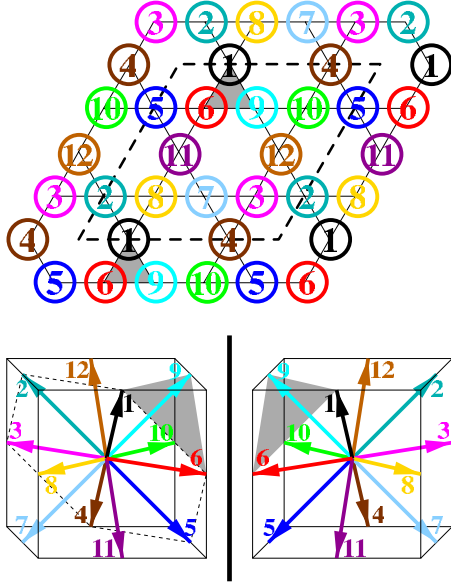


FIG. 1. (Color online) 12-sublattice Néel order on the kagome lattice. Top: The 12-site magnetic unit cell. The different sublattices are indicated by different numbers. Bottom: The order parameter in spin space and its mirror image. The two degenerate ground states only differ by their scalar chirality, namely, the triple product of three spins on a (shaded) triangle.

$$C = \frac{3}{2N} \sum_{\langle ijk \rangle} (-1)^{\alpha_{ijk}} \sigma_{ijk}, \quad (2)$$

where the sum runs over all $2N/3$ triangles of the kagome lattice with $\alpha_{ijk}=0$ (1) for triangles pointing up (down).

To investigate the finite-temperature phase diagram of this model, we perform Monte Carlo simulations by using a parallel tempering algorithm. This method is indeed suitable to overcome the free energy barriers encountered at first-order phase transitions, as we will show, as is the case for the chiral transition in this model. Furthermore, this algorithm is easy to parallelize and yields thermodynamic quantities over a large range of temperatures in a single run once combined with reweighting methods. We simulated samples of linear size L ranging from 12 to 64, with up to $N=3L^2 \leq 12\,288$ spins. Although the tempering method suppresses the slowing down associated with the crossing of free energy barriers, the existence of a large spin-spin correlation length drives an “effective critical” slowing down. Therefore, for the largest samples, the number of Monte Carlo steps needs to be increased up to 2^{22} steps per spin.

The first results of the simulations are collected in Fig. 2. Starting from $J_2/|J_1|=1/3$, the temperature extent of the chiral phase increases with increasing antiferromagnetic J_2 . We have monitored several thermodynamic quantities, namely, the averaged value of the energy per spin $\langle e \rangle$, the specific heat $C_v/k_B = \frac{N}{(k_B T)^2} (\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2)$, the staggered chirality $\langle |C| \rangle$, and the associated susceptibility $k_B \chi_C = \frac{2N}{3T} (\langle C^2 \rangle - \langle |C| \rangle^2)$. Figure 3 shows the rapid destruction of the chiral long-range order at the transition (note the very small temperature scale) for $J_2/|J_1|=0.38$.

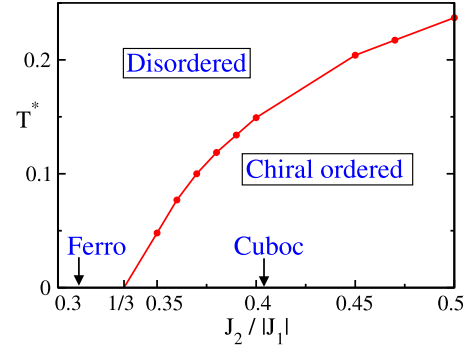


FIG. 2. (Color online) Transition temperature T^* from chiral order to full disorder versus the coupling ratio $J_2/|J_1|$. For $0 \leq J_2/|J_1| \leq 1/3$, the ground state is ferromagnetic. For $J_2/|J_1| > 1/3$, the ground state is the 12-sublattice Néel ordered phase described in the text and abbreviated here as “cuboc.” Dots: Results of Monte Carlo simulations (size effects are much smaller than the size of the symbols). The solid line is a guide to the eye.

To characterize the chiral transition, we use a standard finite-size scaling analysis. For $1/3 < J_2/|J_1| < 0.45$, the energy distribution becomes bimodal in the neighborhood of the transition, and its maxima become more pronounced with increasing sample sizes. Both the maximum of the specific heat $C_v^{\max}(L)$ and of the chiral susceptibility $\chi_C^{\max}(L)$ algebraically increase with L , with exponents within 2.0 ± 0.15 for $J_2/|J_1| \leq 0.38$. For $J_2/|J_1|=0.39$ and 0.40 , the scaling regime is reached only for the largest samples. In addition, by denoting $T_{C_v}(L)$ and $T_{\chi_C}(L)$ as the temperatures of the maximum of $C_v(L)$ and $\chi_C(L)$, one obtains $1/T_{C_v, \chi_C}(\infty) - 1/T_{C_v, \chi_C}(L) \sim 1/L^2$ for $J_2/|J_1| \leq 0.38$. The above analysis shows that the transition does not belong to the expected Ising universality class but is of the first order, although the increasing difficulty to reach the scaling regime, when increasing $J_2/|J_1|$, evidences the concomitant growth

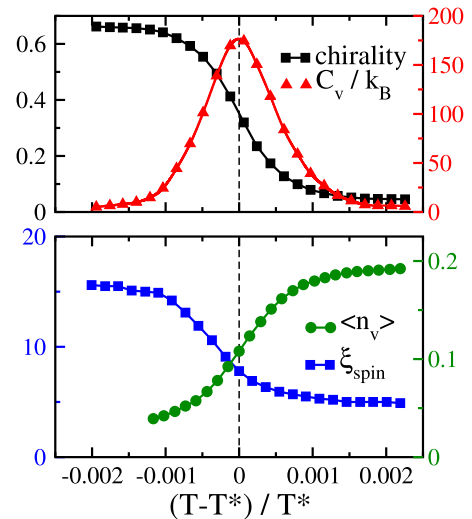


FIG. 3. (Color online) Top: Temperature dependence of the staggered chirality $\langle |C| \rangle$ and the specific heat for $J_2/|J_1|=0.38$ and $L=64$. Temperatures are measured relatively to T^* , the temperature where C_v is maximum. Bottom: spatially averaged spin-spin correlation length ξ_{spin} and the vortex density versus temperature.

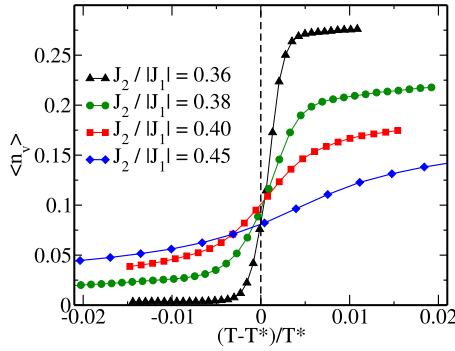


FIG. 4. (Color online) Evolution of the vortex density $\langle n_v \rangle$ around the transition temperature T^* as a function of $J_2/|J_1|$.

of a correlation length. This is consistent with the continuous decrease in the latent heat with increasing $J_2/|J_1|$ (0.034, 0.028, and 0.012 for $J_2/|J_1|=0.36, 0.38$, and 0.45).

To account for the discontinuous nature of the chiral transition, a thermally activated mechanism was looked for: Proliferation of point defects is an obvious candidate and we now proceed to compute the $\mathbb{Z}_2$ vortices of the model. We define the local trihedron of a 12-site magnetic unit cell as follows: $\vec{e}_1 = (\vec{S}_i + \vec{S}_j)/|\vec{S}_i + \vec{S}_j|$, $\vec{e}_3 = (\vec{S}_i - \vec{S}_j)/|\vec{S}_i - \vec{S}_j|$, and $\vec{e}_2 = \vec{e}_3 \times \vec{e}_1$, where i and j are any two sites in the magnetic unit cell that carry noncollinear spins. These trihedra live on a triangular superlattice of spacing 4 in units of the original kagome lattice. Then, we determine the rotation of axis $\vec{n}$ and angle θ between two successive trihedra and disambiguate it from $(-\vec{n}, 2\pi - \theta)$ by using its universal covering element $U(\vec{n}, \theta) = e^{-i\theta/2 \vec{\sigma} \cdot \vec{n}} \in SU(2)$, where $\vec{\sigma}$ are the three Pauli matrices. Finally, we define the $\mathbb{Z}_2$ vorticity inside an elementary (triangular) contour by

$$V_\Delta = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{1}{2} \text{Tr} \left[\prod_{j \in \Delta} U(\vec{n}_j, \theta_j) \right] \right\}, \quad (3)$$

where $V_\Delta = 1(0)$ when the loop Δ encloses a singularity (otherwise).

We computed the vortex density $\langle n_v \rangle = 6/N \sum_\Delta V_\Delta$, where the sum runs over all $N/6$ triangles of the superlattice. The results are displayed in Fig. 3 versus $(T - T^*)/T^*$, where $T^*(L)$ is the temperature of the maximum of $C_v(L)$. They clearly show that the chiral transition is concomitant with the proliferation of vortices.

The behavior of the spin-spin correlation length ξ_{spin} close to the transition evidences that vortex proliferation drastically decreases the magnetic short-range order as well as it kills the emergent chiral order far before the expected critical regime of the chiral phase is attained. Hence, the Ising chiral transition is avoided simply because the vortex proliferation triggers a first-order phase transition that preempts the critical regime. We emphasize that the disordering effect of the $\mathbb{Z}_2$ defects is much stronger than that of $\mathbb{Z}$ vortices at the BKT transition.¹⁰ Figure 3 indeed shows that ξ_{spin} is divided by 3 in a temperature range $\sim 10^{-3}T^*$, and this brutal decrease may even be smoothed by the finite size of the sample.

The chiral correlation length ξ_{chiral} , as computed from the

structure factor of the chirality $\mathcal{C}$ at the transition, measures the discontinuity of the chiral transition. For $J_2/|J_1|=0.38$, we find $\xi_{\text{chiral}}=6$, while it already exceeds the largest available lattice size ($\xi_{\text{chiral}} > 64$) for $J_2/|J_1|=0.40$. Consistently, the vortex proliferation smoothes upon increasing $J_2/|J_1|$ (Fig. 4) and for large enough $J_2/|J_1|=0.45$, the number of vortices at the transition is clearly seen to decrease. Although this is not the core of our study, note that the fast growth of ξ_{chiral} with increasing $J_2/|J_1|$ makes it particularly delicate to identify a possible critical end point to the line of first-order chiral transitions shown in Fig. 2.

The chiral transition in the present J_1 - J_2 model may be typical of many frustrated magnets. Indeed, as emphasized above, as long as the ground state completely breaks the $O(3)$ symmetry of the Heisenberg Hamiltonian, as is the case for nonplanar Néel orders, both chirality and $\mathbb{Z}_2$ vortices exist. The complete breaking of $SO(3)$ induces $\mathbb{Z}_2$ point defects, while the breaking of time reversal [the discrete part of $O(3)$] leads to chiral degenerate ground states. Hence, we expect very similar features for the chiral transition in the present model and for that observed on the triangular lattice by Momoi *et al.*⁶ In a posterior study, these authors indeed noticed that the chiral transition may be weakly discontinuous.

However, the nature of the chiral transition cannot be deduced from symmetry arguments alone and will ultimately depend on the energetics of the two competing mechanisms that suppress chiral order: formation of chiral domain walls versus creation of $\mathbb{Z}_2$ vortices.

In this respect, the case of the J_1 - J_3 model on the square lattice is interesting. Capriotti and Sachdev¹¹ showed that in this model, the doubly degenerate helicoidal ground state results in a finite temperature chiral phase. Although $\mathbb{Z}_2$ vortices are allowed by symmetry, the chiral transition at a finite temperature clearly falls in the 2D Ising universality class.¹¹ Consistently, we understand that in a problem dominated by antiferromagnetic long-wavelength fluctuations, forming a chiral domain wall is much less costly than creating a $\mathbb{Z}_2$ vortex.

Correspondingly, in the J_1 - J_2 model under study, we expect that the competing ferromagnetic and antiferromagnetic interactions will enhance the short-range fluctuations, thereby decreasing the core energy of $\mathbb{Z}_2$ vortices. This qualitative argument is supported by the observation that the discontinuity of the chiral transition is maximal when the competition of interactions is highest, i.e., close to $J_2/|J_1|=1/3$: There, the chiral transition is clearly triggered by the proliferation of defects.

Note also that the decrease in the transition temperature as $J_2/|J_1| \rightarrow 1/3$ suggests that the core energy of the $\mathbb{Z}_2$ vortices vanishes at the $T=0$ phase boundary, i.e., $J_2/|J_1|=1/3$.

However, in this very low-temperature regime, quantum fluctuations are expected to play a significant role. The $T=0$ quantum problem was actually studied previously by three of us:⁷ By using exact diagonalizations for spins $1/2$ as well as spin-wave expansions, it was shown that both classical ground states, ferromagnetic and 12-sublattice antiferromagnetic, survive quantum fluctuations with a quantum phase transition located at $J_2/|J_1| \simeq 1/3$. Hence, although the present study is purely classical, it yields the promising prospect that additional excitations become gapless exactly at the

quantum phase transition, supplementing the usual gapless magnons that exist in either of two neighboring phases. This is highly reminiscent of the breakdown of the Landau paradigm in quantum spin systems,¹² although the route from classical $\mathbb{Z}_2$ vortices to some fractionalized “spinon” excitations for spins 1/2 remains a totally open problem.

Experimentally, a large number of magnets on the kagome lattice have been synthesized up to now and it has been a long route to arrive at the Herbertsmithite ZnCuO , which remains an antiferromagnetic spin liquid down to 50 mK,^{13,14} with a dominant antiferromagnetic interaction of about 190 K. Among other difficulties, the sign of the nearest neighbor coupling is a pending problem: atacamite, parent of paratacamite and herbertsmithite, becomes ferromagnetic around 10 K. Similarly, Cutitmb, the organic compound at the origin of our interest in the present model,^{15,16} was recently shown to experience a transition to three-dimensional (3D) ferromagnetic order around 500 mK.¹⁷ This tendency to ferromagnetism is deeply rooted in the geometry of the exchange paths between the nearest neighbor Cu ions on the kagome

lattice. If the malediction of such low-temperature ferromagnetic orderings can somehow be avoided, possibly through a decrease in the interlayer couplings, the present study would be of direct experimental interest beyond its initial theoretical motivation.

In this Brief Report, we showed that in the J_1 – J_2 model on the kagome lattice, chiral order is wiped out at a finite temperature by the first-order proliferation of $\mathbb{Z}_2$ vortices. In the region of extreme frustration $J_2/|J_1| \approx 1/3$, the core energy of the defects decreases and appears to vanish exactly at the $T=0$ phase boundary. This behavior is probably common to frustrated spin systems in which competing interactions lead to 3D antiferromagnetic order parameters.

We acknowledge important discussions with D. Mouhanna and B. Delamotte on the issue of universality in frustrated magnets, and with M. Mostovoy and D. Khomskii¹⁸ on orbital order. C.L. and L.M. acknowledge the hospitality of KITP. This research was supported in part by the National Science Foundation under Grant No. PHY05-51164.

*domenge@physics.rutgers.edu

¹J. Villain, *J. Phys. (France)* **38**, 385 (1977).

²S. Sachdev and K. Park, *Ann. Phys. (N.Y.)* **298**, 58 (2002).

³D. Bergman, J. Alicea, E. Gull, S. Trebst, and L. Balents, *Nat. Phys.* **3**, 487 (2007).

⁴S.-W. Cheong and M. Mostovoy, *Nat. Mater.* **6**, 13 (2007).

⁵R. Ramesh and N. A. Spaldin, *Nat. Mater.* **6**, 21 (2007).

⁶T. Momoi, K. Kubo, and K. Niki, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2081 (1997).

⁷J.-C. Domenge, P. Sindzingre, C. Lhuillier, and L. Pierre, *Phys. Rev. B* **72**, 024433 (2005).

⁸H. Kawamura and S. Miyashita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **54**, 4530 (1985).

⁹A. Olariu, P. Mendels, F. Bert, B. G. Ueland, P. Schiffer, R. F. Berger, and R. J. Cava, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 167203 (2006).

¹⁰S. V. Isakov, S. Wessel, R. G. Melko, K. Sengupta, and Y. B. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 147202 (2006).

¹¹L. Capriotti and S. Sachdev, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 257206 (2004).

¹²T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A. Vishwanath, and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. B* **70**, 144407 (2004).

¹³J. 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, and Y. S. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 107204 (2007).

¹⁴F. Bert, P. Mendels, A. Olariu, N. Blanchard, G. Collin, A. Amato, C. Baines, and A. D. Hillier, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 117203 (2006).

¹⁵Z. Honda, K. Katsumata, and K. Yamada, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, L625 (2002).

¹⁶Y. Narumi, K. Katsumata, Z. Honda, J.-C. Domenge, P. Sindzingre, C. Lhuillier, Y. Shimaoka, T. C. Kobayashi, and K. Kindo, *Europhys. Lett.* **65**, 705 (2004).

¹⁷Y. Karki and K. Katsumata (private communication).

¹⁸L. N. Bulaeviskii, C. D. Batista, M. Mostovoy, and D. Khomskii, arXiv:0709.0575 (unpublished).

Thermal destruction of chiral order in a two-dimensional model of coupled trihedra

Laura Messio,¹ Jean-Christophe Domenge,² Claire Lhuillier,¹ Laurent Pierre,¹ Pascal Viot,¹ and Grégoire Misguich³

¹*Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, UMR 7600 CNRS, Université Pierre et Marie Curie, Case Courrier 121, 4, Place Jussieu, 75252 Paris Cedex*

²*Department of Physics and Astronomy and Center for Condensed Matter Theory, Rutgers University, Piscataway, New Jersey 08854-8019, USA*

³*Institut de Physique Théorique (IPhT), CNRS URA 2306, CEA, F-91191 Gif-sur-Yvette, France*

(Received 13 June 2008; published 21 August 2008)

We introduce a minimal model describing the physics of classical two-dimensional (2D) frustrated Heisenberg systems, where spins order in a nonplanar way at $T=0$. This model, consisting of coupled trihedra (or Ising- RP^3 model), encompasses Ising (chiral) degrees of freedom, spin-wave excitations, and $\mathbb{Z}_2$ vortices. Extensive Monte Carlo simulations show that the $T=0$ chiral order disappears at finite temperature in a continuous phase transition in the 2D Ising universality class, despite misleading intermediate-size effects observed at the transition. The analysis of configurations reveals that short-range spin fluctuations and $\mathbb{Z}_2$ vortices proliferate near the chiral domain walls, explaining the strong renormalization of the transition temperature. Chiral domain walls can themselves carry an unlocalized $\mathbb{Z}_2$ topological charge, and vortices are then preferentially paired with charged walls. Further, we conjecture that the anomalous size effects suggest the proximity of the present model to a tricritical point. A body of results is presented, which all support this claim: (i) first-order transitions obtained by Monte Carlo simulations on several related models, (ii) approximate mapping between the Ising- RP^3 model and a dilute Ising model (exhibiting a tricritical point), and, finally, (iii) mean-field results obtained for Ising-multispin Hamiltonians, derived from the high-temperature expansion for the vector spins of the Ising- RP^3 model.

DOI: 10.1103/PhysRevB.78.054435

PACS number(s): 05.50.+q, 75.10.Hk

I. INTRODUCTION

On bipartite lattices, the energy of the classical Heisenberg antiferromagnet, as well as that of the XY antiferromagnet, is minimized by collinear spin configurations. Any two such ground states can be continuously transformed into one another by a global spin rotation. By contrast, it is quite common that the ground-state manifold of *frustrated* magnets comprises several connected components, with respect to global spin rotations, that transform into one another under discrete symmetry only. Examples include the fully frustrated XY model of Villain,¹ the J_1 - J_2 Heisenberg model on the square lattice,^{2,3} the J - K_4 model on the triangular lattice,⁴ the J_1 - J_3 model on the square lattice,⁵ and the J_1 - J_2 model on the kagome lattice.^{6,7}

The Mermin-Wagner theorem⁸ forbids the spontaneous breakdown of continuous symmetries, such as spin rotations, at any $T>0$ in two dimensions. However, as was first noticed by Villain,¹ the breakdown of the discrete symmetries relating the different connected components of the ground-state manifold may indeed give rise to finite-temperature phase transition(s). Such transitions have been evidenced numerically in a number of frustrated systems, with either XY (Ref. 9) or Heisenberg spins.^{3,4,6,7}

We are interested in a particular class of models with Heisenberg spins, where the ground state has *nonplanar* long-range order.^{4,6,7} In this case the ground state is labeled by an $O(3)$ matrix. Hence the ground-state manifold is $O(3)=SO(3)\times\mathbb{Z}_2$ which breaks down into two copies of $SO(3)$. The two connected components, say 1 and 2, are exchanged by a global spin inversion ($\vec{S}_i\rightarrow-\vec{S}_i$) and may be labeled by opposite scalar chiralities $\vec{S}_i\cdot(\vec{S}_j\times\vec{S}_k)$. Hence we

introduce a local Ising variable $\sigma(\vec{r})=\pm 1$, which measures whether the spins around $\vec{r}$ have the chirality of sector 1 or 2. At $T=0$ the chiralities $\sigma(\vec{r})$ are long-range ordered and the ground state belongs to a given sector. On the other hand, at high enough temperature the system is fully disordered. Hence, on very general grounds we expect the spontaneous breakdown of the spin inversion symmetry, associated with $\langle\sigma(\vec{r})\rangle\neq 0$, at some intermediate temperature.

Further, from the standpoint of Landau-Ginzburg theory, one anticipates a critical transition in the two-dimensional (2D) Ising universality class. However, of the two relevant models studied so far,^{4,6,7} none shows the signature of an Ising transition. Instead, as was pointed out by some of us in Ref. 7, the existence of underlying (continuous) spin degrees of freedom complicates the naive Ising scenario and actually drives the chiral transition toward first order.

To get a better sense of this interplay between discrete and continuous degrees of freedom, it is useful to remember that in two dimensions, although spin waves disorder the spins at any $T>0$, the spin-spin correlation length may be huge [$\xi\sim\exp(A/T)$] at low temperature,¹⁰ especially in frustrated systems. Hence, it is likely that the effective spin-wave mediated interaction between the emergent Ising degrees of freedom extends significantly beyond one lattice spacing, even at finite temperature and in two dimensions.

Further, we point out that the excitations built on the continuous degrees of freedom are not necessarily limited to spin waves. To be more specific, if the connected components of the ground-state manifold are not *simply* connected, as is the case for $SO(3)$, then there also exist defects in the spin textures. Here, $\Pi_1(SO(3))=\mathbb{Z}_2$ implies that $\mathbb{Z}_2$ point defects (vortices in two dimensions) are topologically stable.

Clearly these additional excitations may also affect the nature of the transition associated with the Ising degrees of freedom. In fact, it was shown in one example⁷ that the first-order chiral transition is triggered by the proliferation of these defects.

In this paper we aim at clarifying the nature of the interplay between the different types of excitations found in Heisenberg systems with nonplanar long-range order at $T=0$. Note that the associated unit cell is typically quite large, which severely limits the sample sizes amenable to simulations. Hence, we introduce a minimal model with the same physical content as those of the frustrated models studied in Refs. 4, 6, and 7.

As was already mentioned, in the above frustrated spin systems, the spin configuration at $T=0$ is entirely described by an $O(3)$ matrix or, equivalently, a trihedron in spin space. At low temperature, the spin long-range order is wiped out by long-wavelength spin waves. However from the considerations above, we anticipate that at low enough temperatures, the description in terms of trihedra in spin space still makes sense, at least locally. To be more specific, we assign three unit vectors $\vec{S}_i^a$ ($a=1,2,3$) to every site i of the square lattice, subject to the orthogonality constraint

$$\vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_i^b = \delta^{a,b}, \quad (1)$$

and we assume the following interaction energy:

$$E = - \sum_{a=1}^3 \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i^a \cdot \vec{S}_j^a. \quad (2)$$

Hence we consider three ferromagnetic Heisenberg models, tightly coupled through rigid constraint (1). At $T=0$, the energy is minimized by any configuration with all trihedra aligned, and the manifold of ground states is $O(3)$, as desired. This alone ensures the existence of the three types of excitations: (i) $SO(3)$ spin waves (corresponding to the rotation of the trihedra), (ii) $SO(3)$ vortices, and (iii) Ising (chiral) degrees of freedom, corresponding to the right- or left-handedness of the trihedra.¹¹

The present study is devoted to the model defined by Eqs. (1) and (2). In Sec. II we reformulate this model more conveniently in terms of chiralities and four-dimensional (4D) vectors, yielding the so-called Ising- RP^3 model. For clarity we first consider a simplified version of this model where the chirality variables are frozen. With this setup we outline our method for detecting vortex cores, as well as analyzing their spatial distribution.

In Sec. III, we return to the full Ising- RP^3 model and evidence the order-disorder transition of the Ising variables at finite temperature. The nature of the transition is asserted by a thorough finite-size analysis using Monte Carlo simulations. To clarify the nature of the interplay between discrete and continuous degrees of freedom, we perform a microscopic analysis of typical configurations.

For the most part, the remainder of our work originates from the observation of peculiar intermediate-size effects at the transition. This leads us to argue that the present model lies close to a tricritical point in some parameter space.

To support our claim, we first introduce and perform Monte Carlo simulations on two modified versions of our model that: (i) preserve the $O(3)$ manifold of ground states and (ii) lead to a first-order transition of the Ising variables. This is further elaborated on in Sec. IV, where we draw an analogy between the Ising- RP^3 model and the large q Potts model. Another analogy, this time to a dilute Ising model, is drawn in Sec. V, where we argue that the regions of strong misalignment of the trihedra, near Ising domain walls, can be treated as “depletions” in the texture formed by the 4D vectors. Finally, in Sec. VI we take another route and trace out the continuous degrees of freedom perturbatively, resulting in an effective model for the Ising variables, which we proceed to study at the mean-field level.

II. BASICS OF THE MODEL

A. Ising- RP^3 formulation

The model defined by Eqs. (1) and (2) can be conveniently reformulated as an Ising model coupled to a four-component spin system with biquadratic interactions. Indeed, every trihedron is represented by an $SO(3)$ matrix M_i and a chirality $\sigma_i = \pm 1$:

$$\vec{S}_i^1 = \sigma_i M_i \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \vec{S}_i^2 = \sigma_i M_i \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \vec{S}_i^3 = \sigma_i M_i \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Using these variables, Eq. (2) reads

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \text{Tr}[(M_i)^t M_j]. \quad (4)$$

The isomorphism between $SO(3)$ and $SU(2)/\{1, -1\}$, maps a rotation $M(\theta, \vec{n})$ of angle θ about the $\vec{n}$ axis onto the pair of $SU(2)$ matrices $\pm \exp(i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma})$, where the components of $\vec{\sigma}$ are the Pauli matrices. The latter can be written using two opposite 4D real vectors $\pm \vec{v} = \pm (v_0, v_x, v_y, v_z)$, with $\vec{v}^2 = 1$:

$$\exp\left(i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma}\right) = \begin{bmatrix} v_0 + iv_z & iv_x + v_y \\ iv_x - v_y & v_0 - iv_z \end{bmatrix}, \quad (5)$$

$$v_0 = \cos(\theta/2), \quad v_a = n_a \sin(\theta/2). \quad (6)$$

Irrespective of the local (arbitrary) choice of representation $\pm \vec{v}_i$, one has

$$\text{Tr}[(M_i)^t M_j] = 4(\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2 - 1, \quad (7)$$

whence the energy reads

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j [4(\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2 - 1]. \quad (8)$$

B. Z_2 vortices in the fixed-chirality limit

Here we first consider the simplified case where the Ising degrees of freedom are frozen to, say, $\sigma_i = +1$. In this limit we recover the so-called RP^3 model,¹² which contains both spin waves and Z_2 vortices and describes interacting $SO(3)$ matrices. Together with related frustrated spin models

(Heisenberg model on the triangular lattice, for instance), the RP^3 model has been the central subject of a number of studies focusing on a putative binding-unbinding transition of the Z_2 vortices at finite temperature.^{13–24} This is a delicate and controversial issue, which is not essential to the present work. Instead, we merely discuss some properties of the vortex configurations that will be useful for comparison with the full $O(3)$ (or Ising- RP^3) model.

To locate the topological point defects (vortex cores), we resort to the usual procedure: Consider a closed path $\mathcal{L}$ on the lattice, running through sites $i_0, \dots, i_{n-1}, i_n \equiv i_0$. $\mathcal{L}$ induces a loop $\mathcal{C}_{\mathcal{L}}$ in the order-parameter space, defined by the matrices $M_{i_0}, \dots, M_{i_{n-1}}, M_{i_n}$ (in this space the path between M_{i_k} and $M_{i_{k+1}}$ is defined as the “shortest” one). The homotopy class of $\mathcal{C}_{\mathcal{L}}$ is an element of Π_1 . If it is the identity, then the $\mathcal{C}_{\mathcal{L}}$ loop is contractible. Otherwise, $\mathcal{L}$ surrounds (at least) one topological defect.²⁵

In the RP^3 model, the fundamental group is $\Pi_1(SO(3)) = Z_2$, so that the topological charge can take only two values: The homotopy class of $\mathcal{C}_{\mathcal{L}}$ corresponds to the parity of the number of point defects enclosed in $\mathcal{L}$ (Fig. 1). This is to be contrasted with the better-known $SO(2)$ vortices, associated, for instance, with the XY model: The latter carries an *integer* charge [$\Pi_1(SO(2)) = Z$], while the former carries merely a *sign*.

The number of Z_2 vortices of a given configuration is obtained by looking for vortex cores on each elementary plaquette of the lattice. The vorticity $\Omega(p)$ of a square plaquette p is computed by mapping $SO(3)$ onto $RP^3 = S^3/Z_2$: On every site i we arbitrarily choose one of the two equivalent representations $\pm \vec{v}_i$ of the local $SO(3)$ matrix and compute

$$\Omega(p) = \prod_{\square_p} \text{sgn}(\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j), \quad (9)$$

where i and j are nearest neighbors and the product runs over the four edges of $\square_p$. The associated closed loop in $SO(3)$ is noncontractible when the plaquette hosts a vortex core and is identified by $\Omega(p) = -1$. Note that $\Omega(p)$ is a “gauge-invariant” quantity; i.e., it is *independent* of the local choice of representation $\pm \vec{v}_i$, as it should be.

We performed a Monte Carlo simulation of the RP^3 model using a Wang-Landau algorithm, detailed in the Appendix. In the upper panel of Fig. 2 we plot the vortex density n_{Ω} , defined as the number of plaquettes hosting a vortex core divided by the total number of plaquettes.

Vortices are seen to appear and the density increases upon increasing the temperature from $T \approx 1$. However, no critical behavior (scaling) is observed upon increasing the system size. The latter is also true of other simple thermodynamic quantities, such as the energy or the specific heat, although the latter is maximum when the increase in n_{Ω} is steepest, at $T \approx 1.3$.²⁶

A typical configuration is shown in the lower panel of Fig. 2, at a temperature $T = 1.1$, about 20% lower than that of the maximum of the specific heat. Plaquettes hosting a vortex core are indicated by a (red) bullet. Note that n_{Ω} is rather small at this temperature and that all vortices are *paired* except for two, evidencing the strong binding of the vortices.

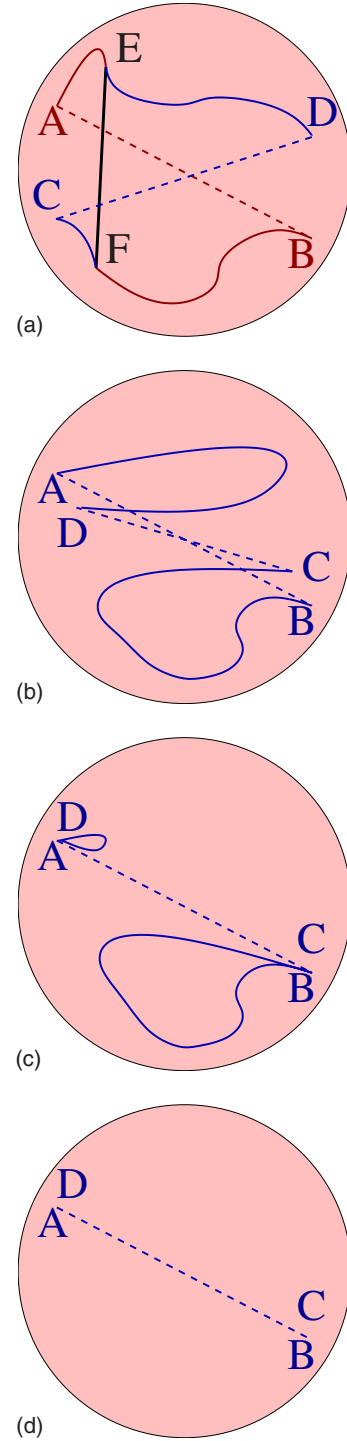


FIG. 1. (Color online) $SO(3)$ can be represented by a ball of radius π . A rotation of angle $\theta \in [0, \pi]$ around the $\vec{n}$ axis is represented in this ball by the extremity of the vector $\theta \vec{n}$. Two opposite points of the surface (joined by a dashed line) represent the same rotation. A loop with an odd number of crossings, such as $ABFEA$ or $CDEFC$, cannot be continuously shrunk to a point. This is not the case when the number of crossings is even: (a) $ABCDEA$ crosses the surface both at (AB) and (CD) . [(b) and (c)] It can be continuously deformed to collapse points B on C and A on D . (d) AD and BC become contractible closed loops, which collapse on identical points.

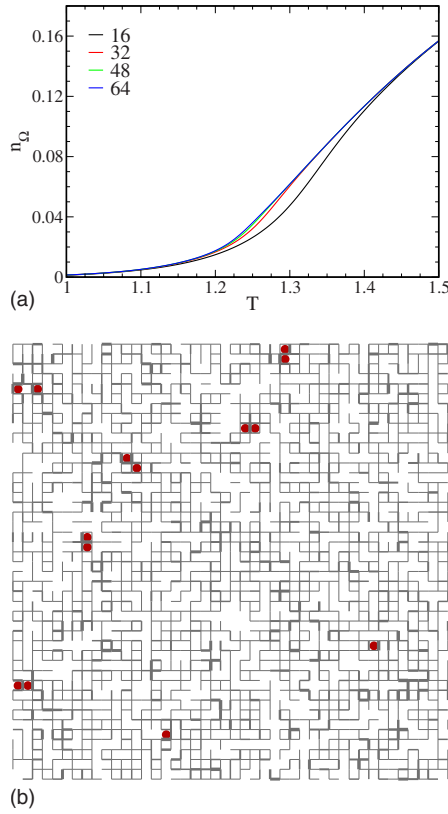


FIG. 2. (Color online) Uniform frozen chirality model (see Sec. II B). Top: Vortex density n_v versus temperature T from $L=16$ to $L=64$, from bottom to top. Bottom: Thermalized configuration at $T \approx 1.1$ on a system of size $L=72$ (only a 45×45 square snippet is shown). Square plaquettes carrying a $\mathbb{Z}_2$ vortex core are denoted by a (red) bullet. The width of each bond (i,j) is proportional to $B_{ij} = 1 - (\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2$ (by slices of $1/8$). Bonds with $B_{ij} \leq 1/8$ are not drawn.

In the same figure the width of every bond (i,j) is proportional to $B_{ij} = 1 - (\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2$ and indicates the relative orientation of the two 4D vectors $\vec{v}_i$ and $\vec{v}_j$. $B_{ij}=0$ (no segment) corresponds to *parallel* 4D vectors (or identical trihedra), which minimizes the bond energy ($E_{ij}=-3$). In particular, all bonds have $B_{ij}=0$ at $T=0$. On the contrary, $B_{ij}=1$ (thick black segment) indicates a maximally frustrated bond ($E_{ij}=+1$) with *orthogonal* 4D vectors (the two trihedra differ by a rotation of angle π). Figure 2 shows that the vortex cores are located in regions of enhanced short-range fluctuations of the continuous variables (represented by thick bonds) but that the converse is not necessarily true.

III. NUMERICAL SIMULATIONS OF THE ISING-RP³ MODEL

We now return to the full Ising-RP³ model, defined in Eq. (8). We report results of Monte Carlo simulations, using the Wang-Landau algorithm described in the Appendix, for linear sizes up to $L=88$ with periodic boundary conditions.

A. Specific heat and energy distribution

Once the Ising degrees of freedom are relaxed, the maximum of the specific heat diverges with the system size, in-

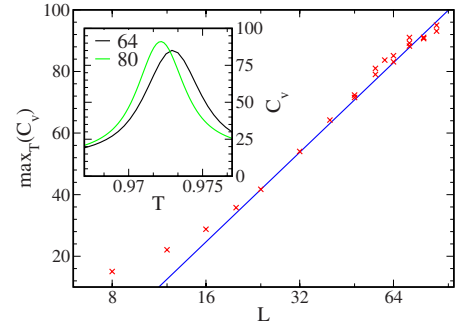


FIG. 3. (Color online) Maximum value of the specific heat as a function of system size L . The scaling at large L is correctly reproduced by the affine logarithmic fit $A+B \ln(L)$ (straight line). Inset: Specific heat C_v versus temperature T for $L=64$ and 80 from right to left.

dicating a phase transition. Further, the scaling as $\sim \log(L)$ (Fig. 3) for the largest L suggests a continuous transition in the Ising 2D universality class.

To ascertain the continuous nature of the transition, we computed the probability distribution $P(E, T=T_c)$ of the energy per site, obtained from the density of states $g(E)$ (Fig. 4). Here $T_c(L)$ is defined as the temperature at which the specific heat is maximum. Rather surprisingly, from small to intermediate lattice sizes, $P(E, T=T_c)$ shows the bimodal structure characteristic of a first-order transition. However, this feature disappears smoothly upon increasing the system size, and a single peak finally emerges for $L \geq 72$.

Hence we claim that the phase transition is *continuous* indeed in the Ising 2D universality class, although the scaling and energy distribution at moderate sizes is misleading. This peculiar finite-size behavior evidences a large but finite length scale whose exact nature has not been elucidated so far. We conjecture that it may be related to the proximity, in some parameter space, to a tricritical point where the transition becomes discontinuous. Further arguments in support to this claim will be provided in Sec. III E and Sec. IV and V.

B. Ising order parameter

The ordering of the chirality variables σ_i is probed by the following Ising order parameter:

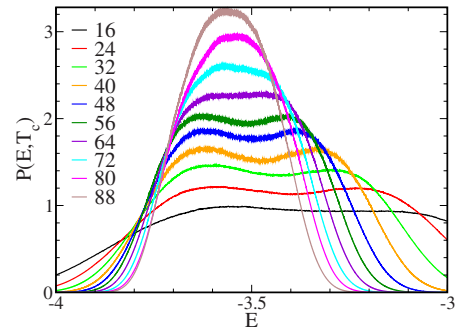


FIG. 4. (Color online) Probability distribution $P(E, T_c)$ of the energy per site at $T_c(L)$ for increasing linear L from $L=16$ to $L=88$, from bottom to top. $T_c(L)$ is the temperature at which C_v is maximum. A double peak is visible for $L \leq 60$ and disappears for $L > 72$.

$$\sigma = \left\langle \frac{1}{N} \left| \sum_i \sigma_i \right| \right\rangle, \quad (10)$$

where N is the number of sites. With the results above in mind, we analyze the finite-size effects on the chirality using the scaling law $L^{\beta/\nu} \sigma = f[L^{1/\nu}(\frac{T-T_c}{T_c})]$, with $\beta=1/8$ and $\nu=1$. Figure 5(a) shows a data collapse of the Ising order parameter for $40 \leq L \leq 88$, in agreement with the 2D Ising critical scenario ($\beta=1/8$ and $\nu=1$). Figure 5(b) shows the scaling of the maximum of the Ising susceptibility χ_σ versus L . The slope $\gamma/\nu=1.76 \pm 0.02$ is very close to the expected value of $7/4$. We also plot the temperature $T_c(L)$ of the maximum of the specific heat at size L [Fig. 5(c)], showing the expected asymptotic scaling $T_c(L) \sim T_\infty + A/L^{1/\nu}$, with $\nu=1$. Finally, we computed the fourth-order Binder cumulant

$$B(L, T) = 1 - \frac{1}{3} \frac{\langle \sigma^4 \rangle}{\langle \sigma^2 \rangle^2}, \quad (11)$$

which shows a characteristic L -independent crossing at $T_c \approx 0.97$ [Fig. 5(d)]. Note however that the value of the cumulant at the crossing $B(L=72, T_{\text{crossing}}) \approx 0.65$ remains larger than the universal value of the 2D Ising model (0.6107). This discrepancy possibly originates from the fact that L is not significantly larger than the crossover length scale beyond which the two peaks in $P(E, T_c)$ merge (Sec. III A), making it uneasy to obtain a reliable estimate of the fourth moment of the distribution of chiralities. We also point out that similar discrepancies were observed in the simulation of other emergent Ising systems with continuous degrees of freedom.^{3,9}

C. $\mathbb{Z}_2$ vortices in the Ising-RP³ model

We now turn to the identification of $\mathbb{Z}_2$ vortices in the model defined in Eq. (8). The better-known case of an SO(3) ground-state manifold (ferromagnetically frozen chiralities) was detailed in Sec. II B. Once the chiral degrees of freedom are relaxed, the ground-state manifold is enlarged to O(3) = $\mathbb{Z}_2 \times \text{SO}(3)$ and the definition of vorticity enclosed in lattice loops requires some caution. Let us consider two sites i and j and their associated elements of O(3), M_i , and M_j . As long as M_i and M_j have the same chirality, no extra difficulty arises. However, if they have opposite chiralities (determinants), then the mere existence of a continuous path connecting the two elements in SO(3) is ill posed, since they each belong to a different SO(3) sector of O(3). Hence the computation of the circulation $\Omega(\mathcal{L})$ makes sense only for loops $\mathcal{L}$ enclosed in a domain of uniform chirality. In particular, the computation of the $\mathbb{Z}_2$ vorticity on plaquettes located in the bulk of uniform domains follows the lines detailed in Sec. II B without modification.

The case of nonuniform plaquettes, sitting on a chiral domain wall, may be addressed in an indirect way. We consider a closed loop $\mathcal{L}$ that: (i) visits only sites with chirality $\sigma_i = +1$ and (ii) encloses a domain of opposite chirality $\sigma_i = -1$. (i) ensures that $\Omega(\mathcal{L})$ is well defined. On the other hand one can always define unambiguously $N_v(\mathcal{L})$, the number of vortex cores on uniform plaquettes inside $\mathcal{L}$. If the chirality

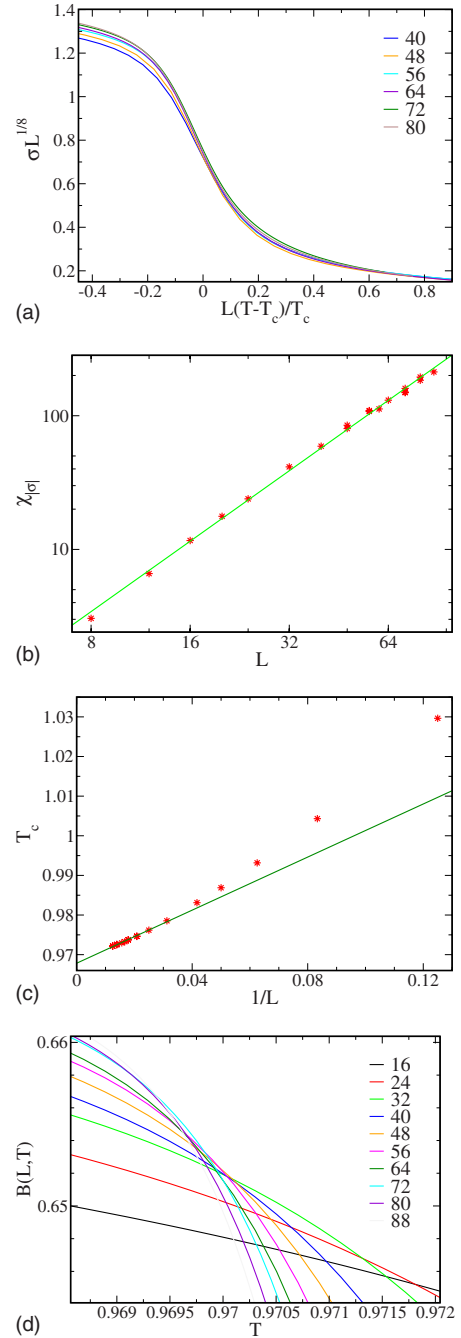


FIG. 5. (Color online) Finite-size scaling at or near the transition temperature. (a) Rescaled chirality [Eq. (10)] versus rescaled temperature for $40 \leq L$. (b) Log-log plot of the maximum of the Ising susceptibility vs L . (c) Scaling of the temperature associated with the maximum of the specific heat vs $1/L$ (log-linear plot). (d) Evolution of the Binder cumulant $B(L, T)$ with temperature from $L = 16$ to $L = 88$, from bottom to top.

were uniform inside $\mathcal{L}$, then $\Omega(\mathcal{L}) = (-1)^{N_v(\mathcal{L})}$ would hold. However, when $\mathcal{L}$ encloses a domain with reversed chirality, an extra contribution arises on the right-hand side, coming from the nonuniform plaquettes sitting on the domain wall, which are not accounted for by $(-1)^{N_v(\mathcal{L})}$. Since $\Omega(\mathcal{L}) = \pm 1$, we obtain $\Omega(\mathcal{L}) = \epsilon_w (-1)^{N_v(\mathcal{L})}$, where $\epsilon_w = \pm 1$ acts as the to-

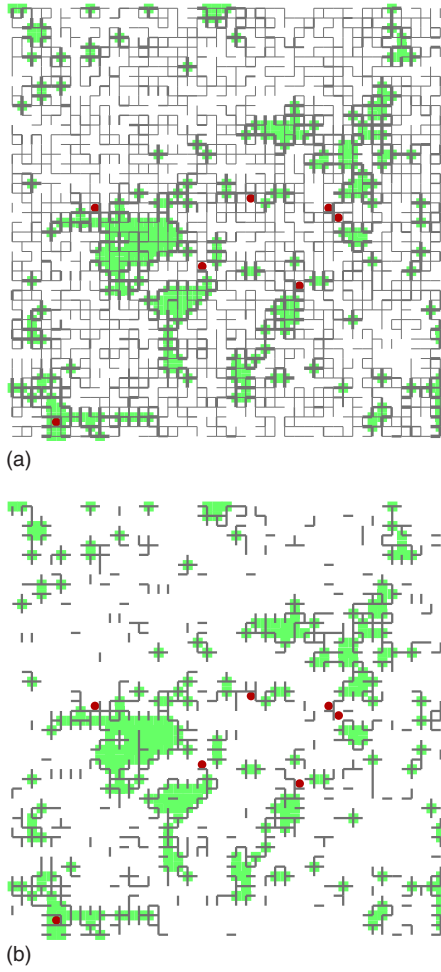


FIG. 6. (Color online) Thermalized configuration at $T \approx T_c$ of a system of size $L=72$ (only a 45×45 square snippet is shown). The red bullets indicate elementary square plaquettes that: (i) host a $\mathbb{Z}_2$ vortex core and (ii) have all four σ_i equal. Sites with up (down) chiralities are represented by green (white) squares. (a) The width of bonds (i,j) is proportional to B_{ij} (see text). (b) Bonds are drawn only if $B_{ij} > 1/2$.

topological charge of the chiral domain wall. As a result, the present workaround yields the total $\mathbb{Z}_2$ charge carried by the chiral domain wall, which is always well defined.

Figure 6(a) shows a typical configuration near T_c . Again, vortices in the bulk of Ising domains are indicated by (red) bullets. A thorough study of typical configurations reveals that most of these vortex cores are actually “paired” with a nearby *charged* domain wall [not represented in Fig. 6(a)]. Once the charge of the walls is appropriately accounted for, the total measured charge is 1 indeed. Note that such vortex/charged-wall pairs feature two $\mathbb{Z}_2$ charges but involve the creation of only one vortex core. Hence they are energetically favored compared to genuine pairs of $\mathbb{Z}_2$ vortices in the bulk of chiral domains. This is evidenced, for instance, by the proliferation of vortices at lower temperatures in the full Ising- $\mathbb{RP}^3$ model than in the $\mathbb{RP}^3$ model [compare the upper panel of Fig. 2 with Fig. 7(b)].

To quantify the pairing effect of $\mathbb{Z}_2$ vortices with charged walls, we impose a domain wall by splitting the system into

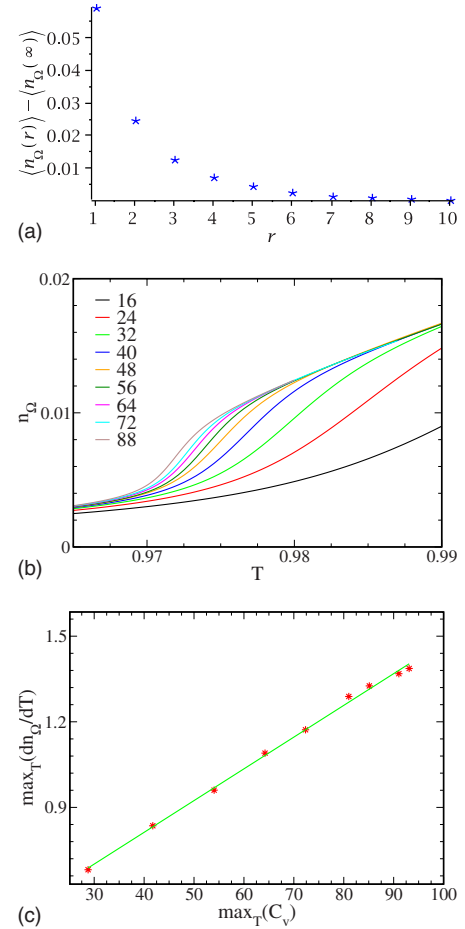


FIG. 7. (Color online) (a) Excess density of vortices vs distance to the domain wall at $T=1.3$ (see text). (b) Vortex density in the bulk of chiral domains vs temperature T from $L=16$ to $L=88$, from bottom to top. (c) Maximum of $(\frac{dn_Q}{dT})$ versus specific heat maximum $\max_T(C_v)$ for $16 \leq L \leq 88$.

two parts with frozen but opposite chiralities (periodic boundary conditions are used). Figure 7(a) shows the excess density of vortices near the domain wall, compared to the density in the bulk of the domains, as a function of the distance to the interface for $T=1.3$. In agreement with the trend observed in Fig. 6(a), vortex/charged-wall pairs are clearly favored compared to vortex/vortex pairs in the bulk. Moreover, this effect is robust: the excess density of vortices is sizable in a wide range of temperatures. Overall we anticipate that the same mechanism will prevail near more complex interfaces, such as those obtained in the full Ising- $\mathbb{RP}^3$ model at equilibrium.

For completeness, we computed the vortex density n_Q (defined as the number of vortex cores on uniform plaquettes divided by the number of such plaquettes) as a function of temperature for different lattice sizes: The increase in the vortex density at the transition temperature [Fig. 7(b)] scales with the system size. This is apparent on the associated susceptibility dn_Q/dT , whose maximum scales with L like the maximum of the specific heat [Fig. 7(c)]. This is to be compared with the noncritical behavior of the vortex density in

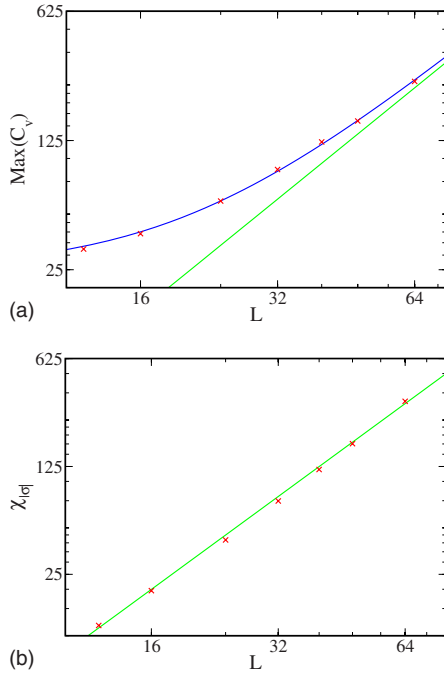


FIG. 8. (Color online) Scalings as L^2 (a) of the maximum of the specific heat and (b) of the chiral susceptibility with increasing system size L for $a=1.75$ in Eq. (12).

the RP^3 model discussed in Sec. II B, where dn_0/dT remains finite at all temperatures.

D. Spatial correlations of discrete and continuous fluctuations

Figure 6(a) also reveals that the bonds standing across chiral domain walls ($\sigma_i \sigma_j = -1$) are also the most “disordered” (thickest) ones. This strong correlation is all the more apparent in Fig. 6(b), where only the most disordered highest-energy bonds are represented, defined as $B_{ij} > 1/2$: They are rather scarce in the bulk of Ising domains. Hence the two kinds of fluctuations (associated with the discrete Ising variables and with the continuous 4D vectors) are both localized close to Ising domain walls. As a result, the energy barrier for the formation of a domain wall is considerably lowered compared to the pure Ising model (with all 4D vectors frozen in a ferromagnetic configuration). This is evidenced by the low transition temperature $T_c=0.97$ for the Ising transition observed in the present Ising- RP^3 model, compared to $T_c=2.269$ for the Ising model in two dimensions.

E. Small modifications in the Ising- RP^3 model and tuning of the nature of the phase transition

In view of the peculiar finite-size first-order-like behavior of the energy distribution shown in Fig. 4, we argue that the Ising- RP^3 model could be near a tricritical point in some parameter space. This is consistent with the nature of the phase transitions observed in a number of related classical frustrated spin models with similar “content,” i.e., spin waves, $\mathbb{Z}_2$ vortices, and Ising-type chiralities.^{6,7,27}

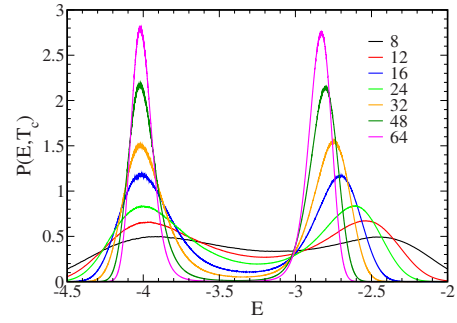


FIG. 9. (Color online) Energy distributions at the transition for model (14).

In support of our claim, we present two distortions of the original Hamiltonian [Eq. (8)] which preserve the ground-state symmetry and, hence, the nature of the excitations above. Moreover we show that they undergo a first-order phase transition.

As it turns out, a simple change in the bond energy,

$$E_{ij} = -\sigma_i \sigma_j [4(\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2 - a], \quad (12)$$

from $a=1$ in the original Hamiltonian [Eq. (8)] to $a=1.75$, is sufficient to drive the order-disorder transition of the Ising variables toward first order. This can be seen in Fig. 8, where both the maximum of the specific heat [Fig. 8(a)] and that of the chiral susceptibility [Fig. 8(b)] scale as $\sim L^2$. Furthermore, contrary to the Ising- RP^3 case, the energy probability distribution $P(E, T=T_c)$ remains bimodal for all lattice sizes, with a minimum that gets more and more pronounced upon increasing the system size (not shown).

Increasing a from $a=1$ in Eq. (12) clearly decreases the energy gap for a chirality flip $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$. However, the associated modification of the entropy balance between the ordered and disordered phase is less obvious.

Entropic effects are more explicit and better controlled in the following family of continuous spin models on 2D lattices:

$$E_{ij} = -\sum_{(i,j)} \left(\frac{1 + \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{2} \right)^p. \quad (13)$$

Indeed, it was shown that for large enough p ($p \geq 100$ for XY spins²⁸ and $p \geq 16$ for Heisenberg spins^{29,30}), these systems undergo a phase transition of the liquid-gas type. Obviously, tuning p does not change the energy scale ($E_{ij} \in [-1, 0]$), but increasing p gradually pushes the entropy toward the highest energies.

Hence we tweak the Ising- RP^3 model in a similar way, with

$$E_{ij} = -\sigma_i \sigma_j [4(\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^{2p} - 1]. \quad (14)$$

Once again, Monte Carlo simulations of the distorted model [Eq. (14)] show the signatures of a first-order transition for p as small as $p=2$ (Fig. 9). Overall the previous two models illustrate our claim on the proximity of the Ising transition in the Ising- RP^3 model with a first-order transition.

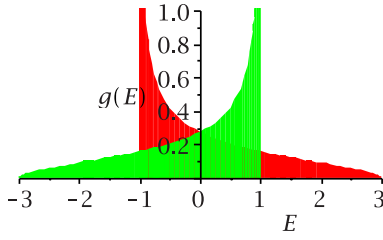


FIG. 10. (Color online) Density of states $g^\epsilon(E)$ for a single bond in model (8). The two colors correspond to $\epsilon = \sigma_i \sigma_j = 1$ (green) and $\epsilon = -1$ (red). The lowest energy ($E = -3$ per bond) is attained when $(\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2 = 1$ and $\sigma_i \sigma_j = 1$.

IV. ENTROPY OF $\sigma_i \sigma_j$ BONDS-POTTS MODEL ANALOGY

Here we take another route and propose a simple qualitative analogy to explain how the coupling of chiralities σ_i to the continuous degrees of freedom $\vec{v}_i$ drives the Ising transition in the Ising- $\mathbb{R}P^3$ model close to a first-order transition. To that end we compute the density of states $g(E)$ for a single bond (i, j) . It has two contributions, $g(E) = g^+(E) + g^-(E)$, depending on the value of $\epsilon = \sigma_i \sigma_j$:

$$\begin{aligned} g^\epsilon(E) &\sim \int_{S^3} d^3 \vec{v}_i \int_{S^3} d^3 \vec{v}_j \delta\{E + \epsilon[4(\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2 - 1]\} \\ &\sim \int_{S^3} d^3 \vec{v}_i \delta\{E + \epsilon[4(v_i^0)^2 - 1]\}, \end{aligned} \quad (15)$$

where rotational invariance was used to fix $\vec{v}_j = [1, 0, 0, 0]$. Explicit evaluation of the integral gives

$$g^\epsilon(-3 \leq \epsilon E < 1) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{3 + \epsilon E}{1 - \epsilon E}}. \quad (16)$$

Figure 10 shows the evolution of $g^\pm(E)$ with E . Interestingly, the density of states is remarkably small in the vicinity of the (ferromagnetic) ground-state value ($\sigma_i \sigma_j = 1$, $\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j = 1$, and $E = -3$). However, if the two trihedra have opposite chiralities, the lowest-energy state is attained for orthogonal vectors $\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j = 0$, with energy $E = -1$, and the associated density of states diverges.

This strong entropy unbalance between ordered ($\epsilon = 1$) and disordered bonds ($\epsilon = -1$) is similar to that of the well-known q -state Potts models.³¹ In this model, each “spin” σ can take q different colors, and the interaction energy is $E = 0$ for neighboring sites (i, j) with the same color $\sigma_i = \sigma_j$ and $E = 1$ otherwise, with the resulting density of states

$$g(0 \leq E \leq 1) = q\delta(E) + q(q-1)\delta(E-1).$$

Hence disordered configurations indeed carry more weight than the ferromagnetic ground state. This entropy unbalance is seen to increase with q , and in two dimensions it is known to eventually drive the order-disorder transition toward first order for $q > 4$.³¹

A similar feature is obtained upon distorting the Ising- $\mathbb{R}P^3$ model as in Eq. (14). Indeed, the computation of the density of states $g_p(E)$ for $p=2$ yields

$$g_{p=2}^\epsilon(-3 \leq \epsilon E < 1) = \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{2 - \sqrt{1 - \epsilon E}}}{(1 - \epsilon E)^{3/4}}, \quad (17)$$

which has the same features as in Fig. 10 except that it diverges as $\sim x^{-3/4}$ at $E = \pm 1$, instead of $\sim x^{-1/2}$. Hence, the distortion of the bond energy shown in Eq. (14) essentially increases the entropy unbalance, which ultimately drives the Ising transition toward first order (Sec. III E), much in the same way as in the q -state Potts model.

To elaborate further on the proximity to a first-order transition, it is useful to recall some results from the real-space renormalization-group (RG) treatment of the q -state Potts model.³² As noted by Nienhuis *et al.*,³² in two dimensions, conventional RG approaches give accurate results in the critical regime ($q \leq 4$) but inexplicably fail to predict the crossover to a discontinuous transition for $q \geq 4$. The authors proposed that it originates from the usual coarse-graining procedure, by which a single Potts spin is assigned to a finite region in real space using a majority rule. Intuitively, this brutal substitution becomes physically questionable when there is no clear majority spin in the domain, a situation that is likely to occur when the number of colors, q , is large enough. In particular, it yields the possibility of a ferromagnetic effective interaction between such (artificially) polarized supercells, even if the microscopic spins are disordered. Hence, conventional coarse-graining overestimates the tendency to ferromagnetic order.

In Ref. 32 it is argued that disordered regions interact only weakly with their neighbors; hence they are better coarse grained as a vacancy (missing Potts spin). In support of this intuitive picture, it was shown that once the parameter space of the original Potts Hamiltonian is enlarged to include the fugacity of these vacancies, the real-space RG treatment of the Potts model is able to detect the crossover of the order-disorder transition, seen as a liquid-gas transition of the vacancies.

In Sec. V we discuss a simplified version of the Ising- $\mathbb{R}P^3$ model where discrete variables t_i are introduced. The latter play a role similar to that of the vacancies in Ref. 32.

V. EFFECTIVE DILUTED ISING MODEL

In this section we propose a simplified model, with strong analogies to Ising- $\mathbb{R}P^3$ model (8), that captures the spatial correlations evidenced in Fig. 6(b) and where the entropy unbalance discussed above for the Potts model is at play.

We replace the vector degrees of freedom with *discrete* variables $t_i = 0, 1$, so that the energy becomes

$$E = - \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j (4t_i t_j - 1) + D(T) \sum_i t_i. \quad (18)$$

We introduce a temperature-dependent “chemical potential” $D(T)$ to tune $\langle t_i \rangle$ (hence $\langle t_i t_j \rangle$). The relation with the original model [Eq. (8)] can be understood as follows: A site with $t_i = 1$ represents a vector which is collinear (or almost collinear) with the “majority” of its neighbors. On the other hand, a site with $t_i = 0$ represents a vector which is perpendicular

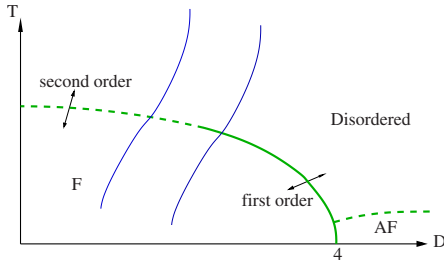


FIG. 11. (Color online) Schematic mean-field phase diagram of discrete model (18) on the (T, D) plane. The two thin lines are trajectories of model (14), with $p=1, 2$.

(or almost perpendicular) to the majority of its neighbors. The fact that the vector-vector correlation length is significantly larger than one lattice spacing at the temperatures of interest justifies that, locally, the vectors have a well-defined local orientation. Then, we simply replace $(\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2$ with $t_i t_j$. Of course, in the original model, two vectors $\vec{v}_i$ and $\vec{v}_j$ can be simultaneously: (i) orthogonal to most of their neighbors ($t_i = t_j = 0$) and (ii) parallel to each other $[(\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2 = 1]$. Such situations are clearly discarded by this discretized model.³³ As a final encouragement for studying the discrete model of Eq. (18), we mention that its single bond density of states is qualitatively similar to that of the original model (Fig. 10): It has two ground states at $E = -3$ ($\sigma_i = \sigma_j$ and $t_i = t_j = 1$) and 2×3 excited states associated with chiral flip at $E = -1$ ($\sigma_i = -\sigma_j$ and $t_i t_j = 0$).

This model closely resembles the celebrated Blume-Capel model,³⁴ where an Ising transition becomes first order when the concentration of “holes” (sites with $t_i = 0$) becomes large enough.³⁵ Since a simple mean-field approximation is sufficient to predict the first- and second-order transition lines of the Blume-Capel model (depending on the crystal-field parameter Δ), we determine the mean-field phase diagram of Eq. (18) using the two mean-field parameters $\langle t_i \rangle = t$ and $\langle \sigma_i \rangle = \sigma$. Figure 11 shows that it is composed of four transition lines, and one obtains four distinct order-to-disorder transitions depending on the value of $D(T)$. Namely, upon increasing $D(T)$, we find: (i) a second-order ferromagnetic-paramagnetic transition (large negative D), (ii) a first-order ferromagnetic-paramagnetic transition, (iii) a first-order ferromagnetic-antiferromagnetic transition, and (iv) a second-order antiferromagnetic-paramagnetic transition. Hence we conjecture that the present model also has a tricritical point, at which the ferromagnetic-to-paramagnetic transition changes from second order to first order. This approach is obviously too crude to be quantitatively accurate. However we can still make contact with the Ising- $\mathbb{RP}^3$ model by adjusting the chemical potential $D(T)$ to enforce $\langle t_i t_j \rangle = \langle (\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2 \rangle$. (The right-hand side is computed in the original Ising- $\mathbb{RP}^3$ model.) Upon changing the temperature, this model describes a curve in the D - T plane such as those shown in Fig. 11. At $T = \infty$, $\langle (\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2 \rangle = \frac{1}{4}$ and one can show that $D(T = \infty) = 0$. Further, upon decreasing the temperature, $\langle (\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2 \rangle$ decreases and $D(T)$ decreases until the ferromagnetic phase of the discrete model is reached.

Overall this supports our claim that the unusual finite-size behavior of the Ising- $\mathbb{RP}^3$ model (Fig. 4), as well as the

proximity to a first-order chiral transition (Sec. III E), originates from a nearby tricritical point in parameter space. Further, the present study suggests that the nature and origin of the tricritical point can be understood, at least qualitatively, from an effective Blume-Capel-type model.

VI. EFFECTIVE ISING MODEL WITH MULTIPLE-SPIN INTERACTIONS

In this section we detail a more quantitative approach to the Ising- $\mathbb{RP}^3$ model, in which the vector spins $\vec{v}_i$ are integrated out perturbatively in $\beta = 1/T$, in order to derive an effective Ising model for the chirality degrees of freedom. From this standpoint, multiple-spin interactions between chiralities are directly responsible for the “proximity” to a first-order transition.

A. Integrating out the vector spins

Because the order parameter of the transition is the chirality and because the vector spins never order at $T > 0$, it is natural to look for an effective model involving *only* the chiralities. Moreover, we have shown that the Ising domain walls are accompanied by short-distance rearrangements of the 4D vectors and that it is a very important aspect of the energetics of the system. It is thus natural to expect that a high-temperature expansion for the vector spins (which captures short-distance correlations) will be semiquantitatively valid.

Formally, the integration over the 4D vectors leads to the following energy E_{eff} for a configuration $\{\sigma_{ij}\}$ of the chiralities:

$$E_{\text{eff}}(\{\sigma_{ij}\}) = -T \ln(\langle e^{-\beta E(\{\sigma_{ij}, \vec{v}_{ij}\})} \rangle), \quad (19)$$

where $E(\{\sigma_{ij}, \vec{v}_{ij}\})$ is given by Eq. (8) and $\langle \cdots \rangle$ is the $T = \infty$ average for each vector spin $\vec{v}_i \in S^3$ (uniform measure on $S^3 \times \cdots \times S^3$). In the following, we derive the effective interaction of the chiralities by expanding Eq. (19) in powers of $\beta = 1/T$ up to order β^8 .

B. $1/T$ expansion

$$\begin{aligned} \langle e^{-\beta E(\{\sigma_{ij}, \vec{v}_{ij}\})} \rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \\ &\times \sum_{\langle i_1 j_1 \rangle} \sum_{\langle i_2 j_2 \rangle} \cdots \sum_{\langle i_n j_n \rangle} \langle E_{i_1 j_1} E_{i_2 j_2} \cdots E_{i_n j_n} \rangle \\ &\times \sigma_{i_1} \sigma_{j_1} \cdots \sigma_{i_n} \sigma_{j_n}, \end{aligned} \quad (20)$$

with

$$E_{ij} = 1 - 4(\vec{v}_i \cdot \vec{v}_j)^2. \quad (21)$$

As $\langle E_{ij} \rangle = 0$, expanding the logarithm of Eq. (19) in powers of β yields the following cumulant expansion:

$$\begin{aligned}
E_{\text{eff}}(\{\sigma_i\}) = & -T \left[\frac{\beta^2}{2!} \sum_{\langle i_1, j_1 \rangle} \sum_{\langle i_2, j_2 \rangle} C_{i_1 j_1 i_2 j_2}^2 \sigma_{i_1} \sigma_{j_1} \sigma_{i_2} \sigma_{j_2} \right. \\
& - \frac{\beta^3}{3!} \sum_{\langle i_1, j_1 \rangle} \sum_{\langle i_2, j_2 \rangle} \sum_{\langle i_3, j_3 \rangle} C_{i_1 j_1 i_2 j_2 i_3 j_3}^3 \sigma_{i_1} \sigma_{j_1} \sigma_{i_2} \sigma_{j_2} \sigma_{i_3} \sigma_{j_3} \\
& + \frac{\beta^4}{4!} \sum_{\langle i_1, j_1 \rangle} \cdots \sum_{\langle i_4, j_4 \rangle} C_{i_1 j_1 \cdots i_4 j_4}^4 \sigma_{i_1} \sigma_{j_1} \cdots \sigma_{i_4} \sigma_{j_4} \\
& \left. + \mathcal{O}(\beta^5) \right], \quad (22)
\end{aligned}$$

with the cumulants

$$C_{i_1 j_1 i_2 j_2}^2 = \langle E_{i_1 j_1} E_{i_2 j_2} \rangle, \quad (23)$$

$$C_{i_1 j_1 i_2 j_2 i_3 j_3}^3 = \langle E_{i_1 j_1} E_{i_2 j_2} E_{i_3 j_3} \rangle, \quad (24)$$

$$\begin{aligned}
C_{i_1 j_1 \cdots i_4 j_4}^4 = & \langle E_{i_1 j_1} \cdots E_{i_4 j_4} \rangle - \langle E_{i_1 j_1} E_{i_2 j_2} \rangle \langle E_{i_3 j_3} E_{i_4 j_4} \rangle - \langle E_{i_1 j_1} E_{i_3 j_3} \rangle \\
& \times \langle E_{i_2 j_2} E_{i_4 j_4} \rangle - \langle E_{i_1 j_1} E_{i_4 j_4} \rangle \langle E_{i_2 j_2} E_{i_3 j_3} \rangle. \quad (25)
\end{aligned}$$

As usual in series expansion, the cumulant C^n is nonzero only if the graph defined by the n bonds $(i_1, j_1), \dots, (i_n, j_n)$ is connected. Moreover, rotational invariance ensures that only graphs that are one-particle-irreducible contribute. For this reason, $C_{i_1 j_1 i_2 j_2}^2$ is nonzero only when the two bonds coincide, resulting in a constant contribution (independent of the σ_i) to E_{eff} . At the next order and for the same reason, the only nonzero C^3 come from graphs where the three bonds coincide (and $C_{121212}^3 = 1$). This generates an effective first-neighbor Ising interaction proportional to $1/T^2$:

$$E_{\text{eff}} = -\frac{1}{6T^2} \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j. \quad (26)$$

C^4 only provides a constant contribution to the effective energy. C^5 and C^6 terms introduce new two-chirality interactions, between first, second, and third neighbors. Moreover, a C^6 term gives the first interaction with more than two chiralities, namely,

$$-\frac{1}{9T^5} \sum_{\langle i, j, k, l \rangle} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l, \quad (27)$$

where the sum runs over square plaquettes.

At this order in β , the Ising-RP₃ model appears as an Ising model with two- and four-spin interactions. The effect of such multiple-spin interactions has been studied for the three-dimensional (3D) Ising model, where an additional four-spin interaction, if it is large enough, can make the transition first order.³⁶ This can be understood, at least qualitatively, from a very simple mean-field point of view. Indeed, p -spin interactions will translate into terms of the order of m^p in the Landau free energy (m being the order parameter). Hence it is clear that tuning the strength of multiple-spin (≥ 4) interactions can reshape the free-energy landscape and drive the transition from second to first order.

However, various approaches predicted that the simplest four-spin interactions were not enough to obtain a first-order transition in two dimensions.^{37–39} To check these predictions, we performed Monte Carlo simulations of a simple Ising model with first-neighbor coupling, supplemented with a four-spin plaquette interaction.⁴⁰ The Hamiltonian reads

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - K \sum_{\square} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \sigma_l, \quad (28)$$

with $J, K > 0$. Using finite-size scaling analysis, we find that the transition remains second order on the whole range $0 \leq K/J \leq 10$.

This lead us to continue the high-temperature expansion up to order β^8 , where a multispin interaction involving six chiralities is generated (with new two- and four-interaction terms). The effective Hamiltonian becomes quite complicated and therefore we resort to a simple mean-field calculation.

C. Mean-field approximation

The expansion of Eq. (19) up to β^8 leads to a huge number of terms and it is necessary to proceed systematically in order to obtain all the diagrams. In mean field, each chirality is replaced by its mean value $\langle \sigma_i \rangle = m$, which simplifies the diagrammatic expansion of the effective Hamiltonian. We have written a (MAPLE) symbolic code that: (i) generates all possible diagrams on the square lattice, (ii) assigns a weight m to multiply connected vertices with an odd number of bonds, (iii) computes the integrals over the different vectors exactly, and (iv) computes the number of ways, $\mathcal{N}_g$, the graph g can be located on the lattice. $\mathcal{N}_g$ corresponds to the product of the number of bond ordering and the number of transformations (rotations, reflections, and deformations on the lattice) changing the representation of the graph but not the graph itself. It is also worth noting that graphs free of articulation vertex have zero cumulants. In addition, we discard graphs that give irrelevant constant contributions, i.e., graphs where the multiplicity of each vertex is even. With these prescriptions, only 55 graphs contribute at order β^8 . They are listed in Table I.

As a result, we obtain the effective energy in the mean-field approximation:

$$\begin{aligned}
E_{\text{eff}}(m) = & \left(-\frac{\beta^2}{3} - \frac{7\beta^4}{45} - \frac{\beta^5}{9} - \frac{391\beta^6}{4536} - \frac{\beta^7}{81} + \frac{5173\beta^8}{145800} \right) m^2 \\
& + \left(-\frac{\beta^5}{18} - \frac{7\beta^7}{162} - \frac{2\beta^8}{27} \right) m^4 + \left(-\frac{\beta^8}{81} \right) m^6. \quad (29)
\end{aligned}$$

Hence the mean-field free energy is given by $F(m) = E(m) - TS(m)$, where the entropy $S(m) = -\frac{1+m}{2} \ln(\frac{1+m}{2}) - \frac{1-m}{2} \ln(\frac{1-m}{2})$. $F(m)$ is minimized with respect to the magnetization m : A phase transition occurs at $T = 1.07$ between an ordered phase $m \neq 0$ and a paramagnetic phase $m = 0$. Further, the transition

TABLE I. List of all diagrams contributing to the high-temperature series expansion up to order β^8 . All vertices with an odd number of lines correspond to a σ_i in the effective Ising model and to an m in the mean-field approximation. $\mathcal{N}_g$ is the number of locations of the graph g on the lattice.

g	$\mathcal{N}_g$		
	2		2
	2		2016
	240		12096
	720		6048
	360		20160
	2		10080
	840		40320
	3360		20160
	1680		30240
	2520		15120
	10080		30240
	30240		120960
	6720		362880
	3360		725760
	13440		483840
	6720		725760
	161280		362880
	80640		362880
	120960		362880
	60480		181440
	120960		

is of first order, albeit with a very small free-energy barrier (see Fig. 12).

This computation is repeated for the Ising- RP_3 model with “nonlinear” interaction [Eq. (14) with $p=2$]. We obtain

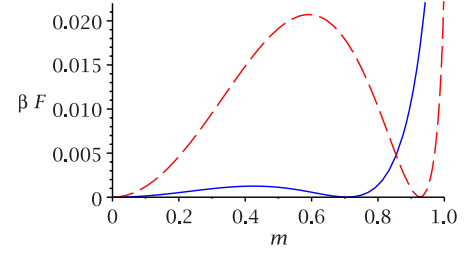


FIG. 12. (Color online) Mean-field free energy for model (14) at the transition temperature for $p=1$ (Ising- RP^3 model; solid line) and $p=2$ (dashed line). In both cases there are two stable mean-field solutions and the transition is first order. However the energy barrier is much smaller for $p=1$.

$$E_{\text{eff}}(m) = \left(1 - \frac{\beta^2}{3} - \frac{81\beta^4}{800} - \frac{13\beta^5}{200} - \frac{1\,281\,493\beta^6}{10\,080\,000} - \frac{4877\beta^7}{80\,000} - \frac{5\,746\,857\,169\beta^8}{82\,944\,000\,000} \right) m^2 + \left(-\frac{13\beta^5}{400} - \frac{1351\beta^7}{32\,000} - \frac{227\beta^8}{8000} \right) m^4 + \left(-\frac{227\beta^8}{48\,000} \right) m^6. \quad (30)$$

As can be seen in Fig. 12, the first-order transition in this model is much stronger than in the $p=1$ case, i.e., $(\Delta\beta_c F)_{p=2} \gg (\Delta\beta_c F)_{p=1}$. We also mention that similar conclusions can be made for model (12) with $a=1.75$. Once again, these results support our claim that the Ising- RP^3 model is close to a point in parameter space where the transition changes from first to second order, in qualitative agreement with the simulation results.

VII. CONCLUSION

We have proposed a minimal Ising- RP^3 model that captures most of the low-energy features of frustrated Heisenberg models with an $O(3)$ manifold of ground states. The discrete symmetry breaking associated with the existence of two connected components of $O(3)$ leads to an Ising-type continuous transition with unconventional features at small sizes. The complexity of this transition is due to the strong coupling of the Ising chirality fluctuations to short-range continuous spin fluctuations and to the topological defects of these textures.

We provided a consistent picture of these $\mathbb{Z}_2$ defects in the presence of chiral fluctuations. Namely, we showed that chiral domain walls can also carry a $\mathbb{Z}_2$ topological charge, albeit delocalized over the interface. Inspection of configurations revealed that isolated vortex cores are almost always located nearby charged domain walls. At the transition temperature, most defects consist in vortex/charged-wall pairs, while there are a few vortex/vortex pairs and almost no isolated defect. This mechanism is essential in understanding the appearance of point defects at a temperature much lower than in the case where chiral fluctuations are absent.

We also studied some variants of the model and showed that the continuous transition easily becomes first order, which lead us to conjecture the existence of a nearby tricritical point in parameter space. We clarified the role of short-range fluctuations of the continuous variables in this mechanism by an analogy with the large q -state Potts model. In this analogy the high density of states with orthogonal 4D vectors translates into the large number $q(q-1)$ of states with disordered bonds of the Potts model. Finally we studied two derived versions of the original model: (i) a diluted Ising model, which somehow corresponds to a coarse-grained version of the Ising- RP^3 model (the continuous variables are locally averaged and replaced by discrete variables); and (ii) an effective multispin Ising model, obtained by tracing out the vector spins, order by order in β (up to β^8). These two models predict either a weakly first-order or a continuous transition, as well as the existence of a tricritical point.

This study sheds light on the large variety of behaviors reported for chiral phase transitions in frustrated spin systems.⁴⁻⁷ In all these models, the chirality is an emergent variable more or less coupled to short-range spin fluctuations: In the J_1 - J_3 model on the square lattice, the chiral variable is the pitch of a helix, the coupling to the short-range spin fluctuations is probably small, and the transition appears to be clearly second order and in the Ising universality class.⁵ In the cyclic four-spin exchange model on the triangular lattice, the order parameter is a tetrahedron and the chiral variable is associated with the triple product of three of these four spins: The transition is probably very weakly first order.^{4,27} In the J_1 - J_2 model on the kagome lattice, the order parameter at $T=0$ is a cuboctahedron, and the chiral variable is associated with the triple product of three of these twelve spins. The phase transition evolves from weakly to strongly first order when tuning the parameters toward a ferromagnetic-antiferromagnetic phase boundary at $T=0$: This can be understood in the light of the present work. Tuning the parameters toward the ferromagnetic phase frustrates the 12-sublattice Néel order and favors short-range disorder and vortex formation. The associated increase in the entropy unbalance drives the transition from Ising to strongly first order, much in the same way as in Sec. IV. On the technical side, this proximity of a tricritical point in parameter space evidences why simulations and experiences must be lead with great caution, a conclusion equally supported by recent work from the quite different standpoint of the non-perturbative renormalization-group approach.⁴¹

ACKNOWLEDGMENTS

We thank D. Huse for suggesting this work and B. Bernu, E. Brunet, R. Mosseri, and V. Dotsenko for helpful discussions.

APPENDIX: MONTE CARLO ALGORITHM

In this section we detail the Wang-Landau algorithm^{42,43} used to simulate model (2). This method consists in building the density of states $g(E)$ progressively, using successive Monte Carlo iterations. Elementary moves consist of rota-

tions of vectors $\vec{v}_i$ as well as flips of chiralities σ_i . In the case where the chiralities are frozen (Sec. II B), only the rotation movements are performed. For completeness we mention that the four vectors $\vec{v}_i$ are sampled uniformly on S^3 using three random numbers (r , η , and ν), independent and uniformly distributed in $[0,1]$, according to

$$v_1 = \begin{cases} \sqrt{r} \cos(2\pi\eta) \\ \sqrt{r} \sin(2\pi\eta) \\ \sqrt{1-r} \cos(2\pi\nu) \\ \sqrt{1-r} \sin(2\pi\nu) \end{cases} \quad (\text{A1})$$

Starting from an initial guess $g(E)$, the acceptance of a trial flip/rotation is decided by a Metropolis rule,

$$\Pi(o \rightarrow n) = \min\left(1, \frac{g(E_o)}{g(E_n)}\right), \quad (\text{A2})$$

where the subscripts o and n corresponds the old and new configurations, respectively.

Every time a configuration with energy E is visited, the density of states $g(E)$ is multiplied by a factor $f > 1$, $g(E) \leftarrow g(E)f$. To ensure that all configurations are well sampled, a histogram $H(E)$ accumulates all visited states. The first part of the run is stopped when $H(E) > 10^4$. In the second part, the histogram $H(E)$ is reset and the run is continued, but the modification factor f is now decreased to $f_1 < f$. In the original paper by Wang,⁴² f_1 was taken as $\sqrt{f}$, but this choice is not necessarily the best for continuous models.⁴⁴ In this case the convergence properties were found to be quite satisfying upon choosing $f_1 = f^{0.7}$. The random walk is continued until the histogram of visits $H(E)$ has become “flat.” Once again, $H(E)$ is reset and the modification factor is decreased to $f_2 < f_1$, etc. Accurate density of states $g_n(E)$ is generally obtained at the n th iteration, where n is such that f_n is almost 1 (typically $f_n - 1 \leq 10^{-8}$).

Since this model has continuous variables, its energy spectrum is also continuous, and the choice of the energy bin requires special care: If the bin is too large, important details of the spectrum may be lost, whereas if it is too small, a lot of computer time is wasted to ensure the convergence of the method. In the temperature range of interest, a size of order ≈ 0.1 is a good compromise for the model of Eq. (8). In addition, the energy range is limited to the region relevant at the transition and yields all thermodynamic quantities accurately at these temperatures.

Once the density of states $g(E)$ is obtained, all moments of the energy distribution can be computed in a straightforward way as

$$\langle E^n \rangle = \frac{\int g(E) E^n \exp(-\beta E) dE}{\int g(E) \exp(-\beta E) dE}, \quad (\text{A3})$$

from which the specific heat per site is readily obtained:

$$C_v = \frac{1}{N}[\langle E^2 \rangle - (\langle E \rangle)^2]. \quad (\text{A4})$$

For the thermodynamic quantities that are not directly related to the moments of the energy distribution, such as the chirality, the vorticity, and their associated susceptibilities, or the Binder cumulants, we proceed as follows: An additional simulation is performed where $g(E)$ is no longer modified [a “perfect” random walk in energy space if the density of states $g(E)$ is very accurate]. In this last run additional histograms are stored: chirality histograms $\sigma(E)$, $\sigma^2(E)$, and $\sigma^4(E)$ and vorticity histograms $V(E)$, $V^2(E)$, and $V^4(E)$.

Chirality (or vorticity) moments are then obtained from the simple one-dimensional (1D) integration

$$\langle M^n \rangle = \frac{\int g(E) \frac{M^n(E)}{H(E)} \exp(-\beta E)}{\int g(E) \exp(-\beta E)}, \quad (\text{A5})$$

from which, say, the Binder cumulant, is readily obtained as

$$U = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3(\langle M^2 \rangle)^2}, \quad (\text{A6})$$

where $M = \sigma$ or V . Contrary to the method of the joint density of states,⁴⁵ our method does not require the construction of the two-dimensional histogram $g(E, \sigma)$. Hence it is not limited to modest lattice sizes (the above quantities are computed for L up to $L=80$).

¹J. Villain, J. Phys. (Paris) **38**, 385 (1977).

²P. Chandra, P. Coleman, and A. I. Larkin, Phys. Rev. Lett. **64**, 88 (1990).

³C. Weber, L. Capriotti, G. Misguich, F. Becca, M. Elhajal, and F. Mila, Phys. Rev. Lett. **91**, 177202 (2003).

⁴T. Momoi, K. Kubo, and K. Niki, Phys. Rev. Lett. **79**, 2081 (1997).

⁵L. Capriotti and S. Sachdev, Phys. Rev. Lett. **93**, 257206 (2004).

⁶J.-C. Domenge, P. Sindzingre, C. Lhuillier, and L. Pierre, Phys. Rev. B **72**, 024433 (2005).

⁷J.-C. Domenge, C. Lhuillier, L. Messio, L. Pierre, and P. Viot, Phys. Rev. B **77**, 172413 (2008).

⁸P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 (1967); N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).

⁹Sooyeul Lee and Koo-Chul Lee, Phys. Rev. B **49**, 15184 (1994); D. Loison and P. Simon, *ibid.* **61**, 6114 (2000).

¹⁰E. Brézin and J. Zinn-Justin, Phys. Rev. Lett. **36**, 691 (1976).

¹¹This model does not encompass the breathing modes of the trihedra that are present in the fully frustrated spin systems: We suspect that these modes would not change qualitatively the present picture.

¹² RP^n is the real projective space. It is formed by taking the quotient of $\mathbb{R}^{n+1} - \{0\}$ under the relation of equivalence $x \sim \lambda x$ for all real numbers $\lambda \neq 0$ or, equivalently, by identifying antipodal points of the unit sphere S^n in $\mathbb{R}^{n+1}$. RP^2 was introduced in the context of liquid crystals (Ref. 46) (see also Refs. 13 and 47).

¹³S. Caracciolo, R. G. Edwards, A. Pelissetto, and A. D. Sokal, Phys. Rev. Lett. **71**, 3906 (1993).

¹⁴H. Kawamura and S. Miyashita, J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 4138 (1984).

¹⁵G. Kohring and R. E. Shrock, Nucl. Phys. B **285**, 504 (1987).

¹⁶T. Dombre and N. Read, Phys. Rev. B **39**, 6797 (1989).

¹⁷P. Azaria, B. Delamotte, and T. Jolicoeur, Phys. Rev. Lett. **64**, 3175 (1990).

¹⁸H. Kunz and G. Zumbach, Phys. Rev. B **46**, 662 (1992).

¹⁹P. Azaria, B. Delamotte, T. Jolicoeur, and D. Mouhanna, Phys. Rev. B **45**, 12612 (1992).

²⁰B. W. Southern and A. P. Young, Phys. Rev. B **48**, 13170 (1993).

²¹B. W. Southern and H.-J. Xu, Phys. Rev. B **52**, R3836 (1995).

²²M. Hasenbusch, Phys. Rev. D **53**, 3445 (1996).

²³M. Wintel, H. U. Everts, and W. Apel, Phys. Rev. B **52**, 13480 (1995).

²⁴M. Caffarel, P. Azaria, B. Delamotte, and D. Mouhanna, Phys. Rev. B **64**, 014412 (2001).

²⁵N. D. Mermin, Rev. Mod. Phys. **51**, 591 (1979).

²⁶Overall our simulations show no obvious signature of a vortex unbinding transition. However, more conclusive arguments require the computation of more vortex-sensitive quantities, such as the spin stiffness (Ref. 24), or area versus perimeter scaling laws (Ref. 14), which are numerically very demanding.

²⁷T. Momoi, H. Sakamoto, and K. Kubo, Phys. Rev. B **59**, 9491 (1999).

²⁸E. Domany, M. Schick, and R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **52**, 1535 (1984).

²⁹H. W. J. Blote, W. Guo, and H. J. Hilhorst, Phys. Rev. Lett. **88**, 047203 (2002).

³⁰A. C. D. van Enter and S. B. Shlosman, Phys. Rev. Lett. **89**, 285702 (2002).

³¹R. J. Baxter, J. Phys. C **6**, L445 (1973).

³²B. Nienhuis, A. N. Berker, E. K. Riedel, and M. Schick, Phys. Rev. Lett. **43**, 737 (1979).

³³In the Ising- RP^3 model, domain walls separate regions with $\sigma = +1$ from those with $\sigma = -1$. Figure 10 shows that ferromagnetic configurations of the vectors are favored in the bulk of chirality domains. On the other hand, orthogonal configurations are favored on bonds that stand across domain walls. Hence the lowest-energy configuration for the vectors is to point in direction, say, $[1,0,0]$ in the $\sigma = +1$ domain, and in some orthogonal direction, say $[0,1,0]$ in the $\sigma = -1$ domain. An analog low-energy configuration in the discrete model of Eq. (18) is obtained by setting $t_i = 1$ in the bulk of both domains and $t_j = 0$ in the vicinity of the domain wall.

³⁴M. Blume, Phys. Rev. **141**, 517 (1966); H. W. Capel, Physica (Amsterdam) **32**, 966 (1966).

³⁵The Hamiltonian of the Blume-Capel model (Ref. 34) is $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j + \Delta \sum_i S_i^2$, where S_i denotes a spin 1 at site i , J is the ferromagnetic interaction, and Δ is the crystal field. The Blume-Capel model and the site-diluted spin model [Eq. (18)] become equivalent once the -1 contribution is dropped in Eq. (18) and $D(T) = \Delta - T \ln(2)$.

- ³⁶O. G. Mouritsen, S. J. Knak Jensen, and B. Frank, Phys. Rev. B **24**, 347 (1981); O. G. Mouritsen, B. Frank, and D. Mukamel, *ibid.* **27**, 3018 (1983).
- ³⁷J. Oitmaa and R. W. Gibberd, J. Phys. C **6**, 2077 (1973).
- ³⁸J. Oitmaa, J. Phys. C **7**, 389 (1974).
- ³⁹M. Gitterman and M. Mikulinski, J. Phys. C **10**, 4073 (1977).
- ⁴⁰Although the two-spin interactions appearing in E_{eff} up to order T^{-6} are not strictly limited to first neighbors (see the graphs in Table I).
- ⁴¹B. Delamotte, D. Mouhanna, and M. Tissier, Phys. Rev. B **69**, 134413 (2004).
- ⁴²F. W. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
- ⁴³B. J. Schulz, K. Binder, M. Muller, and D. P. Landau, Phys. Rev. E **67**, 067102 (2003).
- ⁴⁴P. Poulain, F. Calvo, R. Antoine, M. Broyer, and Ph. Dugourd, Phys. Rev. E **73**, 056704 (2006).
- ⁴⁵C. Zhou, T. C. Schulthess, S. Torbrügge, and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **96**, 120201 (2006).
- ⁴⁶W. Maier and A. Saupe, Z. Naturforsch. A **14**, 882 (1959); P. A. Lebwohl and G. Lasher, Phys. Rev. A **6**, 426 (1972).
- ⁴⁷P. E. Lammert, D. S. Rokhsar, and J. Toner, Phys. Rev. Lett. **70**, 1650 (1993); P. E. Lammert, D. S. Rokhsar, and J. Toner, Phys. Rev. E **52**, 1778 (1995).

Chapitre 2

Des liquides de spin aux ordres de Néel en bosons de Schwinger

Jusqu'à présent, nous nous sommes placés dans la limite classique où les opérateurs de spins étaient remplacés par des vecteurs unitaires à trois dimensions. Pour un système quantique de spins $S = 1/2$, la possibilité de construire des superpositions d'états porte le nombre de paramètres à 2^{N_s} contre $2N_s$ précédemment. Les systèmes quantiques peuvent se trouver dans des phases analogues au système classique (ordre à longue portée des spins (LRO), ordre nématique, quadripolaire...), mais aussi dans de nombreuses phases n'ayant pas d'équivalent classique. Les configurations singulet (de spin 0) sur un lien ij :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_i\downarrow_j\rangle - |\downarrow_i\uparrow_j\rangle) \quad (2.1)$$

forment des liens de valence (VB) qui minimisent l'énergie sur un lien AF. Ils sont souvent utilisés comme brique élémentaire pour la descriptions de phases quantiques. La grande nouveauté de certaines de ces phases a été l'existence de dégénérescence topologique. Jusque là, les dégénérescences étaient associées à des symétries brisées. Or, des phases ne brisant aucune symétrie, appelées liquides de spins, possèdent une dégénérescence qui dépend de la topologie du réseau [111]. Un des problèmes soulevés par ces phases est leur classification [112] [113]. Voici une liste non exhaustive de phases quantiques qui ne brisent pas l'invariance du Hamiltonien par rotation des spins :

- les solides de liens de valence (VBS) : aucune symétrie spatiale n'est brisée. Ces états produits de liens de valence ont été introduit par Affleck, Kennedy, Lieb et Tasaki [1] et généralisent la chaîne de spin $S = 1$ de Haldane [33]. Ils sont gappés. Chaque lien du réseau porte le même nombre de dimères, ce qui limite ces états aux réseaux où $2S$ vaut un nombre entier de fois la coordinence z (exemples : réseau hexagonal avec $S = 3/2, 3, \dots$, réseau carré avec $S = 2, 4, \dots$). En remplaçant les liens singulets par des clusters singulets, on peut élargir les possibilités de VBS avec par exemple, des hexagones singulets sur le réseau kagome de spin 1 [38].
- les cristaux de liens de valence (VBC) sans brisure spontanée de symétrie : les interactions et le réseau sont tels que le fondamental est proche d'un produit de singulets décorrés sur certains liens et ne brise pas les symétries spatiales. Exemple : le réseau Shastry-Sutherland [20].
- les cristaux de liens de valence avec brisure spontanée de symétrie. Ils existent, en théorie, sur le réseau hexagonal [31], le réseau en échiquier [30] (checkerboard) ou encore, le réseau carré [61]. Mais dans des composés ayant ces géométries, il est probable que le réseau d'atomes portant les spins se déforme, ce qui envoie cette phase dans la catégorie précédente (spin-Peierls transition, voir par exemple [98] sur

le réseau pyrochlore). Un VBC avec une maille de 36 sites a été récemment proposé comme état fondamental du réseau kagomé [97].

- les liquides de liens de valence résonnants (RVB liquids), qui ne brisent aucune symétrie, parmi lesquels on distingue les liquides de spin algébriques (ASL), non gappés et les liquides de spin topologiques (TSL), gappés. Ces liquides possèdent des excitations fractionnaires déconfinées, contrairement aux cristaux de liens de valence.

Un lien de valence peut être considéré comme un dimère. Ces dimères permettent de générer le sous-espace des états de spin total nul grâce aux pavages de dimères : les configurations produits de singulets dont $2S$ dimères partent de chacun des sites. Le modèle de dimères quantiques de Rokhsar-Kivelson [91] est une simplification à l'extrême des modèles de spins, où le recouvrement de deux pavages de dimères est pris en compte à l'ordre le plus bas. Il est détaillé par Moessner et Raman [74]. On y retrouve l'équivalent de plusieurs des phases quantiques précédentes.

Plusieurs approches permettent d'étudier les phases quantiques, mais aucune n'est pleinement satisfaisante :

- le développement en onde de spin, à partir de la limite classique : pour l'effectuer, on prend comme point de départ un état fondamental ordonné à longue portée et on utilise les bosons de Holstein-Primakoff [39] pour développer en $1/S$. Mais il y a deux inconvénients principaux à cette approche : sa convergence n'est pas assurée (et peut être facilement mise en doute lorsque $1/S = 2$) et le développement pose problème lors de l'existence de modes locaux d'énergie nulle (par exemple, le kagome AF premiers voisins),
- les diagonalisations exactes : on résout exactement le Hamiltonien dans la base à 2^{N_s} états. Les symétries du modèle permettent de diminuer la taille de la base (par exemple, on peut traiter chaque sous-espace de spin fixé séparément si le Hamiltonien conserve le spin), mais cette méthode reste limitée à de petits réseaux ($N_s < 40$) où les effets de taille finie sont encore très importants [96]. On peut aussi faire une diagonalisation exacte sur un sous-espace de l'espace de Hilbert : par exemple, se limiter à des fonctions produits de dimères plus proches voisins. Une autre possibilité est d'utiliser la DMRG (density matrix renormalisation group) qui permet d'explorer des tailles un peu plus grandes en limitant la base aux états les plus pertinents, issus de simulations sur des tailles inférieures (un exemple sur kagome : [46]). D'autres méthodes numériques prometteuses apparaissent, comme celle appelée MERA (multiscale entanglement renormalization Ansatz, [102]), avec une application faite sur kagome [29],
- les approximations de champ moyen (pouvant dériver d'une approximation large N [3]), qui nécessitent de choisir un paramètre de champ moyen adapté, puis de résoudre des équations d'auto-cohérence, parfois dans un espace de Hilbert plus grand que l'espace de départ.

C'est la dernière technique que nous allons choisir, et plus particulièrement, celle des bosons de Schwinger en champ moyen, introduite par Arovas et Auerbach [3] et connue pour permettre de décrire dans un même formalisme les états LRO et les TSL.

Soit un réseau de spins S identiques ($= 1/2, 1, \dots$) en interaction. On cherche une approximation du fondamental d'un Hamiltonien polynôme des opérateurs de spin S_i^x, S_i^y et S_i^z . Pour y arriver, on transforme le Hamiltonien initial en un Hamiltonien polynôme d'opérateurs bosoniques auquel on peut ensuite appliquer une théorie de champ moyen à température nulle. Si l'on utilise les bosons de Holstein-Primakoff, le Hamiltonien résultant a perdu la propriété d'invariance par rotation globale des spins alors qu'on voudrait pouvoir décrire des liquides de spins, qui conservent cette symétrie. De plus, les phases SL sont difficiles à décrire en utilisant des opérateurs de spin entier car elles possèdent des excitations fractionnaires de spins $1/2$: les spinons. Il sera difficile d'obtenir des liquides

de spins avec ces bosons. Par contre, la représentation de Schwinger de l'algèbre des opérateurs de spin permet d'exprimer le Hamiltonien en conservant son invariance par rotation des spins et permet d'avoir des opérateurs de spins $S = 1/2$, reliés aux spinons.

La première section de ce chapitre contient les notions de base sur les bosons de Schwinger (et permet de fixer les notations utilisées par la suite) : définition des opérateurs bosoniques, des opérateurs de liens A_{ij} et B_{ij} , invariance de jauge U_1 et expression des opérateurs de spin en terme de bosons.

Dans la Sec.2, la technique du champ moyen est détaillée (sa justification grâce à une approche large- N est expliquée en Ann.C.6). D'abord, la technique de base est rappelée. Ensuite, un algorithme, dû à Colpa [22] permettant de trouver les matrices de passage de la transformation de Bogoliubov est décrit. Nous calculerons sur deux exemples très simples les résultats donnés par cette technique. Suite à ce calcul, nous verrons que l'un des effets du champ moyen est d'induire des fluctuations du nombre de bosons par site, ce que nous expliquerons. Nous en détaillerons les conséquences sur les observables de l'état fondamental.

Enfin, en Sec.3, nous étudierons ce qui rend la SBMFT si intéressante : sa capacité à décrire à la fois des phases avec ou sans corrélations de spins à longue portée. Nous démontrerons sur un cas particulier que, si le spin est supérieur au spin critique, on peut choisir à la limite thermodynamique un état fondamental cohérent, brisant la symétrie SU_2 de rotation des spins. Puis, nous chercherons sur des exemples comment obtenir ces configurations de spins semi-classiques. Les calculs étant réalisés numériquement (sauf cas particuliers), on n'a accès qu'à des tailles de réseau finies. Nous étudierons donc les effets de taille sur plusieurs observables, dont les facteurs de structure, afin de déterminer si l'on se trouve dans une phase ordonnée ou non.

1 Les bosons de Schwinger

1.1 Les opérateurs bosoniques

On introduit sur un site possédant un spin S deux types de bosons : des bosons *up* de spin $+\frac{1}{2}$ selon Oz et des bosons *down* de spin opposé. A chacun des deux types de bosons correspond un opérateur de création et un opérateur d'annihilation : $a^\dagger$, a pour les bosons *up* et $b^\dagger$, b pour les bosons *down*, vérifiant les propriétés de commutation :

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= [b, b^\dagger] = 1 \\ [a, b] &= [a^\dagger, b^\dagger] = 0. \end{aligned}$$

N'importe quel opérateur de spin s'exprime en fonction des opérateurs bosoniques grâce aux relations

$$2S^z = a^\dagger a - b^\dagger b = \hat{n}_a - \hat{n}_b \quad (2.2)$$

$$S^+ = S^x + iS^y = a^\dagger b \quad (2.3)$$

$$S^- = S^x - iS^y = b^\dagger a, \quad (2.4)$$

regroupées dans la formule faisant intervenir les matrices de Pauli $\vec{\sigma}$:

$$2\mathbf{S} = (a^\dagger, b^\dagger) \vec{\sigma} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Les opérateurs $\hat{n}_a = a^\dagger a$ et $\hat{n}_b = b^\dagger b$ sont les nombres de bosons *up* et *down*, $\hat{n}$ est leur somme : le nombre de bosons total. Dans l'espace de Hilbert des spins, l'opérateur vectoriel de spin au carré $\mathbf{S}^2$ sur un site est égal à $S(S+1)$ et s'exprime en fonction des opérateurs bosoniques comme $\frac{\hat{n}}{2} \left(\frac{\hat{n}}{2} + 1 \right)$. L'espace de Hilbert engendré par les opérateurs bosoniques est beaucoup plus grand que l'espace de Hilbert du réseau de spins initial. Pour ne pas en sortir, il faut imposer la contrainte suivante sur le nombre de bosons, avec $\kappa = 2S$:

$$\kappa = \hat{n} = \hat{n}_a + \hat{n}_b. \quad (2.7)$$

Prenons à présent un réseau entier de N_s sites numérotés i et étendons ce qui précède. Les opérateurs a_i , $a_i^\dagger$, b_i et $b_i^\dagger$ ont maintenant un indice i indiquant en quel site ils créent ou suppriment un boson. Les règles de commutation deviennent

$$[a_i, a_j^\dagger] = [b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij},$$

$$[a_i^\dagger, b_j] = [a_i, b_j^\dagger] = [a_i, b_j] = [a_i, a_j] = [b_i, b_j] = 0.$$

La contrainte sur le nombre de bosons s'applique en chaque site.

1.2 Rotation des spins

Posons l'opérateur ϕ_i , matrice des opérateurs bosoniques au site i , défini par

$$\phi_i = \begin{pmatrix} a_i & b_i \\ b_i^\dagger & -a_i^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Lors d'une rotation $R_{\mathbf{n}\theta}$ du spin i d'axe $\mathbf{n} = (x, y, z)$ et d'angle θ , ϕ_i se transforme selon :

$$\phi_i^t \rightarrow \phi_i^{t'} = e^{i\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n} \frac{\theta}{2}} \phi_i^t = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} + iz \sin \frac{\theta}{2} & (y + ix) \sin \frac{\theta}{2} \\ (-y + ix) \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} - iz \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \phi_i^t, \quad (2.9)$$

où ϕ_i^t est la transposée de ϕ_i .

Soit $|\psi_i\rangle = P(a_i, b_i, a_i^\dagger, b_i^\dagger)|0\rangle$ un état obtenu par l'application d'un polynôme d'opérateurs bosoniques sur le vide. Alors, le spin de l'état $|\psi_i'\rangle = P(a_i', b_i', a_i'^\dagger, b_i'^\dagger)|0\rangle$ est l'image de celui de $|\psi_i\rangle$ par la rotation $R_{\mathbf{n}\theta}$.

Opérateur quadratique invariant par rotation globale des spins. Si l'Hamiltonien est invariant par rotation globale des spins, on cherchera à l'exprimer en fonction d'opérateurs quadratiques en opérateurs bosoniques et invariants par rotation, définis sur des liens ij du réseau, le but étant ensuite d'utiliser la valeur moyenne de ces opérateurs comme paramètre de champ moyen. De tels opérateurs O_{ij} s'expriment grâce à une matrice complexe M_{ij} , de taille 4×4 et à un opérateur vectoriel ψ_i :

$$O_{ij} = \psi_i^\dagger M_{ij} \psi_j, \quad \psi_i = \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \\ b_i^\dagger \\ -a_i^\dagger \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Pour que O_{ij} soit invariant par rotation globale des spins, M_{ij} doit vérifier

$$\forall R \in SU_2, \quad \begin{pmatrix} R & 0 \\ 0 & R \end{pmatrix}^{-1} M_{ij} \begin{pmatrix} R & 0 \\ 0 & R \end{pmatrix} = M_{ij}. \quad (2.11)$$

Cette condition est vérifiée pour 4 opérateurs linéairement indépendants A_{ij} , B_{ij} , $A_{ij}^\dagger$ et $B_{ij}^\dagger$, définis par

$$\hat{A}_{ij} = \frac{1}{2}(a_i b_j - a_j b_i) \quad (2.12)$$

$$\hat{B}_{ij} = \frac{1}{2}(a_i^\dagger a_j + b_i^\dagger b_j), \quad (2.13)$$

regroupés dans la matrice U_{ij} :

$$U_{ij} = \phi_i \phi_j^\dagger = 2 \begin{pmatrix} \hat{B}_{ij}^\dagger & \hat{A}_{ij} \\ -\hat{A}_{ij}^\dagger & \hat{B}_{ij} \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

1.3 Invariance de jauge locale

Certaines transformations linéaires locales (sur un seul site i) des opérateurs bosoniques ne modifient ni les opérateurs de spin de l'équation 2.5, ni les relations de commutation des opérateurs bosoniques. Elles sont appelées transformations de jauge locales.

Recherche systématique. Ces transformations de jauge se mettent sous la forme de matrices M_i complexes 4×4 représentant une transformation linéaire dans la base $(a_i, b_i, a_i^\dagger, b_i^\dagger)$. Inversement, une matrice M_i complexe 4×4 doit vérifier certaines conditions pour représenter une transformation de jauge. Nous allons rechercher toutes les transformations de jauge possibles. M_i doit être telle que

$$\forall(x, y, z, t) \in \mathbb{C}^4, \exists(a, b, c, d, e) \in \mathbb{C}^5,$$

$$M_i^\dagger \begin{pmatrix} z-t & x & 0 & 0 \\ y & -z-t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t \end{pmatrix} M_i - \begin{pmatrix} z-t & x & 0 & 0 \\ y & -z-t & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b & 0 & c \\ d & -a & -c & 0 \\ 0 & e & -a & -d \\ -e & 0 & -b & a \end{pmatrix}$$

La matrice comportant des x , y et z (avec $t = 0$) est un représentant de l'opérateur bosonique quadratique associé à l'opérateur $xS_i^+ + yS_i^- + 2zS_i^z$. L'égalité prise pour $t \neq 0$ et $x = y = z = 0$ assure la conservation des relations de commutations. La matrice comportant des $a, b, \dots$ fait partie de l'ensemble des matrices représentant une forme quadratique nulle (car les éléments de la matrice 4×4 sont redondants, par exemple, il y a un coefficient pour $a_i b_i^\dagger$ et un autre pour $b_i^\dagger a_i$).

Les matrices M_i sont à rechercher dans l'ensemble des matrices se décomposant en

$$M_i = \begin{pmatrix} U & V \\ V^* & U^* \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

où U, V sont des matrices complexes de taille 2×2 , car l'image d'un opérateur bosonique se déduit de l'image de son hermitique conjugué.

Les matrices M_i vérifiant ces conditions nous donnent une transformation de jauge locale $U(1)$, car elles se caractérisent par un angle $\theta_i \in [0, 2\pi[$ pour chaque site $i \in \llbracket 1, N_s \rrbracket$ du réseau :

$$\begin{pmatrix} a_i \\ b_i \\ a_i^\dagger \\ b_i^\dagger \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} e^{i\theta_i} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\theta_i} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\theta_i} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\theta_i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \\ a_i^\dagger \\ b_i^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.16)$$

où de manière plus compacte :

$$\phi_i \rightarrow \begin{pmatrix} e^{i\theta_i} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta_i} \end{pmatrix} \phi_i, \quad (2.17)$$

ou encore

$$\begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix} \rightarrow e^{i\theta_i} \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Générateur des transformations de jauge. Grâce aux propriétés suivantes

$$\begin{aligned} e^{i\theta a^\dagger} a^\dagger e^{-i\theta a^\dagger} &= e^{-i\theta} a^\dagger \\ e^{i\theta a^\dagger} a e^{-i\theta a^\dagger} &= e^{i\theta} a, \end{aligned}$$

valable aussi pour les opérateurs b , on déduit que l'opérateur unitaire U_θ effectuant une transformation de jauge est

$$U_\theta = e^{i \sum_j \theta_j \hat{n}_j}. \quad (2.19)$$

1.4 Les flux : des observables invariantes de jauge

Par construction, les transformations de jauge n'ont aucun effet sur les observables de spins. Nous allons voir que des quantités formées à partir des opérateurs de liens A_{ij} et B_{ij} des équations 2.12 et 2.13, individuellement non invariants de jauge, sont invariantes de jauge. Ces quantités sont appelées *flux*.

Les opérateurs $\hat{O}$ invariants selon la transformation de jauge $\hat{O} \rightarrow U_\theta^\dagger \hat{O} U_\theta$ sont des opérateurs qui conservent le nombre de boson en chaque site et réciproquement. On en déduit donc que les observables physiques (celles ne violant pas la contrainte 2.7) sont les quantités invariantes de jauge.

L'effet d'une transformation de jauge sur les opérateurs de lien $\hat{A}_{ij}$ et $\hat{B}_{ij}$ est :

$$\hat{A}_{ij} \rightarrow \hat{A}_{ij} e^{i(\theta_i + \theta_j)}, \quad (2.20)$$

$$\hat{B}_{ij} \rightarrow \hat{B}_{ij} e^{i(\theta_j - \theta_i)}. \quad (2.21)$$

Ces deux opérateurs ne sont pas invariants de jauge. Par contre, ils engendrent de nombreux opérateurs de boucle qui le sont. Pour faire disparaître la dépendance de jauge au site j de $\hat{A}_{ij}$ ou de $\hat{B}_{ij}^\dagger$, on peut le combiner avec $\hat{B}_{jk}$ ou $\hat{A}_{jk}^\dagger$. Si $k = i$, on a formé deux premiers opérateurs invariants de jauge : $\hat{A}_{ij} \hat{A}_{ij}^\dagger$ et $\hat{B}_{ij} \hat{B}_{ij}^\dagger$. Sinon, on poursuit en ajoutant des opérateurs. Ainsi, on peut former un grand nombre d'opérateurs invariants de jauge sur des boucles $ijk \dots z$. Par exemple, en n'utilisant que des $\hat{A}_{ij}$, on peut former sur les boucles à nombre de sites pair l'opérateur

$$\hat{A}_{ij}(-\hat{A}_{jk}^\dagger) \dots \hat{A}_{yz}(-\hat{A}_{zi}^\dagger). \quad (2.22)$$

En n'utilisant que des $\hat{B}_{ij}$, on peut former sur n'importe quelle boucle

$$\hat{B}_{ij} \hat{B}_{jk} \dots \hat{B}_{yz} \hat{B}_{zi}. \quad (2.23)$$

Ces opérateurs conservent le nombre de bosons en chaque site et sont donc des observables physiques. Les phases des valeurs moyennes de ces opérateurs, appelées flux (introduits par Tchernyshyov *et al.* [99]) donnent des informations sur le système de spins, sur ses symétries. Nous étudierons en détail les flux et les observables physiques correspondantes en Sec.2du Chap.3.

1.5 Le Hamiltonien bosonique

Nous allons pour l'instant nous concentrer sur un modèle simple : N_s spins sur un réseau avec un Hamiltonien de Heisenberg, sans champ magnétique. Le Hamiltonien s'exprime en fonction des opérateurs de spins comme :

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (2.24)$$

Par convention, chaque lien ij est pris dans les deux sens, d'où le facteur $1/2$. On remarque que H est invariant par rotation globale des spins. On va donc essayer de le réexprimer en fonction des opérateurs bosoniques quadratiques $\hat{A}_{ij}$ et $\hat{B}_{ij}$ définis aux équations 2.12 et 2.13, eux aussi invariants par rotation globale des spins.

Ces deux opérateurs sont reliés à la densité de triplets et de singulets de spin 0 selon Oz sur un lien, comme nous le verrons dans les formules ci-dessous. On utilisera donc préférentiellement $\hat{A}_{ij}$ pour des interactions antiferromagnétiques (AF) et $\hat{B}_{ij}$ pour des interactions ferromagnétiques (F)¹. Ces opérateurs vérifient les propriétés suivantes :

$$\hat{A}_{ij} = -\hat{A}_{ji} \quad (2.25)$$

$$\hat{B}_{ij}^\dagger = \hat{B}_{ji} \quad (2.26)$$

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j =: \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \quad \text{pour } i \neq j \quad (2.27)$$

où $: \cdot :$ signifie que les opérateurs sont dans l'ordre normal (créateurs à gauche).

Dans le cas où l'on se restreint au sous-espace de Hilbert où la contrainte de l'éq.2.7 est respectée, on a la relation supplémentaire suivante :

$$: \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : + \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} = S \left(S - \frac{\delta_{ij}}{2} \right) \quad (2.28)$$

(dans l'espace de Hilbert élargi, $: \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : + \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} = n_i(n_j - \delta_{ij})/4$). On peut utiliser cette relation pour utiliser un seul des deux opérateurs de lien sur chacun des liens, en fonction du signe de J_{ij} .

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = S^2 - 2\hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \quad \text{pour } i \neq j \quad (2.29)$$

$$= 2 : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - S^2 \quad \text{pour } i \neq j, \quad (2.30)$$

Le Hamiltonien de Heisenberg 2.24 se réexprime en fonction des opérateurs bosoniques :

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j, J_{ij} > 0} J_{ij} \left(S^2 - 2\hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j, J_{ij} < 0} J_{ij} \left(2 : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : - S^2 \right). \quad (2.31)$$

2 L'approximation de champ moyen

A partir du Hamiltonien 2.31, on peut effectuer une approximation de champ moyen en utilisant comme paramètres les moyennes dans l'état fondamental des opérateurs de liens $\hat{A}_{ij}$ et $\hat{B}_{ij}$.²

¹Cette préférence se justifie ensuite dans l'approximation de champ moyen, voir Sec.2

²L'utilisation de la relation 2.28 pour obtenir les deux équations 2.29 et 2.30 a donné lieu à de nombreux débats. On peut en effet faire une approximation de champ moyen sur le Hamiltonien obtenu par 2.27 avec deux paramètres par lien ou par 2.29 ou 2.30 avec un seul paramètre par lien, ce qui change beaucoup de choses (présence d'un facteur 2 dans l'énergie selon Cecatto *et al.* [12]). La réponse est simple : si l'on est

2.1 Le Hamiltonien de champ moyen

Le Hamiltonien 2.31 est rigoureusement identique au Hamiltonien 2.24, à la condition de rester dans le sous-espace où la contrainte 2.7 est respectée. L'approximation de champ moyen néglige les fluctuations de $\hat{B}_{ij}$ et de $\hat{A}_{ij}$:

$$\begin{aligned} : \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : &= : (\hat{B}_{ij}^\dagger - B_{ij}^*)(\hat{B}_{ij} - B_{ij}) : + \hat{B}_{ij}^\dagger B_{ij} + \hat{B}_{ij} B_{ij}^* - |B_{ij}|^2 \\ &\sim \hat{B}_{ij}^\dagger B_{ij} + \hat{B}_{ij} B_{ij}^* - |B_{ij}|^2, \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \sim \hat{A}_{ij}^\dagger A_{ij} + \hat{A}_{ij} A_{ij}^* - |A_{ij}|^2, \quad (2.33)$$

où B_{ij} (resp A_{ij}) est la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{B}_{ij}$ (resp $\hat{A}_{ij}$) dans l'état fondamental, et l'étoile * signifie complexe conjugué. C'est une approximation grossière, mais qui se justifie dans le cadre d'une approximation large N qui sera détaillée en Ann.C.6.

La contrainte sur le nombre de bosons par site (équation 2.7) nécessite l'ajout d'un terme dans le Hamiltonien, faisant intervenir un multiplicateur de Lagrange λ_i en chaque site i du réseau. Ce terme est $\sum_i \lambda_i (\kappa - \hat{n}_i)$, où $\hat{n}_i = \hat{n}_{ai} + \hat{n}_{bi}$. Il permet, par un réglage des paramètres λ_i , d'ajuster la valeur *moyenne* du nombre de bosons par site à κ dans l'état fondamental (GS). Les λ_i sont ainsi des potentiels chimiques favorisant ou pénalisant la présence des bosons. On peut choisir $\kappa = 2S$: le GS sera une superposition d'états à différents nombres de bosons, dont uniquement la moyenne sera $2S$. Bien sûr, c'est un point négatif de la théorie car le GS approximé sera hors de l'espace de Hilbert des spins, mais comme κ n'a plus aucune raison d'être entier, cela permet de choisir n'importe quelle valeur réelle positive et de ne plus se limiter aux valeurs entières. κ est alors un paramètre continu qui permet d'ajuster le poids des fluctuations quantiques.

Le Hamiltonien de champ moyen est

$$\begin{aligned} H_{\text{MF}} &= \sum_{ij, AF} J_{ij} \left(A_{ij}^* b_i a_j - A_{ij} a_i^\dagger b_j^\dagger \right) + \sum_{ij, F} J_{ij} \left(B_{ij}^* a_i^\dagger a_j + B_{ij} b_i b_j^\dagger \right) - \sum_i \lambda_i (a_i^\dagger a_i + b_i b_i^\dagger) \\ &\quad + \sum_{ij, AF} J_{ij} \left(\frac{S^2}{2} + |A_{ij}|^2 \right) - \sum_{ij, F} J_{ij} \left(|B_{ij}|^2 + \frac{S^2}{2} \right) + \sum_i \lambda_i (\kappa + 1). \end{aligned} \quad (2.34)$$

La première ligne est quadratique en opérateurs bosoniques. La deuxième ligne est une constante, que l'on appelle par la suite ϵ_0 . Le Hamiltonien se met sous la forme

$$H_{\text{MF}} = \psi^\dagger M \psi + \epsilon_0, \quad (2.35)$$

$$\epsilon_0 = \sum_{ij, AF} J_{ij} \left(\frac{S^2}{2} + |A_{ij}|^2 \right) - \sum_{ij, F} J_{ij} \left(|B_{ij}|^2 + \frac{S^2}{2} \right) + \sum_i \lambda_i (\kappa + 1), \quad (2.36)$$

où le vecteur d'opérateurs ψ est défini par

$$\psi = \left(a_1, a_2, \dots, a_{N_s}, b_1^\dagger, b_2^\dagger, \dots, b_{N_s}^\dagger \right)^t, \quad (2.37)$$

dans l'espace de Hilbert à exactement $\kappa = 2S$ bosons par site, les deux Hamiltoniens sont tout à fait identiques, par conséquent, les fondamentaux et les énergies le sont aussi. Les complications arrivent lorsqu'on passe en champ moyen, où la contrainte 2.7 n'est plus vérifiée qu'en moyenne. Alors, la relation 2.28 n'est plus vraie et les Hamiltoniens ne sont plus identiques. Ils ont des fondamentaux et des énergies propres différentes, mais aucun n'est meilleur que l'autre. Ils donnent juste lieu à deux théories de champ moyen différentes. Pour la simplicité des calculs, nous avons choisi de faire le champ moyen sur le Hamiltonien 2.31.

et où M est une matrice hermitienne $2N_s \times 2N_s$ se décomposant en 4 blocs ³ :

$$M = \begin{pmatrix} \mathcal{B}^* - L & -\mathcal{A} \\ \mathcal{A}^* & \mathcal{B} - L \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

$$L_{ij} = \delta_{ij} \lambda_i \quad (2.39)$$

$$\mathcal{B}_{ij} = J_{ij} B_{ij} \quad \text{si } J_{ij} < 0 \quad (2.40)$$

$$\mathcal{A}_{ij} = J_{ij} A_{ij} \quad \text{si } J_{ij} > 0. \quad (2.41)$$

2.2 Réseau périodique

Si le réseau sur lequel se trouvent les spins est périodique et que le Hamiltonien étudié respecte cette symétrie par translation ⁴, alors on peut passer dans l'espace réciproque du réseau de Bravais. Pour cela, on commence par renuméroter chaque site du réseau en lui donnant deux indices : la position de sa maille $\mathbf{x}$ et son numéro de site à l'intérieur de la maille i . On appelle m le nombre de sites contenus dans une maille élémentaire du réseau de Bravais et $N_m = N_s/m$ le nombre de mailles du réseau. L'indice i peut donc varier de 1 à m . Les opérateurs transformés de Fourier sont définis par :

$$a_{i\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_{\mathbf{x}} a_{i\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}}, \quad (2.42)$$

$$b_{i\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_{\mathbf{x}} b_{i\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}}. \quad (2.43)$$

La transformée inverse s'écrit alors

$$a_{i\mathbf{x}} = \frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_{\mathbf{q}} a_{i\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}}, \quad (2.44)$$

$$b_{i\mathbf{x}} = \frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_{\mathbf{q}} b_{i\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}}. \quad (2.45)$$

Les relations de commutation dans l'espace réciproque sont comparables à celles de l'espace réel :

$$[a_{i\mathbf{q}}, (a_{j\mathbf{k}})^\dagger] = [b_{i\mathbf{q}}, (b_{j\mathbf{k}})^\dagger] = \delta_{ij} \delta_{\mathbf{q}\mathbf{k}},$$

$$[(a_{i\mathbf{q}})^\dagger, b_{j\mathbf{k}}] = [a_{i\mathbf{q}}, (b_{j\mathbf{k}})^\dagger] = [a_{i\mathbf{q}}, b_{j\mathbf{k}}] = [a_{i\mathbf{q}}, a_{j\mathbf{k}}] = [b_{i-\mathbf{q}}, b_{j\mathbf{k}}] = 0.$$

En réexprimant H_{MF} en fonction de ces nouveaux opérateurs bosoniques, on obtient un découplage des différents modes, chacun étant repéré par un vecteur d'onde $\mathbf{q}$:

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{q}} (\psi_{\mathbf{q}})^\dagger N_{\mathbf{q}} \psi_{\mathbf{q}} + \epsilon_0, \quad (2.46)$$

³La taille de M est $2N_s \times 2N_s$ car le Hamiltonien conserve le spin selon Oz . En effet, le Hamiltonien n'est une combinaison linéaire que des opérateurs suivants : $a_i^\dagger a_j$, $a_i^\dagger b_j^\dagger$, $b_i a_j$, $b_i b_j^\dagger$ et ne comporte pas de termes du type $a_i a_j$, $a_i^\dagger a_j^\dagger$, $a_i b_j^\dagger$, $b_i^\dagger a_j$, $b_i b_j$, $b_i^\dagger b_j^\dagger$. Si cela n'avait pas été le cas, il aurait fallu mettre le Hamiltonien sous la forme

$$H_{MF} = \psi^\dagger M \psi + \epsilon_0,$$

où cette fois M aurait été une matrice hermitienne $4N_s \times 4N_s$, et où le vecteur ψ aurait été défini par

$$\psi = \left(a_1, \dots, a_{N_s}, b_1, \dots, b_{N_s}, a_1^\dagger, \dots, a_{N_s}^\dagger, b_1^\dagger, \dots, b_{N_s}^\dagger \right)^t.$$

⁴Attention, dans notre cas, il s'agira du Hamiltonien de champ moyen. Il pourra arriver que le Hamiltonien de champ moyen ait moins de symétries que le Hamiltonien d'origine.

où ϵ_0 est toujours la constante définie en 2.36. Les $\psi_{\mathbf{q}}$ sont définis par

$$\psi_{\mathbf{q}} = \left(a_{1\mathbf{q}}, \dots, a_{m\mathbf{q}}, (b_{1-\mathbf{q}})^\dagger, \dots, (b_{m-\mathbf{q}})^\dagger \right)^t. \quad (2.47)$$

La matrice $N_{\mathbf{q}}$ est hermitique et se décompose en 4 matrices complexes $m \times m$:

$$N_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} \mathcal{B}_{-\mathbf{q}}^t - L & -\mathcal{A}_{\mathbf{q}} \\ -\mathcal{A}_{\mathbf{q}}^\dagger & \mathcal{B}_{\mathbf{q}} - L \end{pmatrix}, \quad (2.48)$$

$$(L)_{ij} = \delta_{ij} \lambda_i, \quad (2.49)$$

$$(\mathcal{B}_{\mathbf{q}})_{ij} = \sum_{\mathbf{x}, J_{(\mathbf{0},i)(\mathbf{x},j)} < 0} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} J_{(\mathbf{0},i)(\mathbf{x},j)} B_{(\mathbf{0},i)(\mathbf{x},j)}, \quad (2.50)$$

$$(\mathcal{A}_{\mathbf{q}})_{ij} = \sum_{\mathbf{x}, J_{(\mathbf{0},i)(\mathbf{x},j)} > 0} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} J_{(\mathbf{0},i)(\mathbf{x},j)} A_{(\mathbf{0},i)(\mathbf{x},j)}. \quad (2.51)$$

La transformation du Hamiltonien que l'on a effectuée est très intéressante puisqu'elle permet de passer d'une matrice $2N_s \times 2N_s$ à N_m matrices $2m \times 2m$. Grâce à la transformée de Fourier, on a diagonalisé par bloc la grosse matrice M .

2.3 L'autocohérence et l'ajustement des paramètres

Le Hamiltonien de champ moyen dépend des paramètres A_{ij} , B_{ij} et λ_i . On ne les connaît pas a priori. On appelle *Ansatz* un ensemble de paramètres de liens $\{A_{ij}, B_{ij}\}$. Dans l'espace de Hilbert des spins, à un boson par site, A_{ij} et B_{ij} sont nuls. En effet, $\hat{A}_{ij}$ et $\hat{B}_{ij}$ ne conservent pas le nombre de bosons sur les sites auxquels ils s'appliquent. Ils ne peuvent avoir une valeur non nulle que dans l'espace de Hilbert élargi. C'est cette valeur que l'on cherche à ajuster de façon à respecter l'autocohérence : les valeurs moyennes de $\hat{A}_{ij}$ et $\hat{B}_{ij}$ dans le GS de H_{MF} doivent correspondre aux paramètres A_{ij} et B_{ij} et le nombre moyen de bosons par site doit être κ .

Pour des A_{ij} et B_{ij} fixés, régler la contrainte sur le nombre de bosons équivaut à extrémiser l'énergie E_0 du GS ⁵ par rapport aux λ_i :

$$\forall k, \frac{\partial E_0(\{A_{ij}\}, \{B_{ij}\}, \{\lambda_i\})}{\partial \lambda_k} = 0 \quad (2.52)$$

Cette équation possède soit une solution où l'énergie est un maximum en λ_k , soit n'en possède aucune (preuve par la théorie des perturbations, Ann.C.1.1). S'il n'y a pas de solution, le GS brise la symétrie de rotation des spins (Sec.3). On se place dans le cas où il existe une solution : on connaît alors la fonction $\lambda_i(\{A_{ij}\}, \{B_{ij}\})$. Il ne reste alors plus qu'à respecter l'autocohérence sur les A_{ij} et B_{ij} , ce qui revient à extrémiser l'énergie selon ces variables (Ann.C.2.1) :

$$\forall k, \forall l, \frac{\partial E_0(\{A_{ij}\}, \{B_{ij}\}, \{\lambda_i(\{A_{ij}\}, \{B_{ij}\})\})}{\partial A_{kl}} = 0 \quad \text{si } J_{kl} > 0, \quad (2.53)$$

$$\forall k, \forall l, \frac{\partial E_0(\{A_{ij}\}, \{B_{ij}\}, \{\lambda_i(\{A_{ij}\}, \{B_{ij}\})\})}{\partial B_{kl}} = 0 \quad \text{si } J_{kl} < 0. \quad (2.54)$$

On peut montrer (Ann.C.2.2) que pour respecter ces équations, les modules des paramètres doivent vérifier $|B_{ij}| \leq \kappa/2$ et $|A_{ij}| \leq (\kappa + 1)/2$. Une méthode utilisable pour

⁵Cette énergie E_0 du fondamental de H_{MF} se calcule grâce à la transformation de Bogoliubov, expliquée dans la section suivante.

résoudre numériquement le problème de l'extrémisation (minimisation ou maximisation) d'une fonction est celle de Nelder-Mead, détaillée en Ann.B.2. Pour le réglage des λ_i , elle converge toujours vers la solution si elle existe (Ann.C.1.2). On peut aussi utiliser des méthodes utilisant les dérivées locales (approximation de la fonction par une parabole).

Une fois tous les paramètres ajustés, on a enfin notre Hamiltonien de champ moyen final, et on peut en déduire les propriétés de son fondamental, que l'on espère proches de celles du fondamental du Hamiltonien de départ. Pour faire des calculs sur le fondamental de H_{MF} , il est nécessaire de se placer dans la base des bosons de Bogoliubov grâce à la transformation du même nom.

2.4 La transformation de Bogoliubov

Le système à résoudre On part de l'équation 2.35, rappelée ici (mais la résolution est transposable au Hamiltonien 2.46) :

$$H_{MF} = \psi^\dagger M \psi + \epsilon_0. \quad (2.55)$$

On cherche un nouvel ensemble d'opérateurs bosoniques, repérés par un tilde, que l'on range dans le vecteur

$$\tilde{\psi} = \left(\tilde{a}_1, \tilde{a}_2, \dots, \tilde{a}_{N_s}, \tilde{b}_1^\dagger, \tilde{b}_2^\dagger, \dots, \tilde{b}_{N_s}^\dagger \right)^t, \quad (2.56)$$

tel que la matrice du Hamiltonien dans cette nouvelle base d'opérateurs $\tilde{M}$ soit diagonale. On appelle énergies propres du Hamiltonien les $2N_s$ coefficients diagonaux de $\tilde{M}$ et on les note ω_i . Ces nouveaux opérateurs sont des combinaisons linéaires des anciens. Ils sont reliés par :

$$\psi = P \tilde{\psi}, \quad (2.57)$$

où P est une matrice de passage carrée à coefficients complexes de taille $2N_s \times 2N_s$.

La matrice P doit vérifier les deux conditions suivantes :

- les nouveaux bosons doivent avoir des relations de commutation correctes,
- $\tilde{M}$ doit être diagonale,

ce qui se traduit par le système de deux équations :

$$\begin{cases} PJP^\dagger = J \\ P^\dagger MP = \tilde{M} \end{cases} \quad (2.58)$$

où J est la matrice carrée diagonale de taille $2N_s \times 2N_s$

$$J = \begin{pmatrix} I_{N_s} & 0_{N_s} \\ 0_{N_s} & -I_{N_s} \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

On appelle cette transformation une para-diagonalisation ou transformation de Bogoliubov, et la première condition de 2.58 sur P est appelée sa para-unitarité. Les nouveaux bosons (avec un tilde) sont appelés bosons de Bogoliubov.

Le système d'équations 2.58 implique que l'équation

$$P^{-1}(JM)P = (J\tilde{M}) \quad (2.60)$$

est vérifiée. Les énergies propres de H_{MF} sont donc, au signe près, les valeurs propres de la matrice JM , et les colonnes de P , ses vecteurs propres. Les valeurs propres positives correspondent aux énergies propres ω_i des modes $\tilde{a}_i^\dagger \tilde{a}_i$, celles négatives à l'opposé des énergies propres ω_{i+N_s} des modes $\tilde{b}_i \tilde{b}_i^\dagger$.

Algorithme de résolution Il existe un algorithme, expliqué par Colpa [22] permettant de trouver la matrice P vérifiant notre système d'équations 2.58 :

- On cherche une matrice K triangulaire supérieure (tous les coefficients sous la diagonale sont nuls) telle que $M = K^\dagger K$, grâce à la décomposition de Cholesky,
- On diagonalise ensuite la matrice $KJK^\dagger$ grâce à une matrice de passage unitaire U , de telle façon que les valeurs propres positives soient sur les premiers coefficients de la matrice diagonale $J\tilde{N} = U^\dagger KJK^\dagger U$
- On obtient alors les énergies propres du Hamiltonien : $\tilde{N}$ et la matrice de passage $P = K^{-1}U\tilde{N}^{1/2}$.

L'inconvénient majeur de cet algorithme, par ailleurs très efficace, est qu'il ne fonctionne que dans le cas où la matrice M est définie positive (c'est à dire si toutes ses valeurs propres sont strictement positives), ce qui est équivalent à n'avoir que des énergies propres strictement positives⁶. Lorsqu'une ou plusieurs énergies propres sont nulles, la situation est plus compliquée : P peut ne pas exister (voir section 3).

L'énergie du fondamental et le gap L'énergie E_0 du GS est celle du vide des bosons de Bogoliubov :

$$E_0 = \sum_{i=1}^{N_s} \omega_{i+N_s} + \epsilon_0, \quad (2.61)$$

avec ϵ_0 définit plus haut et dont la valeur est rappelée ici :

$$\epsilon_0 = \sum_{ij, J_{ij} > 0} J_{ij} \left(\frac{S^2}{2} + |A_{ij}|^2 \right) - \sum_{ij, J_{ij} < 0} J_{ij} \left(\frac{S^2}{2} + |B_{ij}|^2 \right) + \sum_i \lambda_i (\kappa + 1) \quad (2.62)$$

On définit le gap de bosons comme

$$g_b = \min_{i \in \{1, \dots, 2N_s\}} \omega_i, \quad (2.63)$$

et le gap de spin comme

$$g_s = \min_{i, j \in \{1, \dots, 2N_s\}} \omega_i + \omega_j = 2g_b. \quad (2.64)$$

Le premier est l'énergie minimale d'une excitation élémentaire dans l'espace des bosons, appelée spinon. Le deuxième gap est l'énergie minimale d'une excitation élémentaire dans l'espace des spins, appelée magnon. Les spinons ont un spin $S = 1/2$ et sont des excitations fractionnaires du système de spin (aucun opérateur local de spin ne peut créer un seul spinon, car un tel opérateur modifie le spin total d'un nombre entier). Les magnons sont composés de deux spinons et leur énergie est la somme des énergies des spinons. Selon le modèle considéré, deux cas sont possibles :

- les spinons sont confinés : il faut une énergie infinie pour éloigner deux spinons à l'infini l'un de l'autre,
- ou le contraire : les spinons sont déconfinés.

Dans notre modèle de champ moyen, les spinons sont toujours déconfinés. Mais ajouter des fluctuations peut tout changer. Un exemple de calcul prenant en compte les fluctuations de jauge à l'ordre $1/N$ dans l'approche large- N (voir Ann.C6) se trouve dans l'article de Sachdev [92].

⁶Démonstration : la matrice du Hamiltonien représente une forme quadratique. On appelle inertie de la matrice le triplet constitué du nombre de valeurs propres positives, nulles et négatives. Conjuguer la matrice revient à changer de base et ne change pas son inertie (la congugaison d'une matrice M est l'opération $M \rightarrow P^\dagger M P$ où P est une matrice inversible). Donc, pour avoir des énergies propres strictement positives, il faut que la matrice du Hamiltonien soit définie positive.

2.5 Exemple détaillé : un lien isolé

Nous allons prendre un exemple très simple : deux spins S sur des sites numérotés 1 et 2, couplés par une interaction d'Heisenberg $J_{12} = \pm 1$:

$$H = J_{12} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2. \quad (2.65)$$

Pour $J_{12} = 1$ ou $J_{12} = -1$, les résolutions en SBMFT sont très différentes et représentatives de l'intérêt et des limites de la SBMFT. Le fondamental de champ moyen du lien AF est la superposition de singulets des tous les spins possibles, avec des coefficients dépendant de κ . Pour le lien F, on obtient une brisure de SU_2 , la symétrie par rotation des spins.

Lien AF : $J_{12} = 1$

Les paramètres à ajuster sont λ_1 , λ_2 et A_{12} , que l'on peut choisir réel et positif grâce à la liberté de jauge. Alors

$$M = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & 0 & 0 & -A_{12} \\ 0 & -\lambda_2 & A_{12} & 0 \\ 0 & A_{12} & -\lambda_1 & 0 \\ -A_{12} & 0 & 0 & -\lambda_2 \end{pmatrix}. \quad (2.66)$$

Pour que le fondamental existe, il faut que M soit positive, ce qui nécessite

$$\lambda_1 \lambda_2 \geq A_{12}^2 \quad \text{et} \quad \lambda_1 + \lambda_2 \leq 0. \quad (2.67)$$

On se place par la suite dans ce cas. Les énergies des modes propres sont les valeurs absolues des valeurs propres de JM (J est la matrice définie en Eq.2.59) :

$$\pm \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} + \sqrt{\left(\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2}\right)^2 - A_{12}^2}, \quad (2.68)$$

chacune en deux exemplaires (une pour les $\tilde{a}_i$, l'autre pour les $\tilde{b}_i$). L'énergie du vide des bosons de Bogoliubov est alors, d'après les formules 2.61 et 2.62 :

$$E_0 = \sqrt{(\lambda_1 + \lambda_2)^2 - 4A_{12}^2} + S^2 + 2A_{12}^2 + (\lambda_1 + \lambda_2)(\kappa + 1). \quad (2.69)$$

En résolvant les équations d'autocohérence, on obtient pour $\kappa = 2S$:

$$A = \sqrt{S(S+1)}, \quad (2.70)$$

$$\lambda_1 + \lambda_2 = -(2S+1), \quad (2.71)$$

$$E = -S(S+2). \quad (2.72)$$

On remarque que seule la somme $\lambda_1 + \lambda_2$ est fixée. La différence $\lambda_1 - \lambda_2$ est libre, dans la limite où la contrainte 2.67 est respectée. L'explication tient en la présence d'un unique paramètre A_{ij} , qui contraint le nombre de bosons à être identique sur les deux sites. Les deux λ_i se compensent donc et seule leur somme intervient.⁷ Par conséquent, le gap de spin varie de 1 pour une différence nulle (on retrouve ici le gap du modèle de spins initial) à 0 pour une différence maximale. Cette liberté se retrouve dans beaucoup de systèmes à deux sous-réseaux et ne semble pas avoir de réalité physique (sur le Hamiltonien de spin, le gap est univoque).

⁷Le terme de potentiel chimique $-(\lambda_1 \hat{n}_1 + \lambda_2 \hat{n}_2)$ peut se réécrire $-1/2((\lambda_1 + \lambda_2)(\hat{n}_1 + \hat{n}_2) + (\lambda_1 - \lambda_2)(\hat{n}_1 - \hat{n}_2))$. Comme $\hat{n}_1 - \hat{n}_2 = 0$ dans l'état fondamental, la différence $\lambda_1 - \lambda_2$ n'influe pas sur son énergie.

Pour un spin $S = 1/2$, $A = \sqrt{3}/2$, $\lambda = -1$ et $E = -3/5$.

Cherchons maintenant le fondamental $|\phi_{MF}\rangle$ que l'on a obtenu grâce à notre théorie de champ moyen. On décompose $|\phi_{MF}\rangle$ dans la base canonique des états propres de n_{a_1} , n_{a_2} , n_{b_1} et n_{b_2} :

$$|\phi_{MF}\rangle = \sum_{xyzt} \alpha_{xyzt} |x, y, z, t\rangle,$$

où les entiers x, y, z et t sont les nombres de bosons a_1, a_2, b_1 et b_2 . La matrice de passage inverse est (à une transformation de jauge des bosons de Bogoliubov près)

$$P^{-1} = \sqrt{S} \begin{pmatrix} -v & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -v & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -v & 0 \\ -1 & 0 & 0 & v \end{pmatrix}, \quad (2.73)$$

où $v = \sqrt{\frac{S+1}{S}}$. P^{-1} permet d'exprimer les bosons de Bogoliubov en fonction des bosons de départ. $|\phi_{MF}\rangle$ doit être état propre des opérateurs $\tilde{a}_1, \tilde{a}_2, \tilde{b}_1$ et $\tilde{b}_2$ pour la valeur propre 0. Après résolution du système, on obtient à une phase près

$$\begin{aligned} |\phi_{MF}\rangle &= \frac{1}{S+1} \left(|0\rangle + \frac{1}{v} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle) + \frac{1}{v^2} (|\uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow, \uparrow\uparrow\rangle) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{v^2} (|\uparrow\uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow\downarrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow, \downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow, \uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\downarrow, \uparrow\uparrow\uparrow\rangle) + \dots \right) \\ &= \frac{1}{S+1} e^{(a_1^\dagger b_2^\dagger - a_2^\dagger b_1^\dagger)/v} |0\rangle. \end{aligned} \quad (2.74)$$

On a obtenu le vide des bosons de Bogoliubov à partir de la matrice de passage P . La formule générale, valable pour une matrice de passage quelconque est donnée et démontrée dans le livre de Blaizot et Ripka [7] (chapitre 2.1). Le nombre de bosons par site est bien $\langle n_i \rangle = 2S$ en moyenne, mais avec un écart quadratique de $\langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2 = 2S(S+1)$, ce qui se retrouve grâce au théorème de Wick (Sec.2.6).

Lien ferromagnétique : $J_{12} = -1$

Les paramètres à ajuster sont λ_1, λ_2 et B_{12} , que l'on peut choisir réel et positif grâce à la liberté de jauge. Alors

$$M = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & -B_{12} & 0 & 0 \\ -B_{12} & -\lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_1 & -B_{12} \\ 0 & 0 & -B_{12} & -\lambda_2 \end{pmatrix}. \quad (2.75)$$

Pour que M soit positive, il faut que

$$\lambda_1 \lambda_2 \geq B_{12}^2 \quad \text{et} \quad \lambda_1 + \lambda_2 \leq 0. \quad (2.76)$$

Les énergies des modes propres sont les valeurs absolues des valeurs propres de JM :

$$-\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2}\right)^2 + B_{12}^2}, \quad (2.77)$$

chacune en deux exemplaires (un pour les $\tilde{a}_i$, l'autre pour les $\tilde{b}_i$).

L'énergie du vide des bosons de Bogoliubov est alors

$$E_0 = S^2 + 2B_{12}^2 + \kappa(\lambda_1 + \lambda_2). \quad (2.78)$$

On ne peut pas ajuster le nombre de bosons. On prend donc λ_1 et λ_2 tels que la matrice M soit définie non positive : $\lambda_1\lambda_2 = B_{12}^2$ et $\lambda_1 + \lambda_2 < 0$. On ajoutera ensuite des bosons au vide des bosons de Bogoliubov pour ajuster leur nombre. La solution avec $\kappa = 2S$ est :

$$B_{12} = S \quad (2.79)$$

$$\lambda_1 = \lambda_2 = -S \quad (2.80)$$

$$E = -S^2 \quad (2.81)$$

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.82)$$

Comme la matrice de passage est diagonale par blocs de 2, le vide des bosons de Bogoliubov est aussi le vide des bosons sur site. Il faut donc ajouter $2S$ bosons sur chaque site en prenant par exemple un état cohérent de l'un des bosons de Bogoliubov d'énergie nulle. Ainsi, l'état fondamental obtenu brise la symétrie par rotation des spins. La transformation de Bogoliubov est possible dans ce cas, mais nous verrons que parfois, lorsque l'une des énergies propres est nulle, elle ne l'est pas (Sec.3).

2.6 Effets des fluctuations du nombre de bosons par site sur les observables du système

La SBMFT nous fournit des fonctions d'ondes dans l'espace de Hilbert des bosons, plus grand que celui des spins : ce sont des superpositions d'états à 0, 1 ou n'importe quel nombre de bosons sur les différents sites du réseau alors qu'il en faudrait exactement $2S$ pour être dans l'espace des spins.

On a deux possibilités pour exploiter un résultat de SBMFT : choisir de calculer les valeurs moyennes d'observables sur la fonction d'onde qui est l'état fondamental du Hamiltonien de champ moyen, en supposant qu'elle seront qualitativement correctes, ou bien d'abord projeter la fonction d'onde de bosons sur le sous-espace à un boson par site, et alors seulement calculer la valeur moyenne des observables sur la fonction d'onde de spin obtenue. L'état projeté a alors comme intérêt d'être variationnel, c'est à dire que son énergie est supérieure ou égale à celle du fondamental. La projection de Gutzwiller est lourde numériquement pour une fonction d'onde bosonique (elle est décrite par exemple dans [17] pour des bosons). De plus, la théorie de champ moyen est déjà en elle-même très riche et donne accès à de nombreuses informations qualitatives, telles les différentes phases possibles pour un état fondamental et les instabilités favorisant l'une ou l'autre.

Ce sont donc les observables physiques des fonctions d'onde obtenues par le champ moyen qui vont nous intéresser. Elles sont qualifiées de *physiques* par opposition aux quantités non invariantes de jauge. Nous allons voir l'effet des fluctuations du nombre de bosons par site sur ces observables.

Une fois les λ_i et les A_{ij} fixés, le Hamiltonien est quadratique en opérateurs bosoniques. On peut donc appliquer le théorème de Wick : toute valeur moyenne d'un produit d'opérateurs bosoniques en nombre pair est égale à la somme de tous les produits de moyennes de contractions possibles. Dans notre cas, la moyenne est prise à température nulle.

$$\langle e_1 e_2 \cdots e_k \rangle = \sum_{\sigma} \langle e_{\sigma_1} e_{\sigma_2} \rangle \cdots \langle e_{\sigma_{k-1}} e_{\sigma_k} \rangle, \quad (2.83)$$

avec la somme portant sur toutes les permutations de $\{1, \dots, z\}$. Calculons par exemple la valeur moyenne suivante (les indices $i\mathbf{x}$ sont implicites sur les opérateurs bosoniques)

$$\begin{aligned}\langle S_{i\mathbf{x}}^+ S_{i\mathbf{x}}^- \rangle_{MF} &= \langle a^\dagger b b^\dagger a \rangle_{MF} \\ &= |\langle ba \rangle_{MF}|^2 + |\langle b^\dagger a \rangle_{MF}|^2 + \langle a^\dagger a \rangle_{MF} \langle b^\dagger b \rangle_{MF} + \langle a^\dagger a \rangle_{MF}. \quad (2.84)\end{aligned}$$

On connaît certains termes parce que le Hamiltonien conserve le spin et grâce au réglage du potentiel chimique :

$$\langle aa \rangle_{MF} = \langle bb \rangle_{MF} = \langle b^\dagger a \rangle_{MF} = \langle a^\dagger b \rangle_{MF} = 0, \quad \langle a^\dagger a \rangle_{MF} + \langle b^\dagger b \rangle_{MF} = \kappa. \quad (2.85)$$

Si de plus l'état fondamental est invariant par rotation globale des spins

$$\langle ba \rangle_{MF} = 0, \quad \langle a^\dagger a \rangle_{MF} = \langle b^\dagger b \rangle_{MF} = \kappa/2. \quad (2.86)$$

On peut alors calculer exactement les quantités :

$$\langle (S_{i\mathbf{x}}^z)^2 \rangle_{MF} = \frac{1}{8} \kappa (\kappa + 2) \quad (2.87)$$

$$\langle S_{i\mathbf{x}}^+ S_{i\mathbf{x}}^- \rangle_{MF} = \frac{1}{4} \kappa (\kappa + 2), \quad (2.88)$$

$$\langle n_{i\mathbf{x}}^2 \rangle_{MF} - \langle n_{i\mathbf{x}} \rangle_{MF}^2 = \frac{1}{2} \kappa (\kappa + 2). \quad (2.89)$$

L'écart quadratique du nombre de bosons par site est non nul en champ moyen, ce qui traduit le respect de la contrainte 2.7 seulement en moyenne. L'état fondamental en champ moyen est la superposition d'états à différents nombres de bosons sur chaque site. Ces fluctuations du nombre de bosons par site modifient la longueur apparente du spin : si l'on choisit $\kappa = 2S$, on obtient $\langle \mathbf{S}_{i\mathbf{x}}^2 \rangle_{MF} = 3/2 S(S+1) =$ au lieu de $S(S+1)$ pour un état de spin réel.

Dans le cas où l'on n'a pas la symétrie par rotation des spins, ces équations sont modifiées (on en verra un exemple dans le cas d'une interaction Dzyaloshinskii-Moriya, Sec.4).

Pour avoir une idée de la répartition des valeurs du nombre de bosons par site, on prend le fondamental en champ moyen du lien AF (voir Sec.2.5). La valeur moyenne du projecteur P_n sur le sous-espace à n bosons sur le site 1 est

$$\langle \phi_{MF} | P_n | \phi_{MF} \rangle = (n+1) \frac{S^n}{(S+1)^{n+2}}. \quad (2.90)$$

Elle est représentée pour plusieurs valeurs de κ Fig.2.1. On y voit non seulement que l'écart quadratique est grand, mais aussi que tous les moments d'ordres supérieurs le sont.

3 Des bosons de Schwinger aux états de Néel semi-classiques

On a vu que pour respecter la contrainte du nombre de bosons par site, on devait ajuster les potentiels chimiques en chaque site. Mais dans certaines situations, c'est impossible : en maximisant le nombre de bosons dans le vide des bosons de Bogoliubov (le fondamental de champ moyen), on atteint la limite des λ_i , pour laquelle l'une des valeurs propres de la matrice M du Hamiltonien vaut 0. C'est ce qui se produit pour le lien F (Sec.2.5). Dans ce cas, on peut remplir le mode d'énergie nulle en choisissant un état cohérent qui vérifie la contrainte. Cet état brise la symétrie par rotation globale des spins : il possède une aimantation.

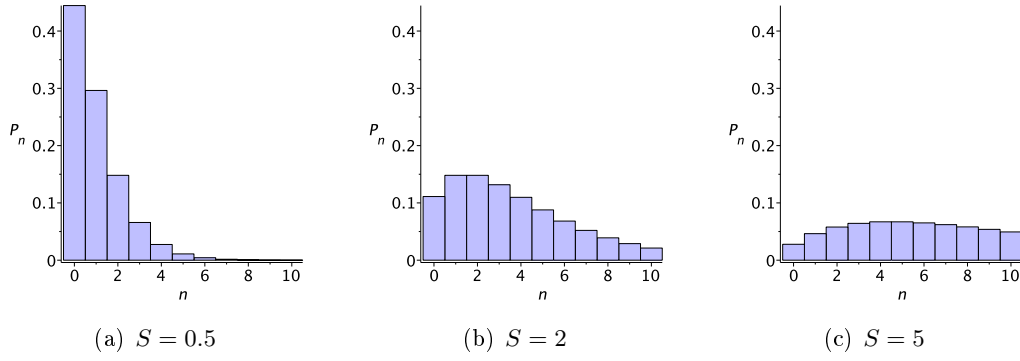


FIG. 2.1 – Valeur moyenne de P_n , le projecteur sur le sous-espace à n bosons sur le site numéro 1, pour l'état fondamental de champ moyen du lien AF, avec $\kappa = 2S$ (Eq.2.90).

Sur des réseaux périodiques, il arrive que l'on puisse vérifier la contrainte pour toute taille finie du réseau, mais plus à la limite thermodynamique $N_s \rightarrow \infty$ si κ est supérieur à un nombre critique κ_c auquel on associe un spin critique $S_c = \kappa/2$. Un exemple simple où cette situation se rencontre est le cas où tous les sites du réseau sont équivalents et où les interactions sont AF, comme nous le verrons en Sec.3.1. Nous allons ensuite montrer en Sec.3.2 que l'on peut alors choisir comme état fondamental à la limite thermodynamique un état cohérent possédant une aimantation non nulle. L'état fondamental est alors dit *condensé*. Enfin, des exemples de condensation et de détermination du paramètre d'ordre émergeant seront donnés en Sec.3.3.

3.1 Possibilité de condensation à la limite thermodynamique

Dans cette section, on prend des Ansätze sans B_{ij} , avec uniquement des paramètres A_{ij} (interactions toutes AF), tels que tous les sites soient équivalents dans le GS, donc, où tous les potentiels chimiques λ_i sont identiques. On se place sur un réseau à N_s sites. L'énergie du GS est notée E_0 . On cherche à montrer que pour tout κ , ces hypothèses impliquent l'existence d'un λ tel que la contrainte soit vérifiée dans le vide des bosons de Bogoliubov, ce qui équivaut à prouver l'existence d'un λ annulant $\partial E_0 / \partial \lambda$.

La matrice M de l'équation 2.38 a la forme particulière :

$$M = \begin{pmatrix} -L & -\mathcal{A} \\ \mathcal{A}^* & -L \end{pmatrix}, \quad (2.91)$$

ce qui nous permet de trouver les valeurs propres de JM donc, les énergies propres :

$$\omega_i = \sqrt{\lambda^2 - l_i^2}, \quad (2.92)$$

avec l_i^2 , la i ème valeur propre de la matrice $\mathcal{A}^\dagger \mathcal{A}$.

Démonstration : Soit $\mathbf{v} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)^t$ un vecteur propre de JM pour la valeur propre α . On vérifie que $\mathbf{v}_1$ est vecteur propre de $\mathcal{A}^\dagger \mathcal{A}$ pour la valeur propre $\lambda^2 - \alpha^2$. $\square$

Alors, d'après les équations 2.61 et 2.62 page 72

$$\frac{\partial E_0}{\partial \lambda} = \sum_{i=1}^{N_s} \frac{\lambda}{\sqrt{\lambda^2 - l_i^2}} + (\kappa + 1)N_s. \quad (2.93)$$

L'intervalle de λ sur lequel le Hamiltonien possède un fondamental unique (pas d'énergie propre nulle ou négative) est $] -\infty, -\max_i(|l_i|)]$. La fonction $\partial E_0 / \partial \lambda$ y est continue et

parcourt l'intervalle $]-\infty, 2SN_s]$. D'après le théorème des valeurs intermédiaires, il existe donc un λ pour lequel cette dérivée partielle s'annule : la symétrie par rotation des spins n'est jamais brisée à taille finie. Par contre, elle peut l'être à la limite thermodynamique d'un système périodique lorsque $\lambda \rightarrow -\max_i(|l_i|)$.

On reprend le système précédent, avec comme hypothèse supplémentaire qu'il est périodique, ce qui permet de passer dans l'espace réciproque. Les $\omega_{i\mathbf{q}}$, $\mathcal{A}_{\mathbf{q}}$ et $l_{i\mathbf{q}}$ ont maintenant en indice supplémentaire un vecteur d'onde $\mathbf{q}$ (l'indice i ne va plus que de 1 à m , le nombre de sites par maille). Les $l_{i\mathbf{q}}$ sont triés par ordre croissant ($l_{1\mathbf{q}} \leq \dots \leq l_{m\mathbf{q}}$). Le nombre total de bosons dans le GS est la somme du nombre de bosons dans chacun des modes : $\sum_{i\mathbf{x}} \langle n_{i\mathbf{x}} \rangle_{MF} = \sum_{i\mathbf{q}} \langle n_{i\mathbf{q}} \rangle_{MF}$. A taille finie, on sait que cette quantité vaut κN_s . Le nombre de bosons dans un mode $i\mathbf{q}$ est défini comme

$$\langle n_{i\mathbf{q}} \rangle_{MF} = \langle (a_{i\mathbf{q}})^\dagger a_{i\mathbf{q}} + (b_{i-\mathbf{q}})^\dagger b_{i-\mathbf{q}} \rangle_{MF}. \quad (2.94)$$

Il se calcule grâce à la dérivée de l'énergie par rapport à λ , ou grâce à la matrice de passage $P_{\mathbf{q}}$:

$$\begin{aligned} \langle n_{i\mathbf{q}} \rangle_{MF} &= -1 - \frac{\lambda}{\sqrt{\lambda^2 - l_{i\mathbf{q}}^2}} \\ &= \sum_{l=1}^{2m} |P_{\mathbf{q}il}|^2. \end{aligned} \quad (2.95)$$

Faisons tendre N_s vers l'infini dans l'égalité suivante :

$$\kappa = \frac{1}{N_s} \sum_{i\mathbf{q}} \left(-1 - \frac{\lambda}{\sqrt{\lambda^2 - l_{i\mathbf{q}}^2}} \right). \quad (2.96)$$

Si aucun des termes de la somme ne tend vers l'infini, la somme va converger vers une intégrale égale à κ . C'est ce qui se produit pour κ petit. Par contre, au dessus d'un κ critique, noté κ_c (les $l_{i\mathbf{q}}$ et les A_{ij} dépendent de κ), certains termes divergent. Il faut alors les sortir de la somme. Supposons qu'il n'y en ait qu'un : celui du mode $m\mathbf{q}_0$ (la généralisation à plus de modes est simple). Un tel mode est appelé mode *mou*. Alors,

$$\kappa = \frac{1}{4\pi^2} \int d\mathbf{q} \left(-1 - \frac{\lambda}{\sqrt{\lambda^2 - l_i(\mathbf{q})^2}} \right) + \lim_{N_s \rightarrow \infty} \frac{1}{N_s} \left(-1 - \frac{\lambda}{\sqrt{\lambda^2 - l_{m\mathbf{q}_0}^2}} \right). \quad (2.97)$$

La contribution d'un mode non mou au remplissage du réseau est en $\mathcal{O}(1/N_s)$, alors que celle du mode mou est en $\mathcal{O}(1)$: il contient une fraction macroscopique du nombre de bosons total. On dit qu'il y a *condensation* dans ce mode à la limite thermodynamique. On extrait de l'équation précédente la fraction condensée x (supposée non nulle) en identifiant le terme de droite à κx .

De ces équations, on peut déduire les comportements de certaines quantités en fonction de la taille du réseau s'il y a condensation. Par exemple, celui du gap de boson : $g_b = \mathcal{O}\left(\frac{1}{N_s}\right)$ et des coefficients du mode mou dans la matrice de passage : $P_{\mathbf{q}_0 ml} = \mathcal{O}(\sqrt{N_s})$. Ces comportements seront très importants lors de l'étude des facteurs de structure en taille finie : ils permettront d'établir des effets de taille différents selon la phase dans laquelle on se trouvera.

3.2 Brisure de symétrie et états cohérents

On vient de voir que certains coefficients des matrices de passage divergent lorsque la taille du système tend vers l'infini : à la limite thermodynamique, la transformation de Bogoliubov n'est plus définie et il n'existe plus de base de bosons de Bogoliubov. On ne peut donc plus définir le vide de ces bosons. Nous allons voir comment résoudre ce problème.

Pour pouvoir continuer l'analyse de la condensation et montrer qu'on peut prendre pour état fondamental à la limite thermodynamique un état cohérent, on se place dans un cas encore plus particulier qu'avant : on suppose tous les A_{ij} réels. De plus, on suppose la symétrie par rotation globale des spins autour d'un axe Oz respectée. Alors, la matrice de passage de l'impulsion $\mathbf{q}_0$ peut se mettre sous la forme

$$P_{\mathbf{q}_0} = \begin{pmatrix} U_{\mathbf{q}_0} & -V_{\mathbf{q}_0} \\ V_{\mathbf{q}_0} & U_{\mathbf{q}_0} \end{pmatrix}. \quad (2.98)$$

Nous allons chercher un état respectant la contrainte, d'énergie minimale. Soit $(\mathbf{u}, \mathbf{v})^t$ la colonne du mode propre de la matrice de passage $P_{\mathbf{q}_0}$ pour l'énergie ω (non dégénérée). Le système 2.58 équivaut à :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^* \cdot \mathbf{u} &= 1 + \mathbf{v}^* \cdot \mathbf{v} \\ -\mathbf{u}^* \cdot \mathbf{v} &= \mathbf{v}^* \cdot \mathbf{u} \\ (\omega + \lambda) \mathbf{v} &= \mathcal{A}_{\mathbf{q}_0} \cdot \mathbf{u} \\ (\omega - \lambda) \mathbf{u} &= \mathcal{A}_{\mathbf{q}_0} \cdot \mathbf{v}. \end{aligned}$$

Les deux dernières équations conduisent à écrire que $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ sont proportionnels : ce sont deux vecteurs propres de $\mathcal{A}_{\mathbf{q}_0}^2$ pour la même valeur propre (on suppose cette valeur propre non dégénérée). A partir de la deuxième équation, on obtient que le coefficient de proportionnalité est imaginaire pur $\mathbf{u} = i\gamma\mathbf{v}$, puis,

$$\begin{cases} |\mathbf{v}|^2 = -\frac{1+\omega/\lambda}{2\omega/\lambda} \\ \mathbf{u} = i\gamma\mathbf{v} = \pm i\sqrt{\frac{1-\omega/\lambda}{1+\omega/\lambda}}\mathbf{v} \end{cases} \quad (2.99)$$

On s'intéresse aux deux opérateurs diagonaux $\tilde{a}$ et $\tilde{b}^\dagger$ d'énergie propre ω , dont on dénote les colonnes associées $(i\gamma\mathbf{v}, \mathbf{v})^t$ et $(\mathbf{v}, -i\gamma\mathbf{v})^t$, où $i\gamma$ est le coefficient de proportionnalité imaginaire pur donné précédemment. La partie du Hamiltonien concernant ces opérateurs est

$$\omega(\tilde{a}^\dagger\tilde{a} + \tilde{b}\tilde{b}^\dagger). \quad (2.100)$$

La para-unitarité de P nous donne facilement son inverse et indique que

$$\begin{pmatrix} \tilde{a} \\ \tilde{b}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}^\dagger(-i\gamma\mathbf{a} - \mathbf{b}^\dagger) \\ \mathbf{v}^\dagger(-\mathbf{a} + i\gamma\mathbf{b}^\dagger) \end{pmatrix}, \quad (2.101)$$

où $\mathbf{a}$ et $\mathbf{b}^\dagger$ sont des vecteurs d'opérateurs de l'impulsion considérée (autant de coefficients que de sites dans la maille).

On suppose que la contrainte sur le nombre moyen de bosons par site peut être vérifiée à la limite thermodynamique avec éventuellement un condensat uniquement dans ces deux modes (dans le cas où plus de modes condensent, la contrainte concerne tous les modes à la fois). En utilisant l'orthogonalité des colonnes de la matrice $V_{\mathbf{q}_0}$, on sépare les contributions de chaque mode au nombre de bosons total, ce qui laisse pour les deux modes qui nous intéressent :

$$\frac{1}{|\mathbf{v}|^2}(\mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{v})(\mathbf{v}^\dagger \cdot \mathbf{a}) + \frac{1}{|\mathbf{v}|^2}(\mathbf{v}^\dagger \cdot \mathbf{b}^\dagger)(\mathbf{b} \cdot \mathbf{v}) = n, \quad (2.102)$$

où n est le nombre de bosons dont on a besoin dans les deux modes considérés pour satisfaire la contrainte globale.

Soient $k = \frac{\gamma-1}{\gamma+1}$, $X = \frac{\mathbf{v}^\dagger}{\sqrt{2}|\mathbf{v}|}(\mathbf{a} + i\mathbf{b}^\dagger)$, $P = (i\mathbf{a}^\dagger - \mathbf{b})\frac{\mathbf{v}}{\sqrt{2}|\mathbf{v}|}$, on peut réécrire le Hamiltonien et la contrainte exactement comme :

$$H = 2\frac{\omega}{k} \left(PP^\dagger + k^2 X^\dagger X \right). \quad (2.103)$$

$$n = PP^\dagger + X^\dagger X \quad (2.104)$$

(on a utilisé les expressions de γ et de $|\mathbf{v}|^2$ pour simplifier). De plus, les opérateurs X et P sont tels que

$$[X, X^\dagger] = 0 \quad [P, P^\dagger] = 0 \quad [X, P] = i \quad [X, P^\dagger] = 0.$$

En remarquant la ressemblance du Hamiltonien 2.103 avec celui d'un oscillateur harmonique de pulsation k , on est tenté de considérer les opérateurs bosoniques suivants :

$$\begin{cases} d_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(P - iX^\dagger) = -\frac{\mathbf{b}\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|} \\ d_2^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(P + iX^\dagger) = \frac{i\mathbf{a}^\dagger\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|} \end{cases} \quad (2.105)$$

qui nous permettent de réécrire les équations précédentes comme

$$H = \frac{\omega}{k} \left((d_1 + d_2^\dagger)(d_1^\dagger + d_2) + k^2(d_1 - d_2^\dagger)(d_1^\dagger - d_2) \right). \quad (2.106)$$

$$n = 2d_1^\dagger d_1 + 2d_2^\dagger d_2 \quad (2.107)$$

Si l'on considère l'énergie d'un état cohérent des bosons d_1 et d_2 , $|\phi\rangle = e^{z_1 d_1^\dagger + z_2 d_2^\dagger} |0\rangle$, on peut satisfaire la contrainte en choisissant $2|z_1|^2 + 2|z_2|^2 = n$. L'énergie de l'état cohérent est

$$E_{coh} = \frac{\omega}{k} \left(1 + |z_1 + z_2^*|^2 + k^2(1 + |z_1 - z_2^*|^2) \right). \quad (2.108)$$

S'il y a condensation à la limite thermodynamique, $\omega = \frac{\alpha}{N_s} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N_s^2}\right)$: le gap tend vers 0 lorsque la taille du réseau augmente. Alors, γ , défini en 2.99, tend vers 1 et $k = \frac{\alpha}{2N_s} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N_s^2}\right)$ tend vers 0 (le Hamiltonien 2.103 devient celui d'une particule libre de masse $1/8$). Le nombre de bosons dans les deux modes devient macroscopique : $n = xN_s + \mathcal{O}(1)$ (x est la fraction condensée).⁸ On minimise l'énergie de l'état cohérent en choisissant $z_1 = -z_2^*$:

$$E_{coh} = \frac{\omega}{k} \left(1 + k^2 \left(1 + \frac{n}{2} \right) \right). \quad (2.109)$$

$$\lim_{N_s \rightarrow \infty} E_{coh} = 2. \quad (2.110)$$

Le nombre macroscopique n de bosons à placer a donc été mis dans ces deux modes, pour une énergie de 2, alors que l'énergie totale du système est en $\mathcal{O}(N_s)$. A la limite thermodynamique, la condensation ne coûte rien et permet l'ajustement de la contrainte. Pour condenser, il faut fixer la phase de z_1 , ce qui brise l'invariance par rotation des spins autour de Oz . Ainsi, l'état condensé possède une aimantation. Dans le cas que l'on vient de détailler, on n'a qu'un seul degré de liberté. Mais si l'on avait eu plusieurs modes mous, on aurait pu en avoir plus. Par exemple, pour un système invariant par rotation globale des spins, on aurait eu au moins deux degrés de liberté permettant de fixer librement la direction du spin sur un site.

⁸On a supposé $\gamma > 0$. Dans le cas contraire, c'est k qui est en $\mathcal{O}(N_s)$ et les rôles de P et X sont inversés, mais cela ne change rien aux calculs.

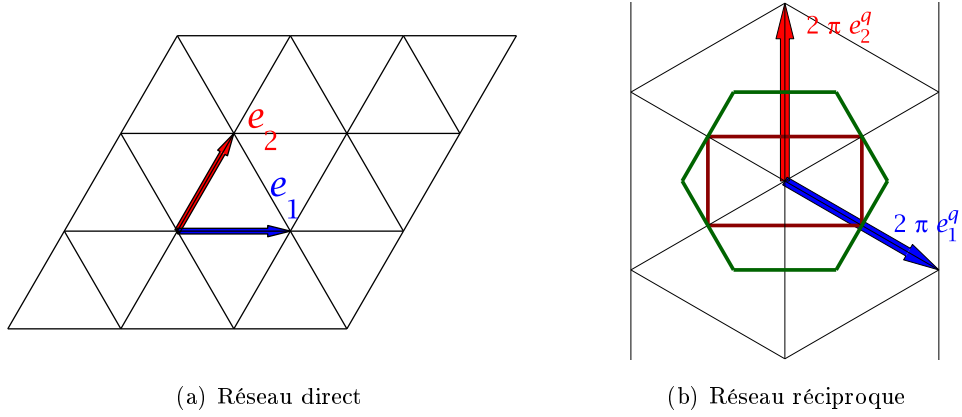


FIG. 2.2 – Vecteurs de base des réseaux direct et réciproque du réseau triangulaire. La ZdB est l'hexagone vert pour l'Ansatz (0), le rectangle rouge pour l'Ansatz (π).

Nous avons mis en évidence sur des exemples simples deux comportements possibles à la limite thermodynamique. Soit le gap de bosons tend vers une constante non nulle ($\kappa < \kappa_c$), ce qui donne un état limite qui ne brise pas l'invariance par rotation globale des spins et peut être un liquide de spin topologique (TSL) si les autres symétries du Hamiltonien sont elles aussi respectées. Les magnons y sont gappés. Soit le gap tend vers 0 en $\mathcal{O}(1/N_s)$ ($\kappa > \kappa_c$). Alors, l'état limite est un état condensé, ordonné à longue portée (LRO) avec une aimantation sur site non nulle. Des modes de Goldstone (les magnons d'énergie nulle) existent.

La possibilité d'obtenir ces deux phases complètement différentes est un gros intérêt de la SBMFT. Dans la section suivante, nous allons voir des exemples de LRO, puis, nous verrons les caractéristiques de chacune des phases sur des observables comme les facteurs de structure.

3.3 Exemple du modèle AF sur le réseau triangulaire

Nous allons voir dans cette section deux exemples de condensation sur le réseau triangulaire avec échange premiers voisins AF, avec les Ansätze nommés (0) et (π) selon leur flux autour d'un losange élémentaire (définition du flux page Sec.1.4 du Chap.2). Les A_{ij} y sont tous réels et de même module A et leur signe est donné Fig.2.3(a) et 2.4(a) où les flèches indiquent les liens orientés sur lesquels ils sont positifs. On utilise les repères du réseau direct et réciproque décrits Fig.2.2. Les vecteurs de base du réseau réciproque $\mathbf{e}_i^q$ sont tels que $\mathbf{e}_i^q \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}$. Des points équivalents du réseau réciproque sont séparés de 2π fois une combinaison linéaire entière des $\mathbf{e}_i^q$. Le premier exemple (flux (0)) est détaillé pour des raisons pédagogiques et est très simple : on retrouve une aimantation à trois sous-réseau avec les directions de l'ordre classique fondamental. Il a déjà été étudié par Sachdev [92]. L'Ansatz (π) a été découvert par Wang et Vishwanath [108], mais ils n'ont pas détaillé l'aimantation du condensat obtenu, ce que nous ferons. La condensation est très différente de la précédente : elle brise non seulement la symétrie de rotation des spins, mais aussi les symétries du réseau : l'état obtenu n'est pas régulier au sens défini dans la Sec.1 du Chap.1.

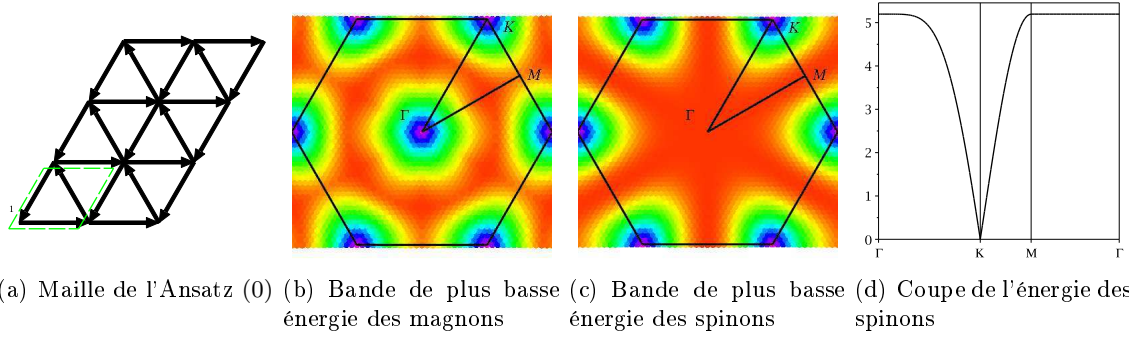


FIG. 2.3 – Ansatz (0) sur le réseau triangulaire pour $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$. Le magenta est l'énergie la plus basse, le rouge, la plus haute.

Ansatz (0)

La maille de l'Ansatz possède un seul site (Fig.2.3(a)). Pour $\kappa_c = 0.34$ [92], des spinons gapless à la limite thermodynamique apparaissent aux coins de zone (pour ce choix de jauge), donc en deux points inéquivalents de la zone de Brillouin notés $\mathbf{K}$ et $-\mathbf{K}$. La fraction condensée est $x = 1 - \kappa_c/\kappa$ et le λ critique est $\lambda_c = -3\sqrt{3}A$ (c'est le λ pour lequel au moins une énergie propre vaut 0 et toutes les autres sont positives ou nulles).

Le spectre des spinons et des magnons est représenté Fig.2.3 pour $\lambda = \lambda_c$. On y voit l'énergie de la bande de spinons (unique car un site par maille, mais doublement dégénérée : les $\tilde{a}$ ont la même énergie que les $\tilde{b}$) sur toute la zone de Brillouin (ZdB), ainsi qu'une coupe sur un chemin de cette zone. L'énergie minimale des magnons en chaque point de la ZdB est représentée en Fig. 2.3(b). Elle atteint son minimum aux coins et au centre de la ZdB.

La matrice du Hamiltonien en $\mathbf{K} = (\frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3})$ (dans la base $\mathbf{e}_i^q$) est

$$M_{\mathbf{K}} = 3\sqrt{3} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \quad (2.111)$$

où l'on a pris $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$. Cette matrice possède un unique vecteur propre de valeur propre nulle, de coordonnées

$$\mathbf{v}_{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.112)$$

On retrouve le facteur $\pm i$ entre les deux vecteurs $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ de la section précédente. On a la matrice et le vecteur complexe conjugué pour le vecteur d'onde $-\mathbf{K}$.

Pour obtenir les $\langle a_{\mathbf{x}} \rangle$ et $\langle b_{\mathbf{x}} \rangle$ d'un état condensé sur un site $\mathbf{x}$, on utilise l'égalité suivante

$$\begin{pmatrix} \langle a_{\mathbf{x}} \rangle \\ \langle b_{\mathbf{x}} \rangle^* \end{pmatrix} = c_{\mathbf{K}} \mathbf{v}_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{x}} + c_{-\mathbf{K}} \mathbf{v}_{-\mathbf{K}} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{x}}, \quad (2.113)$$

où $c_{\mathbf{K}}, c_{-\mathbf{K}} \in \mathbb{C}$. De cette égalité, on déduit

$$\begin{pmatrix} \langle a_{\mathbf{x}} \rangle \\ \langle b_{\mathbf{x}} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ic_{\mathbf{K}} & -ic_{-\mathbf{K}} \\ c_{-\mathbf{K}}^* & c_{\mathbf{K}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{K}\mathbf{x}} \\ e^{-i\mathbf{K}\mathbf{x}} \end{pmatrix} \quad (2.114)$$

Le nombre de bosons dû au condensat sur chaque site $\mathbf{x}$ est $|\langle a_{\mathbf{x}} \rangle|^2 + |\langle b_{\mathbf{x}} \rangle|^2$ qui, compte tenu de la forme particulière des vecteurs propres, est égal à $2|c_{\mathbf{K}}|^2 + 2|c_{-\mathbf{K}}|^2$. Ce nombre doit être égal à la fraction condensée x . L'orientation du spin sur un site est donnée par

$$\mathbf{S}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{2} (\langle a_{\mathbf{x}}^* \rangle \langle b_{\mathbf{x}}^* \rangle) \vec{\sigma} \begin{pmatrix} \langle a_{\mathbf{x}} \rangle \\ \langle b_{\mathbf{x}} \rangle \end{pmatrix}. \quad (2.115)$$

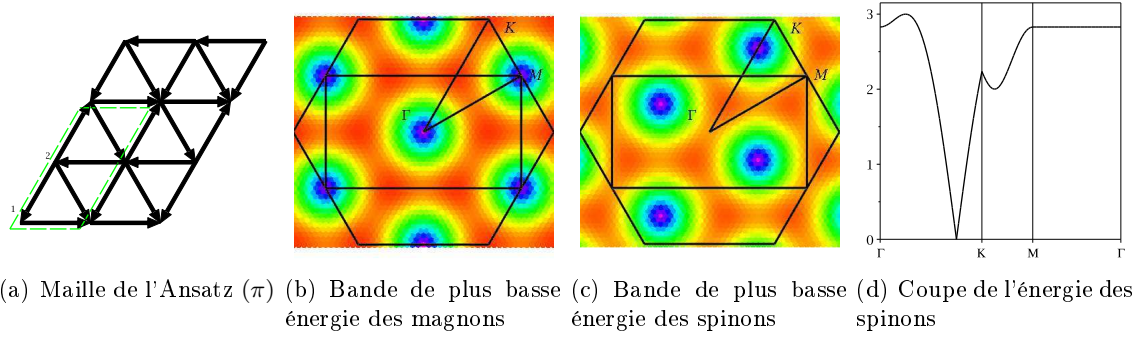


FIG. 2.4 – Ansatz (π) sur le réseau triangulaire pour $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$.

Faire une rotation est équivalent à multiplier la matrice des complexes de l'équation (2.114) par une matrice R de $SU(2)$, ce qui nous donne de nouveaux coefficients $c'_{\mathbf{K}}$ et $c'_{-\mathbf{K}}$. Ces nouveaux coefficients doivent vérifier

$$\begin{pmatrix} ic'_{\mathbf{K}} & -ic'_{-\mathbf{K}} \\ c'^*_{-\mathbf{K}} & c'^*_{\mathbf{K}} \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} ic_{\mathbf{K}} & -ic_{-\mathbf{K}} \\ c^*_{-\mathbf{K}} & c^*_{\mathbf{K}} \end{pmatrix}. \quad (2.116)$$

On a donc quatre équations pour seulement deux inconnues. Si elles ont toujours une solution, c'est dû à la forme particulière des vecteurs propres de $M_{\mathbf{K}}$ et $M_{-\mathbf{K}}$:

$$(\mathbf{v}_{\pm\mathbf{K}})_j = \pm i(\mathbf{v}_{\pm\mathbf{K}})_{j+m} \quad (2.117)$$

(cette propriété est générale dès que le spinon gapless est unique, même pour plusieurs sites dans la maille. Par contre, dans le cas de plusieurs spinons gapless pour un seul vecteur d'onde, c'est plus compliqué, voir le cas suivant avec le flux π).

On peut donc fixer $c_{\mathbf{K}} = \sqrt{x/2}$ et $c_{-\mathbf{K}} = 0$ (trois angles d'Euler fixés : 3 paramètres, le nombre de bosons : 1 paramètre), c'est à dire privilégier une direction de l'espace des spins, ce qui laisse l'aimantation suivante :

$$\mathbf{S}_{\mathbf{x}} = \sqrt{\frac{x}{2}} \begin{pmatrix} -\sin(2\mathbf{K}\mathbf{x}) \\ -\cos(2\mathbf{K}\mathbf{x}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.118)$$

c'est à dire l'aimantation de l'état coplanaire à 120° (Fig.1.6(c)).

Ansatz (π)

La maille de l'Ansatz possède deux sites (Fig.2.4(a)). La bande d'énergie des spinons gapless est quatre fois dégénérée (deux sites par maille, multiplié par deux bosons par mode). Pour $\kappa_c = 0.75$ [108], des spinons gapless à la limite thermodynamique apparaissent aux points $\mathbf{Q} = (\frac{\pi}{2}, 0)$ et $-\mathbf{Q}$ dans la zone de Brillouin rectangulaire du réseau (dans la base $\mathbf{e}_i^q$). Le λ critique est $\lambda_c = -2\sqrt{3}A$. L'énergie des spinons est représentée Fig.2.4(c) et 2.4(d), celle des magnons, en Fig. 2.4(b). Les magnons mous ont des vecteurs d'onde aux coins et au centre de la ZdB rectangulaire (soit au centre et aux milieux de côtés de la ZdB du cristal). La matrice du Hamiltonien en $\mathbf{Q}$ est

$$M_{\mathbf{Q}} = 2 \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & -i & 1-i \\ 0 & \sqrt{3} & -1-i & i \\ i & -1+i & \sqrt{3} & 0 \\ 1+i & -1 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (2.119)$$

où l'on a pris $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$. Cette matrice possède deux vecteurs propres de valeurs propres nulles, de coordonnées

$$\mathbf{u}_\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \frac{1+\sqrt{3}}{\sqrt{2}} e^{3i\pi/4} \\ i \\ \frac{1+\sqrt{3}}{\sqrt{2}} e^{i\pi/4} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_{1\mathbf{Q}} \\ -i\mathbf{u}_{1\mathbf{Q}} \end{pmatrix} \quad \mathbf{v}_\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}-1}{\sqrt{2}} e^{3i\pi/4} \\ -i \\ \frac{\sqrt{3}-1}{\sqrt{2}} e^{-3i\pi/4} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_{1\mathbf{Q}} \\ i\mathbf{v}_{1\mathbf{Q}} \end{pmatrix}.$$

On a la matrice et les vecteurs complexes conjugués pour le vecteur d'onde $-\mathbf{Q}$.

En faisant condenser dans les 4 modes mous, avec des amplitudes complexes $c_{i=1\dots 4}$, on obtient :

$$\begin{pmatrix} \langle a_{1\mathbf{x}} \rangle \\ \langle a_{2\mathbf{x}} \rangle \\ \langle b_{1\mathbf{x}} \rangle \\ \langle b_{2\mathbf{x}} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \mathbf{u}_{1\mathbf{Q}} + c_2 \mathbf{v}_{1\mathbf{Q}} & c_3 \mathbf{u}_{1\mathbf{Q}}^* + c_4 \mathbf{v}_{1\mathbf{Q}}^* \\ -ic_3^* \mathbf{u}_{1\mathbf{Q}} + ic_4^* \mathbf{v}_{1\mathbf{Q}} & ic_1^* \mathbf{u}_{1\mathbf{Q}} - ic_2^* \mathbf{v}_{1\mathbf{Q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{x}} \\ e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{x}} \end{pmatrix}. \quad (2.120)$$

Les équations obligeant les nombres de bosons en chaque site à être égaux se résolvent exactement et leur solution est

$$\begin{cases} c_1 = a \sin \alpha e^{i\theta_1} (1 - \sqrt{3} + \sqrt{2} e^{i\theta_2}) \\ c_2 = a \sin \alpha e^{i\theta_1} (1 + \sqrt{3} - \sqrt{2} e^{i\theta_2}) \\ c_3 = -a \cos \alpha e^{i\theta_3} (1 - \sqrt{3} + \sqrt{2} e^{-i\theta_2}) \\ c_4 = a \cos \alpha e^{i\theta_3} (1 + \sqrt{3} - \sqrt{2} e^{-i\theta_2}), \end{cases} \quad (2.121)$$

où a , α , θ_1 , θ_2 et θ_3 sont des réels. Par une rotation globale des spins, on peut fixer $\theta_1 = -\theta_2/2$, $\alpha = \pi/2$, et $\theta_3 = 0$. Il ne reste comme paramètre libre que θ_2 . Le calcul des directions des spins nous donne quatre sous-réseaux. Les directions des spins pour toutes les valeurs de θ_2 se regroupent sur quatre cercles concentriques dont les normales pointent vers les sommets d'un tétraèdre (Fig.2.5(a)). Les cosinus des angles relatifs entre les spins sont indiqués Fig.2.5(b). On y remarque que les spins ne pointent jamais vers les sommets d'un tétraèdre (les trois cosinus de la Fig.2.5(b) seraient identiques) et que les spins de deux sous-réseaux différents ne sont jamais dans la même direction (l'un des cosinus prendrait la valeur 1). Le point commun entre toutes ces orientations de spin est leur énergie classique : la somme des trois cosinus de la figure 2.5(b) est la constante -1 .

Cette situation où la condensation nous donne un continuum d'états classiques possibles non reliés par une rotation globale des spins est assez étrange. Nous verrons par la suite que cet Ansatz a été sélectionné pour des raisons de symétrie, mais que rien ne présuppose qu'il est énergétiquement intéressant pour le Hamiltonien choisi ici (AF premiers voisins).

Avec ces deux Ansätze, l'aimantation du condensat est non nulle à la limite thermodynamique. Mais cette aimantation ne coûte aucune énergie seulement à la limite thermodynamique. Avant, à taille finie, le GS est invariant par rotation des spins. Lors de l'ajustement numérique des paramètres de champ moyen, on se place à taille finie. Comment, à partir d'une analyse en taille finie, savoir si l'on est dans une phase LRO ou TSL ?

3.4 Analyse de taille finie de l'ordre à longue portée

Le spectre de spinons

On a vu précédemment que lorsque le système est LRO, le gap de bosons est en $1/N_s$ et les coefficients de la matrice de passage sont en $\sqrt{N_s}$ dans les colonnes des modes mous. Prenons maintenant le réseau kagome, avec l'Ansatz $(\pi, 0)$ (flux π autour d'un hexagone, flux 0 autour d'un losange à 8 liens), qui donne l'ordre à longue portée $\mathbf{q} = 0$ (Fig.1.7(b)) à

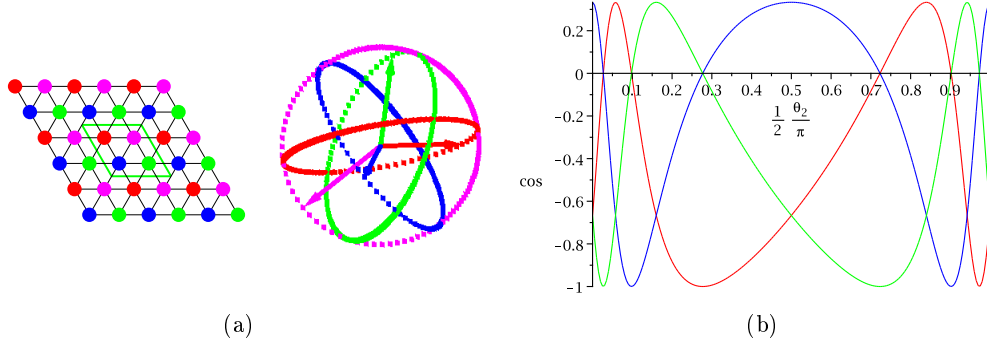
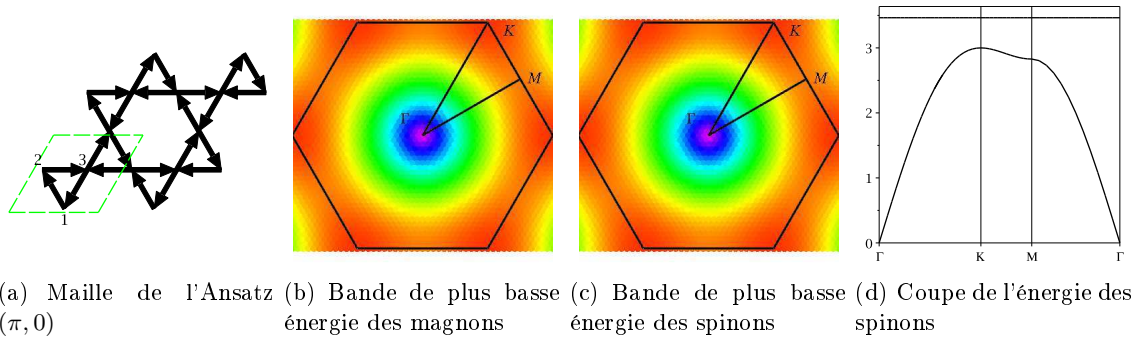


FIG. 2.5 – Aimantation de l'Ansatz (π) sur le réseau triangulaire pour $\kappa > \kappa_c$. (a) Direction des spins des quatre sous-réseaux lorsque θ_2 parcourt $[0, 2\pi[$. (b) Cosinus des angles d'un spin avec ceux des trois autres sous-réseaux en fonction de θ_2 . Ces cosinus sont invariants par translation du lien concerné selon un vecteur du réseau de Bravais du réseau triangulaire. On connaît donc les angles entre chaque paire de spins.



(a) Maille de l'Ansatz $(\pi, 0)$ (b) Bande de plus basse énergie des magnons (c) Bande de plus basse énergie des spinons (d) Coupe de l'énergie des spinons

FIG. 2.6 – Ansatz $(\pi, 0)$ sur le réseau kagome pour $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$.

la limite thermodynamique pour $\kappa_c = 0.5$ (calculs en Ann.C.5). L'interaction est toujours AF premiers voisins. Cet Ansatz et ses spectres de spinon et de magnon à la condensation sont décrits Fig.2.6. Le réseau kagome est plus intéressant que le triangulaire pour ce qui nous intéresse car il possède plusieurs sites dans sa maille élémentaires ($m = 3$), ce qui va rendre les remarques qui arrivent plus générales.

Sur un réseau assez grand, les spectres de spinons et de magnons vont être proches de ceux de la limite thermodynamique. La matrice d'un mode $\mathbf{q}$ du Hamiltonien est de taille $2m$, 6 ici. Une fois para-diagonalisée, elle aura donc 6 énergies propres $\omega_{i\mathbf{q}}$. La symétrie $\mathbf{S} \rightarrow -\mathbf{S}$ implique que toutes les énergies vont par paires ($\tilde{a}_{\mathbf{q}}$ et $\tilde{b}_{\mathbf{q}}$). On a donc trois énergies propres doublement dégénérées qui vont former trois nappes dans la zone de Brillouin. Des coupes le long d'un chemin de la ZdB sont regroupées sur la Fig.2.7 pour plusieurs valeurs de κ . On ne voit que deux bandes : la bande inférieure est doublement dégénérée. La bande supérieure est plate et correspond au mode *weathervane* (girouette) qui est d'énergie nulle classiquement (ce sont toutes les modes de Goldstone locaux du réseau kagome AF premiers voisins), mais auxquelles les fluctuations quantiques donnent un gap (rendent massives dans le vocabulaire de la théorie des champs). La valeur minimale de l'énergie le long de la nappe inférieure est le gap de spinons. Il est atteint en $\mathbf{q} = 0$ et est quatre fois dégénéré. Pour $\kappa < \kappa_c$, le gap de spinons et de magnons est non nul, alors que pour $\kappa > \kappa_c$, il est d'autant plus proche de 0 que le système est grand. Les vecteurs d'onde des magnons mous (en magenta sur 2.6(b)) sont obtenus en additionnant les vecteurs d'onde de deux spinons mous, ce qui donne 16 magnons en $\mathbf{q} = 0$.

Les facteurs de structure

L'aimantation d'un système à taille finie est nulle en SBMFT, mais ses corrélations sont à longue portée si l'on est dans une phase LRO, comme on va le voir grâce à l'analyse des facteurs de structure. Plusieurs calculs de ces quantités ont déjà été réalisés à température non nulle, sur les réseaux carré [5] [68] et nid d'abeille [63]. Mais aucun n'a été fait sur le réseau kagome. Nous allons d'abord calculer ces quantités dans l'état fondamental, puis, voir comment distinguer les phases LRO et TSL grâce à leur évolution avec la taille du système. Enfin, nous discuterons des résultats obtenus.

Définitions Après quelques définitions, nous allons montrer que chaque facteur de structure en taille finie s'exprime en fonction des coefficients des matrices de passage $P_{\mathbf{q}}$.

$N_Q = N_s/r$ a été défini page 25 comme le nombre de vecteurs de la zone de Brillouin étendue (ZdBE). N_m est le nombre de mailles de m sites. On définit la transformée de Fourier des opérateurs de spin :

$$\mathbf{S}_{\mathbf{Q}} = \frac{1}{\sqrt{N_Q}} \sum_{\mathbf{x}, i} e^{-i\mathbf{Q}(\mathbf{x}+\mathbf{r}_i)} \mathbf{S}_{\mathbf{x}i}. \quad (2.122)$$

On se place en représentation de Heisenberg, où ce sont les opérateurs et non la fonction d'onde qui évoluent dans le temps $G(t) = e^{iHt} G e^{-iHt}$. Les corrélations en temps et en espace sont décrites dans l'espace réciproque par les facteurs de structure dynamiques $S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega)$ (avec $\alpha, \beta = x, y, z, +, -$), définis comme

$$S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle \mathbf{S}_{-\mathbf{Q}}^{\alpha}(t) \mathbf{S}_{\mathbf{Q}}^{\beta}(0) \rangle_{MF}. \quad (2.123)$$

Les facteurs de structure statiques (où à temps égaux) $S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q})$ sont reliés aux facteurs de structure dynamiques par la relation

$$S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega). \quad (2.124)$$

Les moyennes seront calculées dans l'état fondamental, c'est à dire le vide des bosons de Bogoliubov, noté $|\tilde{0}\rangle$. En insérant une relation de fermeture dans l'Eq.2.123, on arrive à l'égalité suivante valable en SBMFT

$$S^{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega) = 2\pi \sum_{|p\rangle} \langle \tilde{0} | \mathbf{S}_{-\mathbf{Q}}^{\alpha} | p \rangle \langle p | \mathbf{S}_{\mathbf{Q}}^{\beta} | \tilde{0} \rangle \delta(\omega - \omega_p), \quad (2.125)$$

où $|p\rangle$ parcourt l'ensemble des états à nombre de bosons de Bogoliubov fixés. Comme les opérateurs de spin sont quadratiques en opérateurs bosoniques, il ne pourront créer ou détruire au maximum que deux bosons. On peut donc en pratique se limiter aux états $|p\rangle$ à 0, 1 ou 2 bosons de Bogoliubov. Il ne reste donc plus qu'à calculer les produits scalaires de cette formule, ce qui donne un résultat fonction des coefficients des matrices de passage.

Exemple de calcul Nous allons détailler le calcul pour $S^{-+}(\mathbf{Q}, \omega)$.

$$S^{-+}(\mathbf{Q}, \omega) = 2\pi \sum_{|p\rangle} \left| \langle \tilde{0} | \mathbf{S}_{-\mathbf{Q}}^{-} | p \rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_p). \quad (2.126)$$

On remplace les opérateurs de spin par des opérateurs bosoniques sur site, que l'on exprime ensuite en fonction de leurs transformées de Fourier, ce qui mène à

$$S^{-+}(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{2\pi}{N_Q} \sum_{|p\rangle} \left| \sum_{i, \mathbf{q}, \mathbf{k}} \delta_{ZdB}(\mathbf{Q} + \mathbf{q} + \mathbf{k}) e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{k})\mathbf{r}_i} \langle \tilde{0} | a_{i\mathbf{q}}(b_i^{\dagger})_{\mathbf{k}} | p \rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_p),$$

où δ_{ZdB} vaut 1 si son argument ramené dans la ZdB est nul. On exprime maintenant $\langle \tilde{0} | a_{i\mathbf{q}}(b_i^{\dagger})_{\mathbf{k}} | p \rangle$ en fonction des bosons de Bogoliubov :

$$\langle \tilde{0} | a_{i\mathbf{q}}(b_i^{\dagger})_{\mathbf{k}} | p \rangle = \sum_{l, n} \langle \tilde{0} | (P_{\mathbf{q}, i, l} \tilde{a}_{l\mathbf{q}} + P_{\mathbf{q}, i, l+m} (\tilde{b}_l^{\dagger})_{\mathbf{q}}) (P_{\mathbf{k}, i+m, n} \tilde{a}_{n\mathbf{k}} + P_{\mathbf{k}, i+m, n+m} (\tilde{b}_n^{\dagger})_{\mathbf{k}}) | p \rangle.$$

Les opérateurs de création $\tilde{b}^{\dagger}$ vont annihiler $\langle \tilde{0} |$, et ceux d'annihilation ne vont pouvoir donner un terme non nul que si $|p\rangle$ est l'état comportant les deux bosons $\tilde{a}$ correspondants. La somme sur $|p\rangle$ va donc porter sur tous les états à deux bosons $\tilde{a}$:

$$\sum_{|p\rangle} |\dots | p \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_p) \rightarrow \sum_{\mathbf{q}', \mathbf{k}', l', n' \geq l'} \left| \dots \frac{\tilde{a}_{l'\mathbf{q}'}^{\dagger} \tilde{a}_{n'\mathbf{k}'}^{\dagger}}{\sqrt{\langle \tilde{0} | \tilde{a}_{n'\mathbf{k}'} \tilde{a}_{l'\mathbf{q}'} \tilde{a}_{l'\mathbf{q}'}^{\dagger} \tilde{a}_{n'\mathbf{k}'}^{\dagger} | \tilde{0} \rangle}} | \tilde{0} \rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_{l'\mathbf{q}'} - \omega_{n'\mathbf{k}'}).$$

Finalement, on obtient le facteur de structure dynamique suivant, dont on déduit le facteur de structure statique associé

$$S^{-+}(\mathbf{Q}, \omega) = \frac{2\pi}{N_Q} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, l, n \geq l} \delta(\omega - \omega_{l\mathbf{q}} - \omega_{n\mathbf{k}}) \delta_{ZdB}(\mathbf{Q} + \mathbf{q} + \mathbf{k}) \left| \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} (P_{\mathbf{q}, i, l} P_{\mathbf{k}, i+m, n} + P_{\mathbf{q}, i+m, l} P_{\mathbf{k}, i, n} (1 - (2 - \sqrt{2})\delta_{ln} \delta_{ZdB}(\mathbf{q} - \mathbf{k}))) \right|^2, \quad (2.127)$$

$$S^{-+}(\mathbf{Q}) = \frac{1}{N_Q} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{k}, l, n \geq l} \delta_{ZdB}(\mathbf{Q} + \mathbf{q} + \mathbf{k}) \left| \sum_i e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_i} (P_{\mathbf{q}, i, l} P_{\mathbf{k}, i+m, n} + P_{\mathbf{q}, i+m, l} P_{\mathbf{k}, i, n} (1 - (2 - \sqrt{2})\delta_{ln} \delta_{ZdB}(\mathbf{q} - \mathbf{k}))) \right|^2. \quad (2.128)$$

Si le Hamiltonien est invariant par rotation des spins, on a toutes les informations dans ce facteur de structure (il est égal à $2S^{xx}$, $2S^{yy}$, $2S^{zz}$ et S^{+-}).

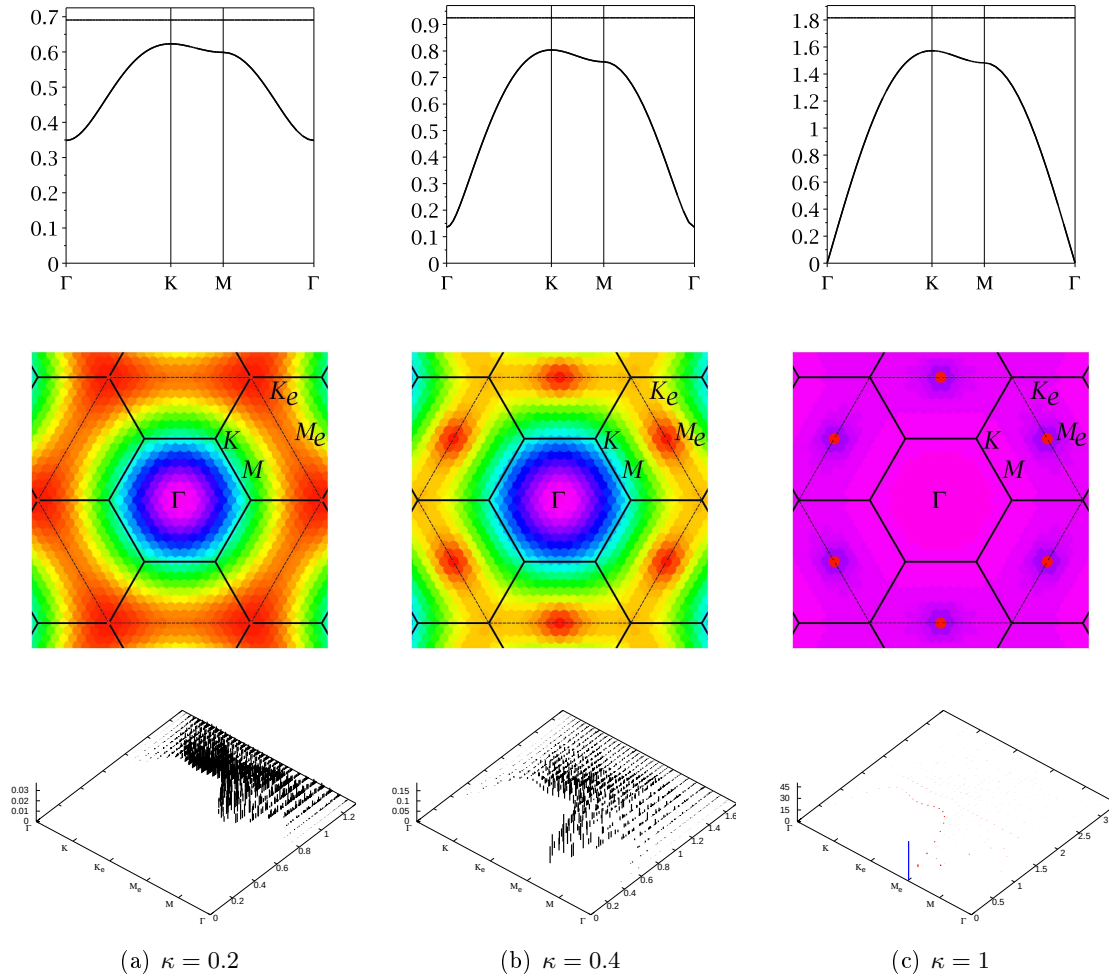


FIG. 2.7 – Spectres de spinons et facteurs de structure statique (maximum en rouge, minimum en magenta) et dynamique sur le réseau kagome pour l'Ansatz $(\pi, 0)$ pour différents κ ($\kappa_c = 0.5$) sur un réseau de taille finie.

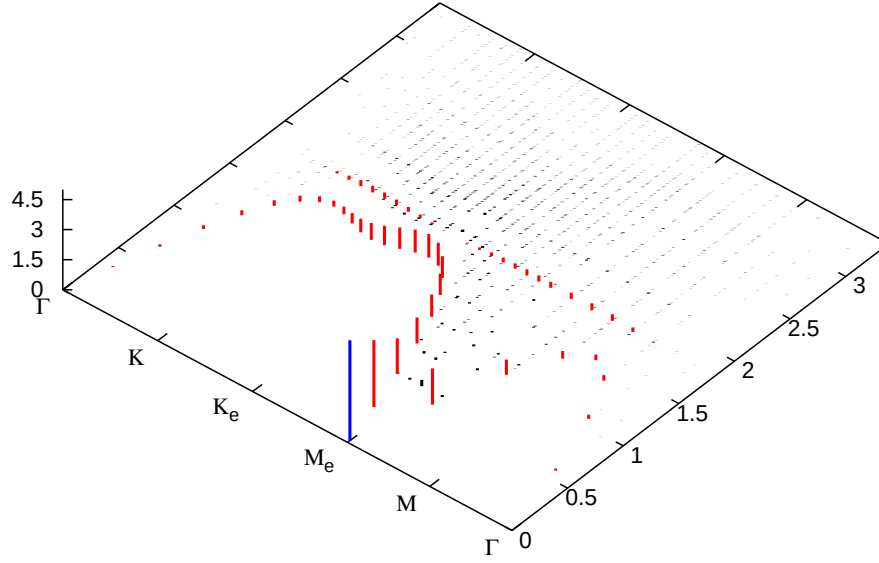


FIG. 2.8 – Zoom du facteur de structure de la phase LRO de l'Ansatz $(\pi, 0)$ sur le réseau kagome pour $\kappa = 1$. Les pics du continuum, en $1/N_s$ sont en noirs, les pics des branches de magnons sont en rouge, et le pic de Bragg est en bleu. Il est coupé par le zoom.

Comportement avec la taille du système D'abord, quelques remarques indépendantes des propriétés du modèle, que l'on peut vérifier sur le cas particulier du réseau kagome avec l'Ansatz $(\pi, 0)$ en Fig.2.7. En taille finie, les facteurs de structure sont un ensemble de pics de Diracs en un nombre fini de points $(\mathbf{Q}, \omega)$. Les $\mathbf{Q}$ sont ceux de la ZdB, et les ω sont les énergies des excitations de spin 1 (composées de deux spinons), appelées magnons, de vecteur d'onde $\mathbf{Q}$. Le bas du spectre des magnons est donc le ω minimal obtenu par addition de deux énergies de spinons. En dessous de cette énergie, le facteur de structure dynamique est nul.

Supposons que notre système est LRO et possède uniquement deux modes mous $\tilde{a}_{m\mathbf{q}_0}$ et $\tilde{b}_{m\mathbf{q}_0}$ (pour la simplicité des notations). Alors, à la limite thermodynamique, il possède une aimantation, qui doit se lire sur les facteurs de structure (Fig.2.7(c)). Le LRO se traduit sur la matrice de passage par un comportement en $\sqrt{N_s}$ des coefficients des bosons de Bogoliubov mous : $P_{\mathbf{q}_0, l, m}$ et $P_{\mathbf{q}_0, l, 2m}$, pour $l \in [0, 2m]$. D'après la forme des Eq.2.127 et 2.128, on peut avoir des termes d'ordre $1/N_s$, 1 et N_s . Comme les pics ont des ordres de grandeur très différents, il est utile de reproduire le facteur de structure dynamique Fig.2.7(c) avec des couleurs différentes pour les différents types de pics et avec un zoom : Fig.2.8.

- **le continuum** : si $(l\mathbf{q}) \neq (m\mathbf{q}_0)$ et $(n\mathbf{k}) \neq (m\mathbf{q}_0)$, alors, le terme $\mathbf{q}, \mathbf{k}, l, n$ de 2.127 et 2.128 va être en $1/N_s$. Le $|p\rangle$ dont il provient est un état comportant deux spinons massifs. Le nombre de termes de cet ordre en N_s est d'ordre N_s^2 , et la somme de leurs contributions sera donc en N_s . A la limite thermodynamique, ces pics forment un continuum allant du bas du spectre des magnons jusqu'à son haut. Ils sont dessinés en noir sur les Fig.2.7 et 2.8.
- **les branches d'ondes de spin** : si $(l\mathbf{q}) = (m\mathbf{q}_0)$ ou (exclusif) $(n\mathbf{k}) = (m\mathbf{q}_0)$, alors, le terme $\mathbf{q}, \mathbf{k}, l, n$ de 2.127 et 2.128 va être d'ordre 1 en N_s . Le $|p\rangle$ dont il provient est un état composé d'un spinon massif et d'un spinon mou. Le nombre de termes de cet ordre est d'ordre N_s , et la somme de leurs contributions sera donc

en N_s . Les points $(\mathbf{Q}, \omega)$ auxquels on peut trouver de tels pics sont uniquement les points du spectre des spinons. A la limite thermodynamique, ces pics formeront donc des nappes coïncidant avec le spectre des spinons. Les nappes comprenant le spinon gapless comprendront les modes de Goldstone associés à la brisure de symétrie. Les autres sont des modes appelés *optiques*. Ils sont dessinés en rouge sur les Fig.2.7 et 2.8.

- **les pics de Bragg** : si $(l\mathbf{q}) = (m\mathbf{q}_0)$ et $(n\mathbf{k}) = (m\mathbf{q}_0)$, alors, le terme $\mathbf{q}, \mathbf{k}, l, n$ de 2.127 et 2.128 va être d'ordre N_s . Le $|p\rangle$ dont il provient est un état composé de deux spinons mous. Le nombre de termes de cet ordre est d'ordre 1, et la somme de leurs contributions sera donc elle aussi en N_s . Les points $(\mathbf{Q}, \omega)$ auxquels on peut trouver de tels pics ont l'impulsion $\mathbf{q}_0$ et l'énergie $2\omega_{m\mathbf{q}_0}$ en $1/N_s$. Ces pics sont isolés et divergent à la limite thermodynamique. Ils sont dessinés en bleu sur les Fig.2.7 et 2.8.

La somme des valeurs de tous les pics de $S^{-+}(\mathbf{Q}, \omega)$ dans l'espace de Hilbert des spins est égale à $\frac{2}{3}N_s S(S+1)$. Si l'on fait cette somme sur les résultats de SBMFT, on constate qu'elle est égale à $N_s S(S+1)$ pour $\kappa = 2S$. Le facteur $3/2$, indépendant du spin, provient des fluctuations du nombre de bosons sur site, qui a été étudié en Sec.2.6.

Si l'état est un TSL, alors, aucun terme des matrices de passage ne diverge, et les facteurs de structure vont être un continuum à la limite thermodynamique (Fig.2.7(a) et 2.7(b)). Il n'y aura aucun pic ayant une énergie ω inférieure au gap de spin. Mais on peut voir sur le facteur de structure statique de la Fig.2.7(b) qu'il reste une cicatrice de l'ordre à longue portée lorsque l'on est proche du κ critique : les pics de Bragg ont bien sûr disparu, mais il reste une bosse à leurs emplacements, signature d'un ordre à courte portée parent du LRO. Ainsi, on a vu en Sec.1.6 du Chap..1 (page 27) le facteur de structure statique obtenu sur un échantillon poudreux de Kapellasite : il possède une bosse en $M_e/2$ pouvant correspondre à des corrélations à courte portée associées à l'ordre cuboc2 (Fig.1.7(f)).

Chapitre 3

Flux et symétries en SBMFT : classification des liquides de spins

L'objectif de ce chapitre est de classer les diverses phases liquides de spins possibles sur un réseau donné, en se concentrant tout d'abord sur la SBMFT puis en élargissant à des systèmes de spins réels. Différents liquides de spins ont des propriétés physiques invariantes par les opérations de symétries spatiales du Hamiltonien (appelées symétries du réseau), ce qui les rend difficiles à distinguer les uns des autres. En effet, une phase se caractérise habituellement par ses symétries brisées. Cependant, Wen a compris que les liquides de spins décrits par liens de valence résonnants possédaient des propriétés cachées conduisant à des familles différentes, se distinguant par leur groupes de symétries projectives [112].

Wang et Vishwanath [108] ont appliqué à la SBMFT la théorie des groupes de symétries projectives (PSG) développée par Wen sur un problème fermionique en champ moyen. Cette théorie permet de déterminer tous les Ansätze respectant un ensemble fixé de symétries spatiales des observables physiques. Dans une première section, nous expliquerons la nature du PSG et des PSG algébriques, puis détaillerons la manière d'établir la liste exhaustive des PSG algébriques respectant toutes les symétries de divers réseaux (kagomé et triangulaire), puis des Ansätze possibles. Chaque PSG algébrique correspond à une phase liquide de spins possible.

Nous verrons ensuite le rôle joué par les flux dans la distinction de liquides de spin différents (associés à des PSG algébriques différents). La définition de ces quantités invariantes de jauge de la Sec.2.1.4, sera précisée et nous décrirons les observables physiques associées. En effet, leur connaissance permettrait éventuellement de différencier expérimentalement des liquides de spins jusque là indiscernables. Comme les flux restent définis dans la limite $S \rightarrow \infty$, leur signification physique peut être déterminée pour un état classique, où les spins sont complètement ordonnés. Cela nous permettra d'associer à chaque état régulier du Chap.1 des flux.

Les liquides de spins possède une dégénérescence topologique liée à l'existence d'excitations appelées visons, qui seront décrites. Nous verrons l'influence des conditions aux limites sur le secteur topologique d'un fondamental obtenu par SBMFT, ainsi que sur les flux que l'on reliera ainsi aux visons. Nous établir une analogie entre visons et vortex $\mathbf{Z}_2$ sur des configurations classiques grâce à la limite $S \rightarrow \infty$.

Nous verrons en Sec.3 que les PSG algébriques ne fournissent pas toujours des états condensés réguliers et que réciproquement, il faut relâcher certaines contraintes sur les PSG pour pouvoir obtenir tous les états réguliers, ce qui sera illustré sur le réseau triangulaire. Cela nous permettra de supposer l'existence probable sur ce réseau d'un liquide de spins chiral.

1 Groupes des symétries projectives (PSG) et Ansätze symétriques

Soit $\mathcal{E}_{AB} = \{A_{ij}, B_{ij}, ij \text{ lien du réseau}\}$ et $\mathcal{E}'_{AB}$, deux Ansätze différents, autocohérents et $|\phi_{\mathcal{E}}\rangle_{MF}$, $|\phi_{\mathcal{E}'}\rangle_{MF}$ les fondamentaux des Hamiltoniens de champ moyen associés. On ne s'intéresse qu'aux observables physiques de ces deux états. $\mathcal{E}_{AB}$ et $\mathcal{E}'_{AB}$ ne sont que des étiquettes décrivant l'état. Si les observables physiques des deux états sont les mêmes, on est en présence de deux états physiquement identiques, mais désignés par deux étiquettes différentes : les Ansätze. Lorsque les deux états sont physiquement indistinguables, leurs Ansätze sont reliés par une transformation de jauge et réciproquement. C'est cette remarque qui a permis à Wen d'établir la théorie des PSG, groupes de symétries projectives, permettant une classification et une énumération des états symétriques différents.

Nous allons résumer en Sec.1.1 la définition de deux types de PSG : le PSG associé à un Ansatz fixé, qui permet de connaître les symétries de ses observables physiques, et les PSG algébriques, associés uniquement à un groupe de symétries spatiales, qui permettent de différencier des Ansätze respectant ces symétries. Nous aurons aussi besoin de la définition du groupe d'invariance de jauge.

Puis, grâce aux notions introduites, nous rechercherons tous les Ansätze respectant les symétries des réseaux triangulaire et kagome.

1.1 Définitions

Le groupe d'invariance de jauge (IGG)

Généralement, une transformation de jauge modifie l'étiquette d'un état de champ moyen : l'Ansatz. Cependant, ce n'est pas toujours le cas. Prenons l'exemple du lien isolé AF (Sec.2.5) dont les deux sites sont numérotés 1 et 2. Pour un changement de jauge G_{θ} , l'Ansatz n'est pas modifié si $\theta_1 = -\theta_2$. En effet, dans ce cas $A_{12}e^{i(\theta_1+\theta_2)} = A_{12}$.

Les transformations de jauge ne modifiant pas un Ansatz forment un groupe appelé le groupe d'invariance de jauge (IGG). Sa structure dépend de l'Ansatz et du réseau. Dans le cas extrême (et peu intéressant) où toutes les variables de lien sont nulles, ce groupe contient toutes les transformations de jauge possibles. Pour le réseau carré avec uniquement des A_{ij} non nuls entre premiers voisins, l'IGG est isomorphe à U_1 : on divise le réseau en deux sous-réseaux non connectés et on met deux θ_i opposés sur chaque sous-réseau. On est dans la même situation ($IGG \sim U_1$) si le réseau est non frustré (si aucune boucle ne contient un nombre impair de A_{ij} tous non nuls).

Pour un réseau et un Ansatz quelconque, on peut dire que l'IGG possède au moins le sous-groupe isomorphe à $\mathbb{Z}_2$ contenant l'identité et la transformation de jauge $\theta_i = \pi$. Ces deux transformations ne modifient ni A_{ij} ni B_{ij} sur un lien ij . L'IGG se réduit à $\mathbb{Z}_2$ pour les réseaux triangulaires et kagome AF premiers voisins.

L'IGG détermine la dynamique des fluctuations du champ de jauge [112] (exemple de calcul par Sachdev [92]). On distingue ainsi des liquides de spins par leur IGG : liquide de spins $\mathbb{Z}_2$, U_1 , ou encore, SU_2 (par exemple, pour certains champs moyens fermioniques [112]). L'IGG et le PSG qui sera défini ci-dessous sont donc des concepts valables au delà du champ moyen.

Le groupe des symétries projectives (PSG)

Etant donné un Ansatz $\mathcal{E}_{AB}$, son PSG est le groupe de toutes les transformations (combinaisons de transformations de jauge, transformations du réseau, inversion du temps) le laissant invariant (on ne considère pas les rotations des spins car elles sont toujours respectées par le vide des bosons de Bogoliubov, si le Hamiltonien initial les respecte).

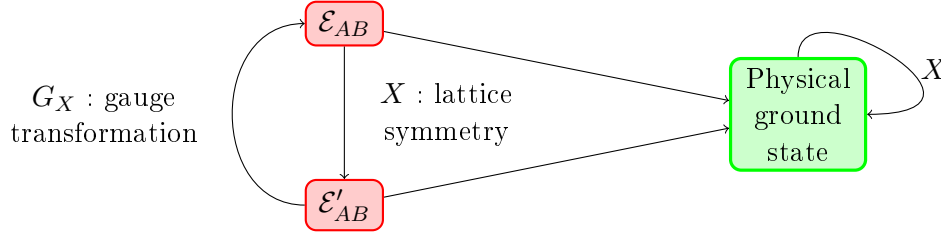


FIG. 3.1 – Si l'état physique associé à un Ansatz $\mathcal{E}_{AB}$ est invariant par une symétrie du réseau X , alors il existe une transformation de jauge G_X telle que $G_X X$ ne modifie pas l'Ansatz. $G_X X$ fait partie du PSG de $\mathcal{E}_{AB}$.

L'IGG est un sous-groupe du PSG. Ses éléments ne sont reliés qu'à la transformation physique identité.

Si l'état fondamental de $\mathcal{E}_{AB}$ respecte physiquement une symétrie du réseau X , $\mathcal{E}_{AB}$ est invariant par X à une transformation de jauge près (voir Fig.3.1). On peut alors associer à X une transformation de jauge G_X telle que $G_X X$ laisse $\mathcal{E}_{AB}$ invariant. Il y a bien sûr autant de possibilité pour G_X que d'éléments dans l'IGG. On vient de trouver plusieurs éléments du PSG : $\{G_\theta G_X X, G_\theta \in \text{IGG}\}$. Le groupe quotient PSG/IGG d'un Ansatz va donc nous donner toutes les symétries spatiales de son état fondamental.

Les auteurs ayant utilisés la SBMFT ont souvent voulu se restreindre aux Ansätze respectant les symétries du réseau. Pour cela, ils ont choisi des Ansätze invariants par translation [92] [32]. Nous allons voir qu'avec cette méthode, ils ignoraient d'autres Ansätze tout aussi symétriques.

Les groupes des symétries projectives algébriques (PSG algébriques)

On pourrait croire (à tort) que deux Ansätze ayant des modules de A_{ij} et B_{ij} identiques sur des liens équivalents sont physiquement indistinguables. C'est faux car les phases des variables de liens, bien que n'ayant aucune signification physique isolément, interviennent dans les flux autour de boucles du réseau. Deux états sont physiquement indistinguables uniquement si les modules et les flux de leurs A_{ij} et B_{ij} sont les mêmes.

Si l'on veut qu'un état respecte physiquement le groupe des symétries du réseau S_R (ce qui est le cas pour un liquide de spins), il faut donc que les modules et les flux des A_{ij} et B_{ij} les respectent. Les PSG algébriques permettent de trouver tous les Ansätze respectant S_R . Ce sont les PSG *minimaux* possibles lorsque l'on impose à l'Ansatz le respect des symétries du réseau S_R . On identifie complètement un PSG algébrique en associant à chaque générateur X de S_R une transformation de jauge G_X :

$$G_X : \begin{aligned} a_j &\rightarrow a_j e^{i\theta_X(j)} \\ b_j &\rightarrow b_j e^{i\theta_X(j)} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Un Ansatz invariant par toutes les transformations $G_X X$ aura alors un PSG dans lequel seront incluses toutes les transformations de l'un des PSG algébriques et ses observables physiques respecteront les symétries de S_R .

Il y a des contraintes algébriques sur les transformations G_X , provenant de la structure de S_R . Un choix quelconque des transformations de jauge G_X ne fournit pas à tous les coups un PSG algébrique. Par exemple, si l'on a une réflexion du réseau σ dans S_R , l'appliquer deux fois nous redonne notre $\mathcal{E}_{AB}$ de départ, ce qui lie $\theta_\sigma(\mathbf{r})$ et $\theta_\sigma(\sigma\mathbf{r})$.

Le nombre de telles contraintes est fini. En effet, chaque transformation du réseau peut s'exprimer de façon unique en fonction des générateurs du groupe de symétrie du

réseau $\{g_1, g_2, \dots, g_{n_s}\}$ sous la forme $g_1^{p_1} g_2^{p_2} \dots g_{n_s}^{p_{n_s}}$, avec $p_i \in \mathbb{Z}$ si la transformation n'est pas cyclique, $p_i \in [0..d_i - 1]$ si la transformation est cyclique d'ordre d_i . Prenons l'ensemble des équations permettant de mettre n'importe quel produit sous cette forme (l'une d'entr'elles est par exemple, $\sigma^2 = I$). Cet ensemble d'équations impose des contraintes sur les $\theta_{g_i}(\mathbf{r})$ et limite le nombre de PSG algébriques possibles.

1.2 Ansätze symétriques sur les réseaux triangulaire et kagome

Les PSG algébriques prenant en compte toutes les symétries de ces deux réseaux ont été calculés en détail par Wang et Vishwanath [108]. Nous allons en rappeler brièvement les grandes lignes ci-dessous dans le cas du réseau triangulaire. Le lecteur pourra remarquer les similarités marquées de ces calculs avec la recherche des groupes de symétries algébriques de la Sec.1.1.2.

Puis nous verrons que chaque PSG algébrique fournit éventuellement un Ansatz symétrique, avec l'exemple de l'interaction AF premiers voisins sur les réseaux triangulaire et kagome.

Calcul des PSG algébriques sur le réseau triangulaire

Les générateurs des symétries du réseau sont choisis identiques à ceux de la section 1.1 : les deux translations T_1 et T_2 , la rotation R_6 et la réflexion σ (voir Fig.1.4 et Eq.1.6). On cherche les transformations de jauge $\{G_1, G_2, G_R, G_\sigma\}$ telles que l'ensemble

$$\{G_1 T_1, G_2 T_2, G_R R_6, G_\sigma \sigma\} \quad (3.2)$$

soit inclu dans le PSG. Les éléments du PSG sont contraints par ces relations entre les transformations du réseau :

$$\begin{aligned} T_1 T_2 &= T_2 T_1 \\ \sigma^2 &= I \\ R_{\pi/3}^6 &= I \\ T_1 R_6 &= R_6 T_2^{-1} \\ T_2 R_6 &= R_6 T_1 T_2 \\ T_1 \sigma &= \sigma T_2 \\ R_6 \sigma R_6 &= \sigma. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Par exemple, la dernière équation implique la contrainte

$$\begin{aligned} R_6 \sigma R_6 = \sigma &\Rightarrow G_\sigma \sigma G_R R_6 G_\sigma \sigma G_R R_6 \in IGG \\ &\Rightarrow \theta_\sigma(\mathbf{r}) + \theta_R(\sigma \mathbf{r}) + \theta_\sigma(\sigma R_6 \mathbf{r}) + \theta_R(R_6 \mathbf{r}) = p\pi, \end{aligned} \quad (3.4)$$

où $p \in \mathbb{Z}_2$ et $\mathbf{r} = (r_1, r_2)$ est un site du réseau. Après prise en compte de toutes les contraintes, et en ne conservant que les PSG distincts (non reliés par une transformation de jauge), il reste huit PSG algébriques :

$$\begin{aligned} \theta_1(\mathbf{r}) &= 0, \\ \theta_2(\mathbf{r}) &= p_1 \pi r_1, \\ \theta_\sigma(\mathbf{r}) &= p_2 \pi / 2 + p_1 \pi r_1 r_2, \\ \theta_R(\mathbf{r}) &= p_3 \pi / 2 + p_1 (r_2 - 1 + 2r_1) r_2 \pi / 2, \end{aligned} \quad (3.5)$$

où $p_1, p_2, p_3 \in \mathbb{Z}_2$.

Ansätze symétriques sur le réseau triangulaire

On choisit une interaction AF premiers voisins. On souhaite donc trouver des Ansätze symétriques avec des A_{ij} premiers voisins non nuls, ce qui ajoute des contraintes au PSG et élimine des PSG algébriques. Par exemple, la réflexion σ envoie le lien $(0,0) - (1,1)$ sur lui-même. G_σ doit donc laisser invariant $A_{(0,0)-(1,1)}$, ce qui impose $p_2 = p_1$. De même, comme les images du lien $(0,0) - (1,0)$ par R_6^3 et par T_1 sont reliées, on trouve que $p_3 = 1 - p_1 \bmod 2$.

Au final, seuls deux des huit PSG algébriques fournissent des Ansätze avec des A_{ij} premiers voisins non nuls :

$$\begin{aligned}\theta_1(\mathbf{r}) &= 0, \\ \theta_2(\mathbf{r}) &= p_1 \pi r_1, \\ \theta_\sigma(\mathbf{r}) &= p_1 \pi (1/2 + r_1 r_2), \\ \theta_R(\mathbf{r}) &= (p_1 - 1) \pi / 2 + p_1 (r_2 - 1 + 2r_1) r_2 \pi / 2,\end{aligned}\tag{3.6}$$

avec $p_1 = 0$ ou 1 . Pour trouver un Ansatz ayant l'un de ces deux PSG, il suffit de placer un A_{ij} sur un premier lien (on choisit la jauge pour qu'il soit réel positif, pour simplifier). Puis, pour chaque lien du réseau, il existe une symétrie X qui envoie le lien connu sur celui-ci (c'est une particularité du réseau : tous ses liens sont équivalents). Le PSG algébrique nous donne la phase à ajouter au A_{ij} du lien initial pour obtenir celui du lien image : $A_{X(i)X(j)} = A_{ij} e^{i(\theta_X(X(i)) + \theta_X(X(j)))}$. Le seul paramètre à ajuster restant est le module $|A_{ij}|$, identique sur tous les liens.

Ces deux Ansätze ont déjà été détaillés dans la Sec.3.3 du Chap.2 :

- pour $p_1 = 0$, on obtient l'Ansatz (0) (Fig.2.3), de flux 0 autour des losanges à 4 liens, qui condensent dans l'état coplanaire,
- pour $p_1 = 1$, on obtient l'Ansatz (π) (Fig.2.4), de flux π , qui condense en un état faisant partie d'un continuum d'états dégénérés.

On constate qu'aucun de ces deux Ansätze ne condense dans l'état tétraédrique de la Fig.1.6(b). Il y a deux explications possibles : soit le Hamiltonien AF choisi pour faire condenser ces Ansätze ne permet pas la formation de cet ordre, soit les Ansätze sont incompatibles avec lui. Nous verrons en Sec.2 du Chap.3 que les flux permettent de montrer que la deuxième hypothèse est la bonne.

Ansätze symétriques sur le réseau kagome

Les symétries du réseau sont les mêmes que celles du réseau triangulaire (Fig.3.2). La maille du réseau de Bravais du réseau kagome possède trois sites, repérés par un indice $s = u, v, w$. Un site $\mathbf{r} = (r_1, r_2, c)$ est donc défini par sa maille et son indice de site. Les PSG algébriques sont exactement les mêmes que sur le réseau triangulaire (détails dans [108]) : Eq.3.5.

On choisit toujours une interaction AF premiers voisins. Il ne reste alors que quatre des huit PSG algébriques, fournissant chacun des Ansätze avec des A_{ij} premiers voisins non nuls :

$$\begin{aligned}\theta_1(\mathbf{r}) &= 0, \\ \theta_2(\mathbf{r}) &= p_1 \pi r_1, \\ \theta_\sigma(r) &= p_2 \pi / 2 + p_1 \pi r_1 r_2, \\ \theta_R(\mathbf{r}) &= (1 - p_2) \pi / 2 + p_1 (r_2 - 1 + 2r_1) r_2 \pi / 2,\end{aligned}\tag{3.7}$$

où $p_1, p_2 \in \mathbb{Z}_2$.

Les quatre Ansätze résultants ont les propriétés suivantes :

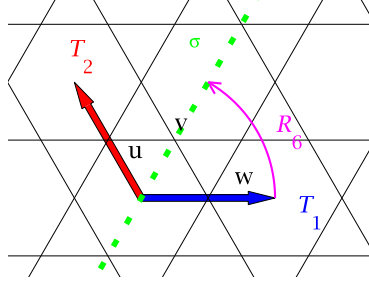


FIG. 3.2 – Symétries du réseau kagome. Des générateurs des symétries du réseau S_R sont représentés : les deux translations T_1 et T_2 , la rotation R_6 et la réflexion σ .

- pour $p_1 = 0$ et $p_2 = 0$, l'Ansatz est désigné par $(0, 0)$. Ses flux autour d'un hexagone ou d'un losange à huit liens sont nuls. $\kappa_c = 0.54$ et l'état condensé est le $\sqrt{3}\sqrt{3}$ (Fig.1.7(g)).
- pour $p_1 = 0$ et $p_2 = 1$, l'Ansatz est désigné par $(\pi, 0)$. Son flux autour d'un hexagone est de π , et de 0 autour d'un losange. $\kappa_c = 0.5$ et l'état condensé est le $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ (Fig.1.7(b)).
- pour $p_1 = 1$ et $p_2 = 1$, l'Ansatz est désigné par $(0, \pi)$. Son flux autour d'un hexagone est de 0, et de π autour d'un losange. $\kappa_c = 2.0$ et l'état condensé est compliqué : il appartient à un continuum comme dans le cas de l'Ansatz (0) du réseau triangulaire, mais sa description est beaucoup plus complexe en raison du nombre plus grand de modes mous.
- pour $p_1 = 1$ et $p_2 = 0$, l'Ansatz est désigné par (π, π) . Son flux autour d'un hexagone ou d'un losange est de π . $\kappa_c = 0.93$ et l'état condensé appartient là aussi à un continuum.

Les spectres de spinons et de magnons, ainsi que les signes des A_{ij} sur les liens sont récapitulés en annexe C.5. Comme sur le réseau triangulaire, on constate que certains ordres réguliers de la Fig.1.7 sont absents dans l'ensemble des condensats obtenus, alors que des continuum d'états sont là. Les continuum sont la conséquence de l'existence de plusieurs modes mous dégénérés. La contrainte du nombre de bosons par site rend l'expression des états du continuum compliquée, comme on a pu le voir pour l'Ansatz (π) sur le réseau triangulaire. Les corrélations spin-spin d'un état non condensé ne donnent pas d'informations lorsque le condensat est un continuum car ces corrélations sont moyennées sur tous les états du continuum.

En fonction du Hamiltonien considéré, l'un ou l'autre de ces Ansätze aura la plus petite énergie de champ moyen et l'on obtiendra des phases différentes, LRO ou TSL selon κ . En se limitant à ces Ansätze respectant les symétries du réseau, on suppose qu'elles ne peuvent être spontanément brisées, ce qui n'est pas toujours le cas. Un exemple d'état brisant spontanément une symétrie du Hamiltonien est donné en Ann.C.3.3 sur un petit cluster avec des interactions Heisenberg. Un autre exemple sera constaté sur le réseau kagomé avec interactions AF et Dzyaloshinskii-Moriya en Sec.3 du Chap.4.

2 Les flux

Dans la section précédente, nous avons différencié les différentes classes d'Ansätze symétriques par leurs flux. En effet, deux Ansätze possédant des flux distincts ont des fonctions d'onde physiquement distinguables puisqu'on ne peut pas passer de l'un à l'autre par un changement de jauge. Les flux donnent donc accès à des quantités permettant de

distinguer des phases liquides de spins possédant pourtant exactement les mêmes symétries spatiales. Dans ce chapitre, nous allons étudier en détail ces observables physiques.

2.1 Généralités sur les flux

Les différents flux

En présence des variables de liens B_{ij} , on peut former des flux $\psi_{1\dots n}^B$ définis comme la phase d'un opérateur de boucle $\widehat{\mathbb{B}}_{1\dots n}$, produit de $\widehat{B}_{ij}$:

$$Ke^{i\psi_{1\dots n}^B} = \langle \widehat{B}_{12}\widehat{B}_{23}\dots\widehat{B}_{n,1} \rangle = \langle \widehat{\mathbb{B}}_{1\dots n} \rangle. \quad (3.8)$$

Si l'on dispose de variables A_{ij} , on peut former des flux $\psi_{1\dots 2n}^A$ définis comme la phase d'un opérateur sur une boucle de longueur paire $\widehat{\mathbb{A}}_{1\dots 2n}$, produit de $\widehat{A}_{ij}$ ([99]) :

$$Ke^{i\psi_{1\dots 2n}^A} = \langle (-1)^n \widehat{A}_{12}\widehat{A}_{23}^\dagger \dots \widehat{A}_{2n,1}^\dagger \rangle = \langle \widehat{\mathbb{A}}_{1\dots 2n} \rangle. \quad (3.9)$$

On peut combiner des $\widehat{A}_{ij}$ et des $\widehat{B}_{ij}$ pour former d'autres quantités invariantes de jauge, sur des boucles comportant un nombre pair de liens $\widehat{A}_{ij}$, en alternant les $\widehat{A}_{ij}$, $\widehat{A}_{ij}^\dagger$, $\widehat{B}_{ij}$, $\widehat{B}_{ij}^\dagger$ pour annihiler l'effet d'un changement de jauge. Par exemple

$$\widehat{A}_{12}^\dagger \widehat{B}_{23}^\dagger \widehat{A}_{34} \widehat{B}_{41}. \quad (3.10)$$

Simplification de champ moyen

Dans l'approximation de champ moyen (premier ordre d'un développement en $1/N$ de la théorie Sp_N), la valeur moyenne est le produit des valeurs moyennes sur différents liens :

$$\langle \widehat{B}_{12}\widehat{B}_{23}\dots\widehat{B}_{n,1} \rangle = B_{12}B_{23}\dots B_{n,1}. \quad (3.11)$$

Dans cette limite, et sous certaines conditions, on peut effectuer un développement de l'énergie de champ moyen en κ (Tchernyshyov *et al.* [99]), décrit en annexe C.3.1. Les Ansätze minimisant l'énergie ont des flux ψ^A nuls sur les plus petites boucles, pour des interactions AF. Mais nous montrerons dans le chapitre 4 sur l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya pour d'autres interactions, d'autres flux peuvent être favorisés à petits κ .

Composition des boucles pour les flux

Sur un réseau où chaque lien porte une variable A_{ij} ou B_{ij} non nulle, on peut associer un flux à chaque boucle, à condition que le nombre de paramètres A_{ij} soit pair sur cette boucle. Tous ces flux ne sont pas indépendants les uns des autres. Les règles de composition sont à déterminer au cas par cas et découlent des remarques suivantes :

- Le flux $\psi_{1\dots n}^B$ d'une boucle ne dépend pas de son point de départ : $\psi_{1\dots n}^B = \psi_{2\dots n,1}^B$. Par contre, il dépend de son sens : $\psi_{1\dots n}^B = -\psi_{1,n\dots 2}^B$.
- Le flux $\psi_{1\dots 2n}^A$ d'une boucle dépend de son point de départ : $\psi_{1\dots 2n}^A = -\psi_{2\dots 2n,1}^A$ et de son sens : $\psi_{1\dots 2n}^A = -\psi_{1,2n\dots 2}^A$.

Par conséquent, le flux de deux boucles accolées n'est pas toujours la somme des flux des deux boucles, mais peut être l'opposé ou la différence.

Nombre de flux indépendants d'un réseau

Pour une chaîne 1D à N_s sites, ouverte, avec des interactions premiers voisins, $(N_s - 1)$ liens ont chacun leur paramètre A_{ij} ou B_{ij} complexe. Pour respecter l'autocohérence sur la chaîne, on peut ajuster le module et l'argument de chaque paramètre ($2(N_s - 1)$ paramètres réels), ou remarquer que par un changement de jauge, tous les arguments peuvent être fixés à 0 ($N_s - 1$ paramètres réels). Evidemment, l'espace de recherche des solutions est beaucoup plus petit dans le deuxième cas, et la résolution sera plus rapide numériquement. Si l'on ferme la chaîne en reliant le premier et le dernier site, il se peut que l'on ne puisse plus ramener tous les arguments à zéro (en fonction de la parité du nombre de liens A_{ij}). C'est le cas lorsqu'il existe des boucles non triviales possédant des flux sur le réseau. Pour réduire au maximum le nombre de paramètres, on a besoin de déterminer le nombre de flux indépendants, noté f sur le réseau, qui nous donne le nombre incompressible d'arguments des A_{ij} et B_{ij} à conserver.

Pour déterminer f sur un réseau fini quelconque, il suffit de connaître les deux matrices d'adjacence des liens A_{ij} et des liens B_{ij} . Ce sont les matrices de tailles $N_s \times N_s$ dont les coefficients de la i ème ligne et j ème colonne valent 1 si un paramètre de lien relie les sites i et j , 0 sinon. A partir de ces deux matrices, une nouvelle matrice $\mathcal{M}$ de taille $N_l \times N_s$ est créée (N_l = nombre total de liens), telle que chaque ligne corresponde à un lien, chaque colonne à un site. Chaque ligne possède deux coefficients non nuls valant ± 1 dans les colonnes des deux sites du lien correspondant. S'il porte un A_{ij} , les deux coefficients ont le même signe, s'il porte un B_{ij} , ils sont opposés (la ligne n'est ainsi définie qu'à un facteur -1 près, qui n'a pas d'influence sur le résultat). f est alors donné par

$$f = N_l - \text{Rank}(\mathcal{M}), \quad (3.12)$$

où $\text{Rank}(\mathcal{M})$ est le rang de $\mathcal{M}$.

En effet, la matrice $\mathcal{M}$ décrit les variations des phases des variables de lien lors d'un changement de jauge ($\theta_i \pm \theta_j$ selon la variable de lien). Son rang est donc le nombre de liens dont on peut choisir la phase grâce à la jauge. Le nombre de liens restant est celui des phases que l'on ne peut pas ajuster à notre convenance, donc, le nombre des flux du réseau.

Flux et symétries du PSG

Si l'on impose à un Ansatz de respecter les symétries du réseau, on limite souvent drastiquement les flux qu'il peut avoir. Les flux des boucles seront invariants par l'application de la symétrie car ce sont des quantités invariantes de jauge. Choisissons un Ansatz avec uniquement des A_{ij} premiers voisins. On a vu avec la recherche systématique de tels Ansätze symétriques sur les réseaux triangulaires et kagome (Sec.1.2) que leurs flux ne peuvent prendre que peu de valeurs.

Ces valeurs se déduisent très simplement grâce aux symétries du réseau. Un losange du réseau triangulaire se transforme en lui-même par la réflexion illustrée Fig.3.3. Son flux est inchangé par hypothèse, mais les valeurs des A_{ij} ont été modifiées. On peut donc identifier les phases de $A_1 A_2^* A_3 A_4^*$ et de $(-A_4)(-A_3)^*(-A_2)(-A_1)^*$, toutes deux égales au flux autour du losange. Elle sont opposées, ce qui impose au flux d'être 0 ou π . En fixant le flux des losanges, on a fixé le flux de toutes les boucles de longueur paire du réseau, ce qui détermine complètement l'Ansatz, aux modules des A_{ij} et à une transformation de jauge près.

Par le même argument, un hexagone ou un losange à 8 liens possédant un axe de symétrie passant par deux de ses coins aura un flux 0 ou π . Si un hexagone élémentaire ne possède pas d'axe de symétrie, mais qu'une rotation de $\pi/3$ le laisse invariant, on arrive aux mêmes possibilités de flux.

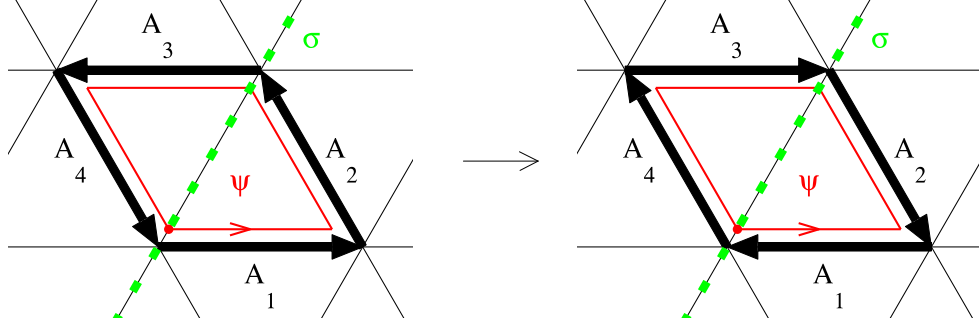


FIG. 3.3 – Effet de la réflexion sur le flux d'un losange du réseau triangulaire

Signification et pertinence des flux

Les flux sont des quantités définies quelle que soit la phase dans laquelle on se trouve. Les symétries de la phase peuvent interdire certaines valeurs des flux, comme on l'a vu par exemple sur le réseau triangulaire où tous les A_{ij} peuvent être choisis réels lorsque les symétries du réseau sont respectées. Les flux des A_{ij} sont alors 0 ou π sur toutes les boucles.

En fonction de la phase et de l'espace de Hilbert dans lesquels on se trouve, ces flux se rattachent parfois à des quantités connues éventuellement observables. Nous allons voir en Sec.2.2 le cas de l'espace où la contrainte de $\kappa = 1$ boson par site est exactement respectée : on peut alors exprimer les flux en fonction de permutations des spins. Puis nous verrons le cas où l'aimantation par site est maximale : la limite classique, en Sec.2.3.

2.2 Les flux dans l'espace des spins $S = 1/2$

Les flux sont des observables invariantes de jauge qui ont par conséquent une signification dans l'espace où la contrainte du nombre de bosons par site est respectée. A quel opérateur de spin les flux sont-ils reliés ? Nous allons répondre à cette question pour les spin $1/2$.

Les flux des B_{ij}

La théorie de champ moyen fermionique ressemble beaucoup à la SBMFT, sauf bien entendu que les opérateurs a_i et b_i sont remplacés par des opérateurs fermioniques $f_{i\sigma}$. Elle est décrite par exemple par Wen [112]. L'équivalent de l'opérateur $\hat{B}_{ij}$ est noté $\hat{\chi}_{ij} = \sum_{\sigma} f_{i\sigma}^{\dagger} f_{j\sigma}$. Wen *et al.* ont montré [113] que l'opérateur de permutation cyclique des spins, la chiralité vectorielle et les flux des $\hat{\chi}_{ij}$ sont reliés dans l'espace des spins à un fermion par site par les relations suivantes :

$$\Im \langle \hat{\chi}_{12} \hat{\chi}_{23} \hat{\chi}_{31} \rangle = -\frac{i}{4} \langle \mathbf{S}_1 \cdot (\mathbf{S}_2 \wedge \mathbf{S}_3) \rangle = \Im \langle \hat{P}_{123} \rangle. \quad (3.13)$$

Nous avons étendu ce lien entre permutation cyclique et opérateurs fermioniques aux opérateurs bosoniques. La permutation $\hat{P}_{12\dots n}$ envoie le spin du site 1 sur le site 2, ainsi de suite jusqu'à envoyer le spin du site n sur le site 1. Elle est égale à $\hat{P}_{12} \hat{P}_{23} \dots \hat{P}_{n-1n}$, où chaque permutation élémentaire s'écrit en fonction des opérateurs de spin comme

$$P_{ij} = \frac{1}{2} + 2\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (3.14)$$

Dans le sous-espace respectant la contrainte sur les bosons ($\hat{n}_i = 1$), la constatation suivante :

$$\hat{P}_{12..n} = b_{1\sigma_n}^\dagger b_{2\sigma_1}^\dagger \dots b_{n\sigma_{n-1}}^\dagger b_{1\sigma_1} b_{2\sigma_2} \dots b_{n\sigma_n}. \quad (3.15)$$

mène à une relation entre les opérateurs de permutation des spins et les opérateurs $\hat{B}_{ij}$

$$\hat{P}_{12..n} + \hat{P}_{23..n} = 2^n \hat{B}_{12}^\dagger \hat{B}_{23}^\dagger \dots \hat{B}_{n-1n}^\dagger \hat{B}_{n1}^\dagger \quad (3.16)$$

$$\hat{P}_{12..n} = 2^n : \hat{B}_{12}^\dagger \hat{B}_{23}^\dagger \dots \hat{B}_{n-1n}^\dagger \hat{B}_{n1}^\dagger :. \quad (3.17)$$

Les flux des A_{ij}

Regardons maintenant les flux obtenus à partir des opérateurs $\hat{A}_{ij}$. Le lien avec les opérateurs de permutation n'est pas aussi simple. En effet, les opérateurs $\hat{A}_{ij}$ et $\hat{B}_{ij}$ sont reliés par

$$: \hat{B}_{ij}^\dagger \hat{B}_{ij} : + \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} = S \left(S - \frac{\delta_{ij}}{2} \right), \quad (3.18)$$

ce qui ne permet pas d'exprimer $\hat{A}_{ij}$ en fonction de $\hat{B}_{ij}$. Pour déterminer la signification physique de l'opérateur $\hat{A}_{1\dots 2n}$, nous allons nous placer sur une boucle de 4 sites et exprimer à la fois l'opérateur de permutation cyclique $\hat{P}_{1234}$ et $\hat{A}_{1234}$ en fonction des opérateurs de spin. Nous verrons des similarités entre les deux formules, ce qui nous permettra de trouver la formule générale, que l'on démontrera.

Sur une boucle de 4 sites,

$$\begin{aligned} 8 : \hat{A}_{1234} : &= (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)(\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4) + (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3)(\mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_1) - (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3)(\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4) + S^4 \\ &+ S^2(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4 - \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 - \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 - \mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_1) \\ &+ iS(\mathbf{S}_1 \cdot (\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3) - \mathbf{S}_2 \cdot (\mathbf{S}_3 \times \mathbf{S}_4) + \mathbf{S}_3 \cdot (\mathbf{S}_4 \times \mathbf{S}_1) - \mathbf{S}_4 \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2)). \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \frac{\hat{P}_{1234}}{2} &= (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)(\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4) + (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3)(\mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_1) - (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3)(\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4) + S^4 \\ &+ S^2(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_1) \\ &+ iS(\mathbf{S}_1 \cdot (\mathbf{S}_2 \times \mathbf{S}_3) + \mathbf{S}_2 \cdot (\mathbf{S}_3 \times \mathbf{S}_4) + \mathbf{S}_3 \cdot (\mathbf{S}_4 \times \mathbf{S}_1) + \mathbf{S}_4 \cdot (\mathbf{S}_1 \times \mathbf{S}_2)). \end{aligned} \quad (3.20)$$

La formule 3.19 est valable quel que soit le spin, alors que 3.20 n'est valable que pour $S = 1/2$. On remarque que la première est transformée en son hermitique conjugué sous l'action de la permutation des numéro de sites $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 1$, alors que la deuxième est (évidemment) inchangée. Les mêmes termes apparaissent dans les deux équations, mais avec différents signes. Pour retrouver les mêmes signes, il faut inverser le signe des opérateurs $\mathbf{S}_2$ et $\mathbf{S}_4$ (ou $\mathbf{S}_1$ et $\mathbf{S}_3$), c'est à dire faire l'opération d'inversion du temps sur les spins pairs.

Nous allons montrer grâce à ces remarques que l'on peut exprimer l'opérateur $\hat{A}_{1\dots 2n}$: en fonction de permutations selon la formule

$$2^{2n} : \hat{A}_{12\dots 2n} := \hat{P}_{12\dots 2n}(1 - \hat{P}_{12})(1 - \hat{P}_{34}) \dots (1 - \hat{P}_{2n-1,2n}). \quad (3.21)$$

En effet, on peut proposer cette formule en suivant le raisonnement suivant. On part de la permutation $P_{1\dots 2n}$ et on la décompose en produits de permutations tels que les sites pairs n'apparaissent qu'une seule fois :

$$\hat{P}_{123\dots 2n} = \hat{P}_{135\dots 2n-1} \hat{P}_{12} \hat{P}_{34} \dots \hat{P}_{2n-1,2n}. \quad (3.22)$$

D'après l'Eq.3.14, l'effet de la transformation $\mathbf{S}_{2i} \rightarrow -\mathbf{S}_{2i}$ sur une permutation à deux sites est $\hat{P}_{2i-1,2i} \rightarrow 1 - \hat{P}_{2i-1,2i}$. En utilisant que $1 - \hat{P}_{ij} = -\hat{P}_{ij}(1 - \hat{P}_{ij})$, on obtient

$$\hat{P}_{12\dots 2n} \rightarrow (-1)^n \hat{P}_{123\dots 2n} (1 - \hat{P}_{12})(1 - \hat{P}_{34}) \cdots (1 - \hat{P}_{2n-1,2n}), \quad (3.23)$$

ce qui suggère une égalité du type 3.21 (au signe près, que l'on peut vérifier pour $n = 1$ et 2).

Preuve de l'Eq.3.21. Après avoir montré comment la forme de l'équation 3.21 peut se deviner empiriquement à partir des formules sur les petites boucles, nous allons montrer qu'elle est correcte pour toute taille de boucle $2n$. Pour cela, nous allons appliquer les deux membres de l'égalité à une configuration d'Ising de spins sur la boucle ($S_{iz} = \pm 1/2$). Le terme de gauche est

$$(2\hat{A}_{23}^\dagger) \cdots (2\hat{A}_{2n,1}^\dagger)(2\hat{A}_{12})(2\hat{A}_{2n-1,2n}). \quad (3.24)$$

Les seuls états non annihilés par cet opérateur sont ceux pour lesquels chaque paire de sites $(2i-1, 2i)$ possède deux spins opposés. Alors, le produit des $2\hat{A}_{2i-1,2i}$ donne le vide de bosons avec le signe $\prod_i S_{2i-1,z}$. Les opérateurs restants créent des singulets $|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$ sur les paires $(2i, 2i+1)$.

Dans le terme de droite, les $(1 - P_{2i-1,2i})$ créent un dimère $S_{2i-1,z}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ sur le lien $(2i-1, 2i)$ si $S_{2i-1,z} \neq S_{2i,z}$, qui est ensuite décalé par la permutation. L'état est là aussi annihilé si deux voisins $(2i-1, 2i)$ ont le même spin.

Les deux membres de l'équation 3.21 ont donc le même effet sur tout état de la base d'Ising des spins. Ils sont bien identiques.

Cette formule pourra être utilisée pour évaluer les flux de fondamentaux obtenus par diagonalisation exacte et les comparer aux prédictions de la SBMFT.

2.3 Les flux dans la limite classique

Dans la limite classique, tous les bosons contribuent à l'aimantation et sont dans un unique mode d'énergie nulle. Les opérateurs a_i et b_i acquièrent une valeur moyenne $\langle a_i \rangle$ et $\langle b_i \rangle$ non nulle, que l'on peut obtenir à partir du vecteur unitaire de l'aimantation $\mathbf{m}_i$:

$$\begin{pmatrix} \langle a_i \rangle \\ \langle b_i \rangle \end{pmatrix} = \sqrt{S} \begin{pmatrix} \sqrt{1 + m_i^z} \\ \sqrt{1 - m_i^z} e^{i \text{Arg}(m_i^x + i m_i^y)} \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

et les paramètres de lien s'obtiennent comme

$$A_{ij} = \frac{1}{2}(\langle a_i \rangle \langle b_j \rangle - \langle a_j \rangle \langle b_i \rangle), \quad B_{ij} = \frac{1}{2}(\langle a_i^\dagger \rangle \langle a_j \rangle + \langle b_i^\dagger \rangle \langle b_j \rangle). \quad (3.26)$$

On peut alors chercher la signification géométrique des flux des B_{ij} et des A_{ij} .

Signification géométrique des flux

Sur une boucle très grande, sur laquelle l'orientation des spins varie très lentement, on montre que le flux des B_{ij} est la moitié de l'angle solide parcouru par l'extrémité du vecteur spin sur la sphère $\mathcal{S}_2$ [4]. Si tous les spins sont coplanaires, le flux sera 0 ou π .

Les flux des A_{ij} sont obtenus à partir du flux des B_{ij} par l'opération $\mathbf{S} \rightarrow -\mathbf{S}$ sur un site sur deux de la boucle ($\langle a_i \rangle \rightarrow \langle b_i \rangle^*$ et $\langle b_i \rangle \rightarrow \langle -a_i \rangle^*$). On en déduit la signification géométrique des flux des A_{ij} . Là encore, le flux est 0 ou π si tous les spins sont coplanaires.

Les flux non triviaux sont toujours le résultat de la non-coplanarité des spins, mais des spins non coplanaires peuvent donner des flux de 0 ou π .

Valeur des flux pour des ordres de Néel particuliers

Pour une orientation des spins fixée sur un réseau, on peut calculer le flux des paramètres A_{ij} et B_{ij} autour de n'importe quelle boucle. Les résultats pour les ordres réguliers de la Sec.1 sont récapitulés pour les réseaux triangulaire et kagomé dans les tables 3.1. Tous les hexagones du réseau kagomé sont images les uns des autres par une symétrie du réseau. Comme les spins sont reliés par une transformation globale de O_3 sur ces hexagones, les flux vont être identiques ou opposés (si la transformation des spins n'est pas dans SO_3). Il en est de même pour les losanges à 8 liens du kagomé et ceux à 4 liens du triangulaire.

On remarque que certains ordres de Néel ont des flux simples (0 ou π) sur les plaquettes élémentaires, ce qui est normal pour les états coplanaires, mais plus inattendu pour le cuboc2 par exemple. Pour cet ordre, on comprend facilement que le flux est multiple de π sur un hexagone : les spins sont coplanaires lorsqu'on parcourt une boucle hexagonale.

Sur le réseau kagomé, les états classiques $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ et $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ ont respectivement les mêmes flux que les Ansätze $(\pi, 0)$ et $(0, 0)$. D'ailleurs, les condensats obtenus pour ces deux Ansätze pour une interaction AF premiers voisins donnent des états de Néel de même symétrie que ces deux états classiques.

Les états classiques octaédriques et cuboc2 ont eux respectivement les flux des Ansätze (π, π) et $(0, \pi)$. Par contre, les condensats obtenus pour ces deux Ansätze avec une interaction AF premiers voisins n'ont pas l'aimantation de ces ordres classiques. Ce sont des continuum d'états, analogues à celui obtenu sur le réseau triangulaire pour l'Ansatz (π) , ne contenant pas ces deux ordres classiques.

D'où provient la différence entre ces deux groupes d'Ansätze ? Tout simplement de leur énergie classique. On a essayé de les faire tous condenser avec le même Hamiltonien AF. Or, classiquement, les ordres classiques $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ et $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ sont des états fondamentaux, contrairement aux ordres octaédriques et cuboc2. On peut assimiler la condensation à la minimisation d'une énergie classique (les spins sont des vecteurs) dans le sous-espace des configurations de flux fixés. Les états obtenus en faisant condenser l'Ansatz (π, π) sont les ordres classiques de flux (π, π) d'énergie minimale. Ils ont une énergie plus basse que l'ordre cuboc2, pour un Hamiltonien AF premiers voisins, ce qui explique que cet ordre soit introuvable en faisant condenser l'Ansatz de cette manière. Pour confirmer cette explication, il suffirait de prendre un Hamiltonien $J_1 - J_2$ avec les paramètres tels que l'ordre cuboc2 soit le fondamental classique et de vérifier que la condensation donne bien uniquement cet ordre.

Sur le réseau triangulaire, on remarque qu'aucun ordre régulier n'a un flux en A_{ij} de π sur les losanges. Il est donc impossible de trouver un ordre régulier en faisant condenser l'Ansatz (π) , ce qui a été vérifié pour un Hamiltonien AF premiers voisins en Sec.2.3.3.

Les ordres cuboc1 sur kagome et tétraédrique sur le triangulaire ont des flux non triviaux en A_{ij} . De manière générale, tous les états possédant des spins non coplanaires possèdent au moins un flux non trivial, en B_{ij} ou A_{ij} . Ils brisent l'invariance par renversement du temps et des symétries du réseau (par exemple, σ est brisée dans le cuboc1). Pour obtenir leurs PSG, il faudra chercher des PSG algébriques ne possédant pas toutes les symétries du réseau. C'est ce que nous ferons en Sec.3.

2.4 Les flux autour de boucles non locales : importance des conditions aux limites

Lors de la recherche des PSG algébriques, les réseaux étaient implicitement supposés infinis. Lorsque l'on cherche à respecter l'autocohérence, on peut résoudre analytiquement les équations pour le réseau infini, mais c'est souvent impossible si le réseau possède plusieurs sites par maille. Alors, on se place sur un réseau de taille finie, périodique (pour pouvoir

ordre	$\mathbb{B}(\triangle)$	$\mathbb{B}(\diamond)$	$\mathbb{B}(\nabla)$	$\mathbb{A}(\diamond)$	$\mathbb{A}(\nabla)$	$\psi^A(\diamond)$	$\psi^A(\nabla)$
F	1	1	1	0	0		
q = 0	$-\frac{1}{8}$	$\frac{1}{64}$	$\frac{1}{256}$	$-\frac{27}{64}$	$\frac{81}{256}$	π	0
$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$	$-\frac{1}{8}$	$\frac{1}{64}$	$\frac{1}{256}$	$\frac{27}{64}$	$\frac{81}{256}$	0	0
octaédrique	$\frac{1+i}{4}$	$-\frac{i}{8}$	$-\frac{1}{16}$	$-\frac{1}{8}$	$-\frac{1}{16}$	π	π
cuboc1	$-\frac{1}{8}$	$-\frac{1}{64}$	$-\frac{1}{256}$	$\frac{23-10\sqrt{2}i}{64}$	$-\frac{81}{256}$	$-\arctan \frac{10\sqrt{2}}{23}$	π
cuboc2	$\frac{5+i\sqrt{2}}{8}$	$-\frac{27}{64}$	$-\frac{81}{256}$	$\frac{1}{64}$	$-\frac{1}{256}$	0	π

ordre	$\mathbb{B}(\triangle)$	$\mathbb{B}(\nabla)$	$\mathbb{A}(\nabla)$	$\psi^A(\nabla)$
F	1	1	0	
$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$	$-\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{9}{16}$	0
tétraédrique	$\frac{i\sqrt{3}}{9}$	$-\frac{1}{9}$	$\frac{2+2i\sqrt{3}}{9}$	$\pi/3$

TAB. 3.1 – Opérateurs de boucles et flux des états classiques réguliers sur le réseau kagome (en haut) et triangulaire (en bas), pour S pris égal à 1 dans la formule 3.25.

passer dans l'espace réciproque), défini par deux vecteurs $\mathbf{t}_1$ et $\mathbf{t}_2$ tels que les sites identiques sont éloignés d'une combinaison linéaire entière de ces deux vecteurs. Pour qu'un Ansatz issu d'un PSG algébrique respecte toutes les symétries du réseau infini S_R contenues dans le PSG algébrique, il faut que le réseau périodique sur lequel on le place respecte les mêmes symétries.

Réseaux périodiques respectant les symétries du réseau infini

Le réseau kagome possède un réseau de Bravais triangulaire et en prenant comme origine le centre d'un hexagone (Fig.3.2, page 96), ses symétries sont celles du réseau triangulaire. Former un réseau triangulaire ou kagome périodique respectant ces symétries est donc exactement la même chose. On se concentre donc sur le réseau triangulaire. Une symétrie X est respectée sur un réseau périodique défini par $\mathbf{t}_1$ et $\mathbf{t}_2$ si $X\mathbf{t}_1$ et $X\mathbf{t}_2$ définissent le même réseau, c'est à dire sont des combinaisons linéaires entières de $\mathbf{t}_1$ et $\mathbf{t}_2$. Les symétries T_1 et T_2 sont respectées sur n'importe quel réseau. Le respect des rotations mène aux réseaux générés par $\mathbf{t}_1 = (l, m)$ et $\mathbf{t}_2 = (l + m, -l)$ dans la base formée par $\mathbf{T}_1$ et $\mathbf{T}_2 + \mathbf{T}_1$. Si l'on veut en plus que la symétrie par réflexion soit respectée, il faut choisir $m = 0$ ou $m = l$. Ainsi, seuls certains nombres de sites sont possibles pour un réseau triangulaire symétrique : ceux égaux à $N_s = l^2 + m^2 + lm$ ($N_s = 3(l^2 + m^2 + lm)$ pour un réseau kagomé). A chaque valeur de l et m correspondent $l^2 + m^2 + lm$ points de la ZdB, qui possèdent des symétries reliées à celles du réseau direct.

Ansätze symétriques sur un réseau périodique

Continuons sur des réseaux triangulaires. On a fait attention à prendre un réseau symétrique, sur lequel on place maintenant un Ansatz possédant l'un des PSG algébriques respectant toutes les symétries du réseau infini S_R . On a deux tels Ansätze : (0) et (π). Soit m le nombre de sites par maille de l'Ansatz ($m = 1$ pour (0), $m = 2$ pour (π)). Si $m = 1$, on n'a pas de contrainte, et on peut toujours habiller le réseau avec sa maille. Par contre, pour d'autres m , l'habillage n'est pas toujours possible (exemple trivial : le réseau périodique à un seul site). Eliminons les réseaux incompatibles avec l'Ansatz et continuons.

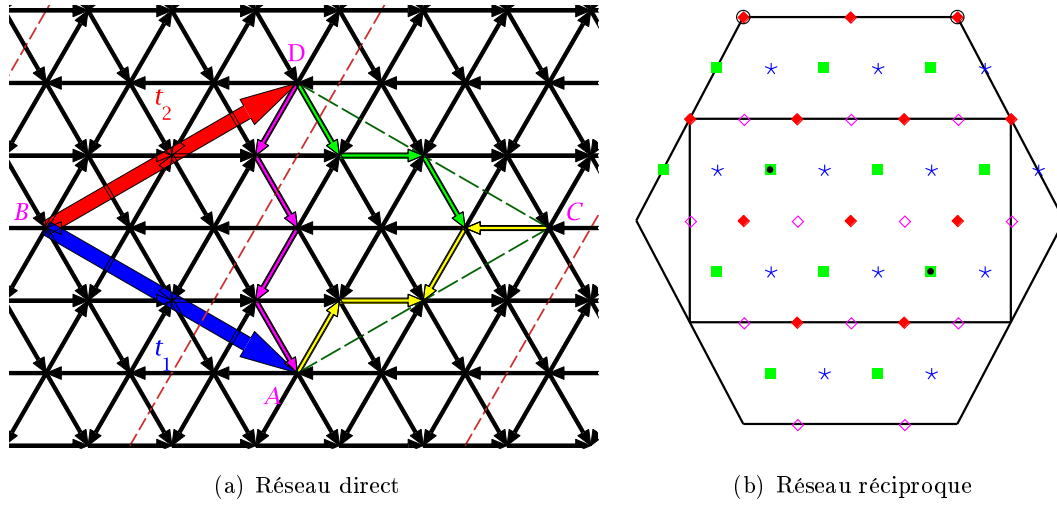


FIG. 3.4 – (a) Ansatz (π) sur un réseau triangulaire périodique à 12 sites. Les points A , B , C et D sont au même site. Les boucles verte et jaune, images l'une de l'autre par symétrie du réseau, ont des flux respectifs de 0 et π . L'Ansatz ne respecte donc pas S_R sur ce réseau. (b) Pour l'Ansatz (0), $m = 1$, la ZdB est l'hexagone. Pour l'Ansatz (π), $m = 2$, la ZdB a une surface deux fois plus petite et est le rectangle. Les points noirs en coins de zone sont les spinons d'énergie minimale pour (0), ceux dans le rectangle, pour (π). Les points rouges, bleus, verts et magenta sont les points du réseau (a) pour des conditions aux limites respectivement PP, AP, PA et AA. Les deux lettres indiquent les conditions choisies dans les directions $\mathbf{t}_1$ et $\mathbf{t}_2$: P pour périodiques et A pour antipériodique.

A t-on pris toutes les précautions pour que le fondamental respecte les symétries de S_R ? Pour le vérifier, on calcule les corrélations spin-spin $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle_{MF}$ sur un réseau symétrique à 12 sites, dessiné Fig.3.4(a). Elles sont représentées pour les deux Ansätze Fig.3.5(a) et 3.5(e). Pour l'Ansatz (0), pas de problème apparent, les corrélations respectent les symétries de S_R . Par contre, les corrélations de l'Ansatz (π) ne sont pas invariantes par rotation de $\pi/3$.

Il n'est donc pas suffisant de combiner un réseau et un Ansatz respectant tous deux S_R pour obtenir un fondamental avec ces symétries. Tout simplement parce que l'Ansatz a été étudié pour respecter les symétries sur un réseau infini, ce qui veut dire que les flux de boucles locales (ou topologiquement triviales : qui ne font pas de tours du réseau) sont invariants par l'action des symétries. Un réseau périodique possède la topologie d'un tore. Le premier groupe d'homotopie du tore est $\pi_1 = \mathbb{Z}^2$. Ses classes sont générées par les classes de deux boucles non homotopes (non reliées par une déformation continue) faisant le tour du tore : (1,0) et (0,1). Pour que le fondamental respecte S_r , il faut que toutes les boucles respectent les symétries, y compris celles non locales (la classe d'une boucle locale est inchangée par une symétrie du réseau, mais ce n'est pas vrai pour toutes les classes). Les boucles jaune, verte et magenta (de C à A , de D à A et de D à C) de la Fig.3.4(a) sont non locales et sont images l'une de l'autre par rotation de $\pi/3$ autour de D . Elles doivent donc avoir le même flux pour que S_R soit respecté. Pour l'Ansatz (0), c'est bien le cas, mais cela ne l'est pas pour l'Ansatz (π), où elles ont des flux de 0, π et 0. Parmi les trois directions $\mathbf{t}_2$, $\mathbf{t}_1$ et $\mathbf{t}_1 - \mathbf{t}_2$, c'est la direction $\mathbf{t}_1$ (boucle verte) qui joue un rôle particulier, ce qui se retrouve sur les corrélations 3.5(e).

On a trouvé sur le réseau direct la raison pour laquelle les corrélations ne respectent pas S_R pour l'Ansatz (π). Une autre façon de constater la dissymétrie est de comparer

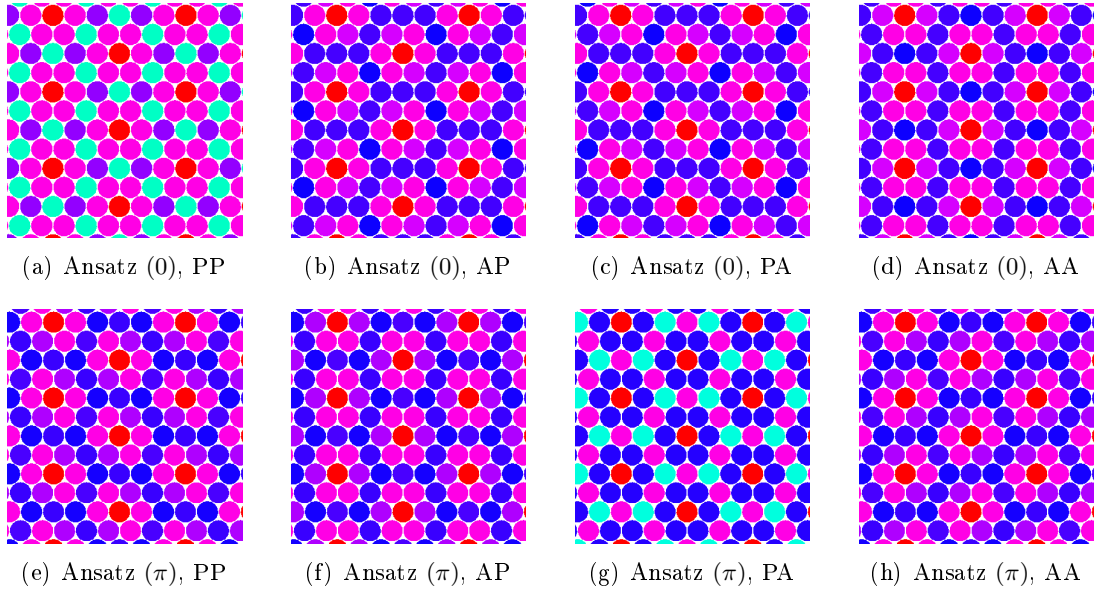


FIG. 3.5 – Corrélations spatiales entre spins (spin de référence en rouge), pour un réseau triangulaire de 12 sites, avec différentes conditions aux limites (par colonnes). Les conditions périodiques sont dans la première colonne. Les valeurs de A et λ ne jouent pas sur les symétries des corrélations, qui sont ce qui nous intéresse ici.

le spectre de spinons, Fig.2.3(c) et 2.4(c) et les points de la ZdB du réseau périodique, Fig.3.4(b). Pour l'Ansatz (0), le spectre de spinon a les mêmes symétries que les points du réseau réciproque. Par contre, pour l'Ansatz (π), les deux points noirs dans le rectangle de 3.4(b)) brisent l'invariance par rotation de l'Ansatz : deux spinons sont plus proches que les autres de chacun de ces points. Ils particularisent une direction qui est modifiée par rotation. Cette direction est justement celle qui se distingue dans les corrélations 3.5(e). Donc, le fondamental n'est pas invariant par rotation.

Nous allons voir une manière de corriger ce défaut de certains réseaux en utilisant des conditions aux limites antipériodiques.

Conditions aux limites antipériodiques

Le problème de l'Ansatz (π) combiné au réseau de 12 sites provient des conditions aux limites, qui imposent des flux non symétriques sur des boucles non locales. Essayons de modifier le flux ψ_g , ψ_y et ψ_m des boucles verte, jaune et magenta, sans modifier aucun flux local. La combinaison de ces trois boucles forme une boucle DCA , de flux $\psi_g + \psi_y + \psi_m$, qui est locale : elle entoure cinq losanges de flux π d'après l'Ansatz choisi. $5\pi \sim \pi$ est donc le flux de la grande boucle, ce qui est bien ce que l'on retrouve en additionnant les flux des trois boucles colorées. On ne pourra donc pas changer cette somme en modifiant les conditions aux limites, puisqu'elle n'en dépend pas.

Les conditions aux limites périodiques (P) selon le vecteur $\mathbf{t}_i$ sont définies comme

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{x}+n\mathbf{t}_i} &= a_{\mathbf{x}}, \\ b_{\mathbf{x}+n\mathbf{t}_i} &= b_{\mathbf{x}}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

avec n un entier relatif quelconque.

On définit maintenant des conditions antipériodiques (A) selon $\mathbf{t}_i$ comme

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{x}+n\mathbf{t}_i} &= (-1)^n a_{\mathbf{x}}, \\ b_{\mathbf{x}+n\mathbf{t}_i} &= (-1)^n b_{\mathbf{x}}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Localement, le passage de P à A est un changement de jauge. Il ne modifiera donc aucun flux local, mais pourra modifier les autres. Une façon de passer de P à A selon $\mathbf{t}_1$ (transposable à $\mathbf{t}_2$) est de tracer une ligne droite sur le réseau 3.4(a) ne passant par aucun site du réseau (exemple : ligne orange pointillée), de tracer tous ses translatés par $n\mathbf{t}_1$ et de changer les signes des variables des liens coupés par ces lignes. Cela ajoute π aux flux des boucles verte et magenta, sans modifier celui de la boucle jaune. La somme des trois flux n'a pas changé, mais ils ne sont toujours pas tous les trois identiques. On les rend tels en choisissant les conditions P selon $\mathbf{t}_1$ et A selon $\mathbf{t}_2$. L'effet des différentes conditions aux limites sur les corrélations de spin est représenté Fig.3.5.

Changer le type de périodicité modifie les points de la ZdB. Ils sont translatés d'un demi-vecteur de base du réseau réciproque pour donner les points représentés Fig.3.4(b). On vérifie que les conditions PA (Fig.3.5(g)) permettent de rétablir les symétries du spectre de spinons de l'Ansatz (π).

Ces quatre conditions aux limites possibles donnent chacune un état fondamental différent, mais localement indiscernable des autres. A la limite thermodynamique, leurs énergies seront dégénérées. La dégénérescence provient de l'IGG (invariance gauge group, défini en Sec.3.1.1), ici isomorphe à $\mathbb{Z}_2$. Il existe donc des excitations appelées *visons*, similaires à des vortex $\mathbb{Z}_2$ [94] [93] (le *donc* sera expliqué dans le paragraphe suivant). Ils se créent par paires et ont un spin nul. En créant une paire de visons et en faisant parcourir à l'un d'eux une boucle non triviale avant de les annihiler, on change de secteur topologique. C'est aussi ce qui se produit lorsque l'on change les signes des A_{ij} sur une telle boucle. La dégénérescence *topologique* [85] vaut donc 2^{2g} avec g , le genre de la surface (genus en anglais, correspondant au nombre d'anses de la surface). Pour un tore, $g = 1$. On retrouve la dégénérescence 4 d'un liquide de spin $\mathbf{Z}_2$ sur un tore.

2.5 Lien entre visons des SL et vortex $\mathbf{Z}_2$ des phases ordonnées

Comment l'existence de visons se déduit-elle de la structure de l'IGG? Pour se le représenter, il faut se placer dans un état SBMFT sur une surface bi-dimensionnelle, possédant éventuellement des singularités en des points isolés, mais respectant localement les symétries du réseau. On trace une boucle sur la surface, qui ne passe pas par les points singuliers. Lorsque l'on se déplace d'un cran le long de cette boucle, les propriétés locales restent toujours les mêmes, puisqu'on effectue une translation et que l'état est localement invariant par translation (pas globalement à cause des défauts). On peut donc compenser notre déplacement par un changement de jauge. Lorsque l'on cumule tous les déplacements élémentaires de façon à faire le tour de la boucle et revenir au point de départ, on compose une succession de transformations de jauge non globales variant très peu de l'une à l'autre. La transformation de jauge finale doit avoir un effet trivial sur l'état. Comme l'IGG est $\mathbf{Z}_2$, il y a deux possibilités. Dans le cas où ce n'est pas l'élément neutre, la boucle entoure un nombre impair de défauts topologiques. Ce sont ces défauts que l'on appelle *visons*. Leur conséquence sur les flux des boucles les entourant est l'ajout de π par vison contenu dans la boucle au flux obtenu sans vison.

Dans la limite classique, l'état est ordonné à longue portée, la symétrie par rotation des spins est brisée. On suppose que l'état est *régulier* pour les translations (au sens défini en Sec.1.1.1), c'est à dire qu'une translation est compensée par une transformation globale des spins de O_3 . Quitte à prendre des vecteurs de translation deux fois plus grands que ceux du réseau si nécessaire, on suppose même que les translations sont compensées

par des transformations de SO_3 : des rotations des spins. En exprimant les spins sous forme de spineurs, les translations sont compensées par des transformations de SU_2 . Pour que la rotation possible soit unique (au signe près), on a besoin de supposer notre état non colinéaire. On choisit maintenant une boucle du réseau et on effectue une série de translations pour en faire le tour. Lorsque l'on revient au point de départ, on a accumulé des transformations de SU_2 au long du chemin, ce qui nous donne l'un des deux antécédents de la rotation identité de SO_3 dans SU_2 : $\pm I$, selon la présence ou non d'un nombre impair de vortex dans la boucle. Ce sont les vortex rencontrés dans la Sec.1.2.

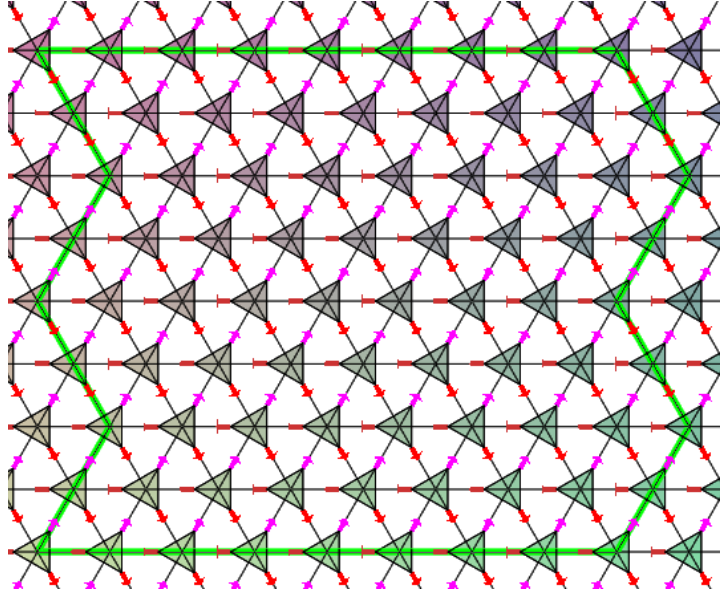
Si l'état est colinéaire, il n'y a pas d'unicité des rotations : on ne peut plus définir de vortex. Le paramètre d'ordre n'est plus SO_3 mais S_2 , la sphère à 3 dimensions, dont le premier groupe d'homotopie est trivial : toutes les boucles sont contractibles. Qu'en est-il alors des visons ? L'état quantique correspondant à un état colinéaire classique n'est pas un liquide de spin, mais un crystal de liens de valence [93]. L'IGG en SBMFT n'est plus $\mathbb{Z}_2$ mais U_1 . Dans un tel état, les visons ont condensé [86] [72] [83].

Il est tentant d'identifier ces deux types d'excitations : visons et vortex, comme le fait Sachdev dans [93]. Une petite expérience numérique permet de confirmer ce lien. En effet, on sait associer à des plaquettes d'une configuration classique à la fois des flux et de la vorticit . On place sur un r seau triangulaire des spins classiques dans l' tat coplanaire fondamental d'un Hamiltonien AF (dans le plan appel  Oxy). On regroupe les spins par groupes de trois spins   120 degr s comme sur la figure 3.6(a), formant ce que l'on appelle le super-r seau.

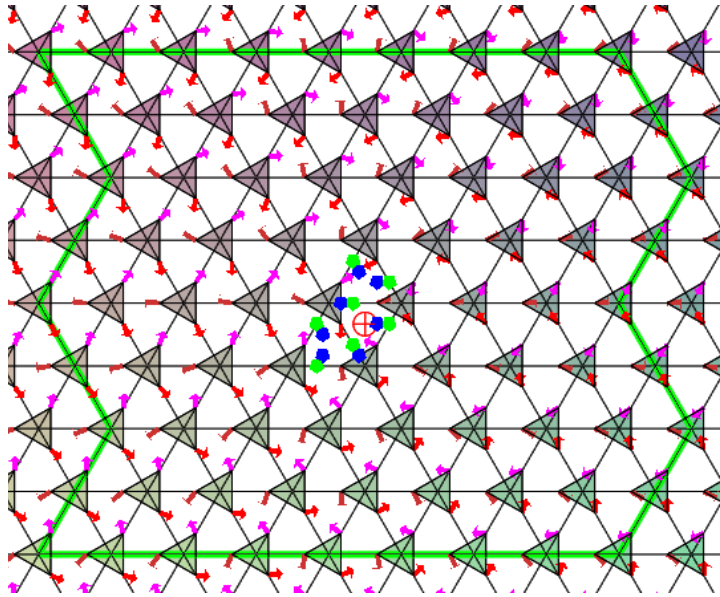
On d sordonne maintenant le syst me en faisant subir   chaque groupe de spins une rotation selon Oz (en toute g n ralit , on devrait pouvoir prendre n'importe quelle rotation, mais nous verrons plus bas les probl mes que cela pose). Ainsi, chaque groupe de spins du super-r seau est d crit par un  l ment de SO_3 .   chaque lien du r seau, on associe une valeur classique des op rateurs A_{ij} , B_{ij} , ce qui permet de calculer tous ψ^A et les ψ^B du r seau. Comme l' tat est coplanaire, les flux sont 0 ou π . On leur soustrait le flux de l' tat compl tement ordonn  pour d cider de la pr sence ou non d'un vison sur la plaquette. Si l'on calcule ces quantit s sur toutes les plaquettes  l mentaires du r seau (les losanges pour les ψ^A , les triangles pour les ψ^B), et la vorticit  des triangles du super-r seau, on obtient les r sultats pr sent s en Fig.3.6(b), sur une configuration particuli re que nous allons d tailler plus bas.

Les calculs qui viennent d' tre d crits souffrent de plusieurs limitations :

- Les diff rents flux et la vorticit  ne sont pas d finis sur les m mes boucles. Lorsque c'est le cas, la correspondance n'est pas rigoureuse : par exemple on peut calculer ψ^B sur les losanges des ψ^A . L'un peut avoir pris π en plus par rapport   la configuration de r f rence et pas l'autre, comme on peut le constater sur la Fig.3.6(b).
- La d finition de la vorticit  laisse   d sirer. Dans l'exemple pris, on a fig  des spins   120  afin qu'il n'y ait pas d'ambigu t  (tout comme on avait fix  des spins   90  dans le premier chapitre avec les tri dres), mais avec des spins Heisenberg libres, l'attribution d'un  l ment de SO_3 aux orientations des trois spins d'un site du super-r seau n'est pas facile. Dans [47], Kawamura et Kikuchi utilisent aussi l'astuce consistant   fixer l'angle entre deux spins. Dans [48], Kawamura et Miyashita choisissaient le m me super-r seau qu'ici et attribuaient un  l ment de SO_3   trois spins orient s de mani re quelconque, probablement en particulierisant l'un des trois sous-r seaux.   basse temp rature, il est probable que les spins soient localement orient s   120  et que cette m thode soit justifi e. Mais   haute temp rature, les ondes de spin de courte longueur d'onde la rendent inadapt e.
- On s'est limit    des spins coplanaires, afin d'obtenir des flux de 0 ou π . En effet, avec des flux quelconques, le r sultat n'aurait plus uniquement deux valeurs possibles : pr sence ou absence d'un d faut. La pr sence d'un unique vison a bien pour effet



(a) Configuration de référence



(b) Configuration à un vortex

FIG. 3.6 – Lien entre visons et vortex. La configuration de référence 3.6(a) est l'état fondamental d'un Hamiltonien AF sur le réseau triangulaire. Les directions des spins sont représentées par des flèches partant de leur site. Des groupes de spins à 120 degrés sont formés, symbolisés par des triangles pleins et formant un super-réseau. $\psi_0^B = \pi$ dans chaque triangle élémentaire du réseau, $\psi_0^A = 0$ dans chaque losange élémentaire et la vorticit  est nulle dans chaque triangle du super-r seau. Dans la configuration 3.6(b), un vortex se trouve au centre de l'image. Les losanges dont $\psi^A - \psi_0^A = \pi$ sont rep r s par un point bleu et les triangles dont $\psi^B - \psi_0^B = \pi$ par un point vert. Le point rouge est un coeur de vortex. Par composition de boucles, on constate que $\psi^A - \psi_0^A = \pi$ et $\psi^B - \psi_0^B = \pi$ autour de la boucle verte entourant le d faut (nombre impair de points bleus et verts   l'int rieur de la boucle). Il y a   la fois un vison et un vortex.

d'ajouter π au flux, mais les visons ne sont pas les uniques excitations du système. Les autres excitations modifient les modules et les phases des A_{ij} et des B_{ij} , rendant difficile l'identification des visons, tout comme les vortex sont rendus difficiles à identifier à cause des fluctuations de spins.

Pour régler le premier de ces problèmes, on a choisi une configuration où les spins varient spatialement très lentement, excepté proche d'un point. On choisit une grande boucle autour de ce point : la boucle verte de la Fig.3.6(b). On constate la présence d'un vison et d'un vortex sur cette boucle alors que l'on n'avait ni l'un ni l'autre sur la Fig.3.6(a). On a établi l'existence d'un lien, mais pas d'une correspondance parfaite au regard des limitations énumérées.

Finalement, les vortex sont facilement identifiables à basse température car les ondes de spins sont encore de grandes longueurs d'onde. Il en est probablement de même pour les visons. Cette hypothèse nécessiterait une vérification grâce à des simulations numériques à basse températures, avec tous les problèmes qu'entraînent de telles simulations pour des systèmes quantiques.

3 Relaxation de contraintes de symétrie sur les Ansätze

Grâce à l'étude des flux, on a déterminé que pour trouver un Ansatz qui condense dans certains des états réguliers chiraux de la Sec.1, il fallait que des symétries du réseau ne soient pas prises en compte dans la détermination des PSG algébriques.

Par exemple, pour atteindre l'état tétraédrique sur le réseau triangulaire, il faut permettre des flux en A_{ij} de $\pm\pi/3$ sur les losanges. De même, l'état cuboc1 sur kagome possède un flux en A_{ij} de $\pm \arctan(10\sqrt{2}/23)$ sur les hexagones. Certaines symétries par réflexion du réseau transforment ces flux en leurs opposés et donc les modifient (ce qui ne serait pas le cas pour des flux 0 ou π).

Ces états brisent l'invariance par renversement du temps. Nous allons déterminer quelles sont les symétries du réseau qu'ils brisent, puis nous calculerons les PSG qui en découlent, dans l'espoir de trouver que ceux possédant les flux appropriés peuvent condenser dans ces états réguliers.

3.1 Les symétries brisées dans les ordres classiques réguliers

Dans la Sec.1 du Chap.1, nous avons trouvé que chaque état régulier était invariant sous l'action de $G_X X$ avec $X \in S_R$ une symétrie du réseau, et G_X une transformation des spins de O_3 . En SBMFT, les flux sont invariants par une transformation des spins de SO_3 . Si l'on applique G_X à un état SBMFT et que son déterminant est -1 , les flux sont transformés en leurs opposés (c'est la combinaison du renversement du temps $\mathbf{S}_i \rightarrow -\mathbf{S}_i$ et d'une rotation des spins). Une telle transformation ne pourra donc pas être compensée par une transformation de jauge si les flux ne sont pas tous 0 ou π .

Pour tous les ordres coplanaires classiques sur les réseaux triangulaire et kagome, on peut choisir des G_X dans SO_3 pour tout élément X de S_R . Ce n'est pas vrai lorsque l'état est non coplanaire. Par exemple, pour l'ordre tétraédrique du triangulaire, le G_σ associé à la réflexion du réseau σ (représentée Fig.1.4, page 14) change la chiralité de l'état. Par conséquent, G_σ ne peut pas être dans SO_3 . Pour avoir une chance de trouver cet état en SBMFT, il faut chercher les Ansätze issus de PSG algébriques ne prenant pas en compte σ .

Faisons la même étude sur le réseau kagome dont les générateurs des symétries du réseaux sont représentés Fig.1.4. On a trois états non coplanaires sans aimantation globale : l'ordre cuboc1, cuboc2 et octaédrique. Chacun de ces états est chiral. Le G_σ de l'état octaédrique et le G_R de l'état cuboc2 ne sont pas dans SO_3 , mais tous les G_X des autres

générateurs le sont. Pour l'état octaédrique, on se trouve dans le cas précédent : il faut ignorer σ et conserver les trois autres générateurs de S_R . Par contre, pour l'état cuboc2, il ne faut pas oublier que R_6^2 reste une symétrie à conserver puisqu'elle revient dans SO_3 . Pour cet état, il nous reste donc encore 4 générateurs des symétries : T_1, T_2, σ et R_6^2 .

Pour l'état cuboc1, c'est plus compliqué : ni G_σ , ni G_R ne peuvent se trouver dans SO_3 . Cet état va se trouver parmi les Ansätze des PSG prenant en compte les symétries générées par les 4 générateurs : $T_1, T_2, \sigma_2 = R_6\sigma$ et $R_3 = R_6^2$. Si l'on cherchait à obtenir des états spiraux, définis Sec.1.5, il faudrait cette fois se limiter aux générateurs T_1 et T_2 .

En fonction de l'état condensé que l'on recherche, il faut trouver les symétries du réseau respectées par ces états, au sens où leur effet est une rotation globale des spins et déterminer les générateurs de ces symétries. On peut ensuite calculer les PSG algébriques associés. Nous allons maintenant passer à la recherche des PSG algébriques dont les symétries correspondent à celles de l'état condensé tétraédrique manquant sur le réseau triangulaire. Nous vérifierons qu'en effet, dans la limite des grands κ , l'un des PSG algébriques supplémentaires condense avec l'orientation des spins recherchée.

3.2 Relaxation de contraintes sur le réseau triangulaire

Les PSG algébriques sans σ sur le réseau triangulaire

On reprend le raisonnement de la Sec.1.2 où l'on détermine les PSG algébriques sur le réseau triangulaire, sauf qu'ici, on ne prend pas en compte σ . On enlève des équations 3.3, page 94 toutes les lignes où elle intervient. Ces contraintes fournissent les équations suivantes :

$$\begin{aligned} \theta_1(\mathbf{r}) + \theta_2(T_1^{-1}\mathbf{r}) - \theta_1(T_2^{-1}\mathbf{r}) - \theta_2(\mathbf{r}) &= p_1\pi, \\ \theta_R(\mathbf{r}) + \theta_R(R_{\pi/3}\mathbf{r}) + \theta_R(R_{\pi/3}^2\mathbf{r}) + \theta_R(R_{\pi/3}^3\mathbf{r}) + \theta_R(R_{\pi/3}^4\mathbf{r}) + \theta_R(R_{\pi/3}^5\mathbf{r}) &= p_2\pi, \\ \theta_1(\mathbf{r}) + \theta_R(T_1^{-1}\mathbf{r}) + \theta_2(T_2R^{-1}\mathbf{r}) - \theta_R(\mathbf{r}) &= p_3\pi, \\ \theta_R(\mathbf{r}) + \theta_1(R_6^{-1}\mathbf{r}) + \theta_2(T_1^{-1}R^{-1}\mathbf{r}) - \theta_2(\mathbf{r}) - \theta_R(T_2^{-1}\mathbf{r}) &= p_4\pi. \end{aligned}$$

On peut par un choix de jauge adéquat fixer $\theta_1(\mathbf{r}) = 0$ et $\theta_2(0, r_2) = 0$. La résolution des équations mène à

$$\theta_2(\mathbf{r}) = p_1\pi r_1, \quad (3.29)$$

$$\theta_R(\mathbf{r}) = p_3\pi r_1 + p_4\pi r_2 + p_1\pi r_2(r_1 + (r_2 - 1)/2) + k\pi/6, \quad (3.30)$$

avec k un entier de $[0, 5]$.

Un changement de jauge G_J a pour effet sur les $\theta_X(\mathbf{r})$ de leur ajouter la phase $\theta_J(\mathbf{r}) - \theta_J(X(\mathbf{r}))$. Par les changements de jauge $\theta_{J1}(\mathbf{r}) = \pi r_1$ et $\theta_{J2}(\mathbf{r}) = \pi(r_2 - r_1)$, on peut fixer $p_3 = 0$ et $p_4 = 0$, car leur effet sur θ_1 et θ_2 est d'ajouter une constante 0 ou π , ce qui est une transformation de l'IGG, et sur $\theta_R(\mathbf{r})$, de lui ajouter la phase πr_1 ou πr_2 , ce qui ajoute 1 à p_3 ou p_4 .

On obtient finalement 12 PSG algébriques, contre 4 en incluant σ , repérés par p_1 et k . Les 4 obtenus avec σ sont évidemment inclus dans ceux-ci :

$$\theta_1(\mathbf{r}) = 0, \quad \theta_2(\mathbf{r}) = p_1\pi r_1, \quad \theta_R(\mathbf{r}) = p_1\pi r_2(r_1 + (r_2 - 1)/2) + k\pi/6, \quad (3.31)$$

Les Ansätze AF premiers voisins sans σ sur le réseau triangulaire

On cherche maintenant les Ansätze avec uniquement des A_{ij} premiers voisins dont le PSG est inclu dans l'un des 12 PSG algébriques déterminé ci-dessus.

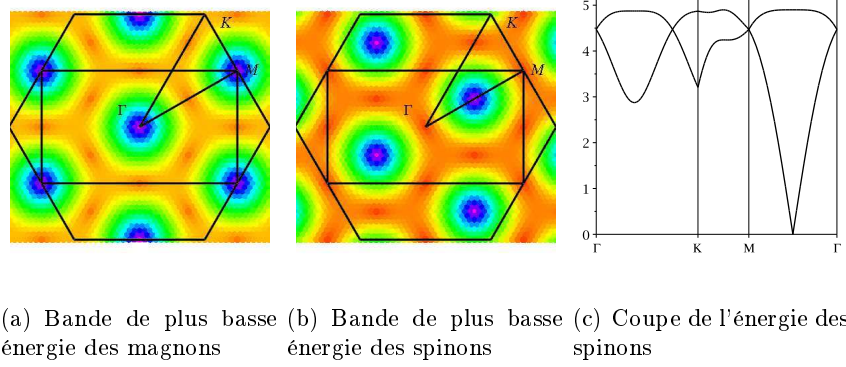


FIG. 3.7 – Ansatz $(\pi/3)$ sur le réseau triangulaire pour $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$.

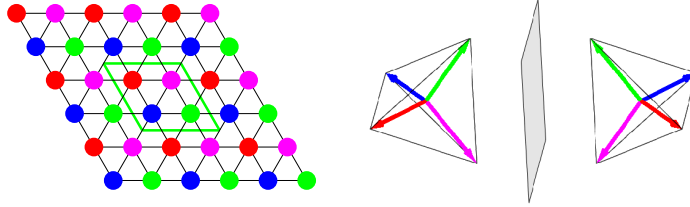


FIG. 3.8 – Etat tétraédrique sur le réseau triangulaire, obtenu en faisant condenser l'Ansatz $(\pm\pi/3)$.

Le lien $(0,0)(-1,0)$ est envoyé par R_6^3 sur $(0,0)(1,0)$ et par T_1 sur le lien opposé $(1,0)(0,0)$. Les A_{ij} de ces deux liens sont déphasés de π , ce qui donne la relation

$$\theta_1(1,0) + \theta_1(0,0) = \theta_R(0,1) + \theta_R(1,1) + \theta_R(0,1) + 3\theta_R(0,0) + \pi, \quad (3.32)$$

impliquant que la parité de k doit être l'opposé de celle de p_1 . Le flux d'un losange est $(p_1 - 2k/3)\pi$ au signe près (qui dépend du point de départ de la boucle et de son sens). Parmi les 6 PSG restants, deux donnent les Ansätze (0) (pour $p_1 = 0$ et $k = 3$) et (π) (pour $p_1 = 1$ et $k = 0$). Les autres donnent des flux $\pm 2\pi/3$ (si $p_1 = 0$ et $k = 2$ ou 4) et $\pm\pi/3$ (si $p_1 = 1$ et $k = 1$ ou 5).

Arrivé à ce stade, on ne peut que remarquer que l'on obtient bien un Ansatz possédant un flux de $\pm\pi/3$, qui est le flux que l'on attend pour un condensat tétraédrique (voir Tab.3.1). Nous allons vérifier que le condensat vérifie nos suppositions.

Le condensat de l'Ansatz $(\pm\pi/3)$ sur le réseau triangulaire

Les Ansätze $(\pm\pi/3)$ ne sont pas fondamentalement différents car ils sont images l'un de l'autre par renversement du temps. On choisit un Hamiltonien AF premiers voisins. La maille de l'Ansatz possède deux sites. Le spectre de spinons et de magnon est représenté Fig.3.7. Les spinons gapless à la limite thermodynamique apparaissent aux points $\mathbf{Q} = (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ et $-\mathbf{Q}$ dans la zone de Brillouin rectangulaire du réseau. Le λ critique est $\lambda_c = -2\sqrt{6}A$. La marche à suivre pour déterminer son aimantation est exactement la même que pour l'Ansatz (0) . On obtient comme unique état condensé l'état tétraédrique de la Fig.3.8, à une rotation globale près, la chiralité dépendant du signe du flux.

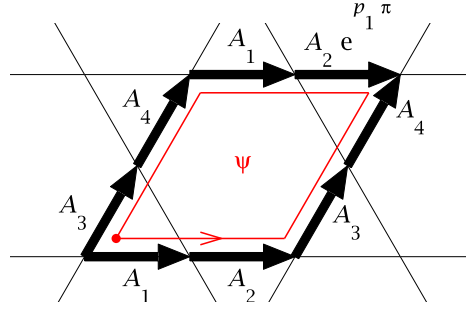


FIG. 3.9 – Flux autour d'un losange à huit côtés sur le réseau kagome. Les A_{ij} des liens images par translation sont obtenus grâce aux transformations de jauge G_1 et G_2 .

3.3 Relaxation de contraintes sur le réseau kagome

On pourrait faire la même chose sur le réseau kagome, pour chacun des ordres recherchés. Cependant, sans se lancer dans de gros calculs, on peut faire quelques remarques générales.

Les translations T_1 et T_2 sont respectées dans tous les ordres réguliers étudiés et on peut choisir $\theta_1(\mathbf{r}) = 0$ et $\theta_2(\mathbf{r}) = p_1\pi$ grâce à un bon choix de jauge. Sur le réseau triangulaire, cela implique que le flux des B_{ij} sur un losange est $p_1\pi$ et ne contraint pas les flux des A_{ij} , mais sur le réseau kagome, cela impose un flux de $p_1\pi$ sur le losange à 8 côtés à la fois pour les A_{ij} et les B_{ij} . Faisons le raisonnement sur la Fig.3.9 pour les A_{ij} . Quatre des A_{ij} sont choisis librement, et les quatre restants sont leurs images par translation. T_1 ne les modifie pas. T_2 ajoute une phase de $p_1\pi$ à l'un d'entre eux. Si l'on calcule le flux du losange, on obtient qu'il est la phase de

$$(-1)^4 A_1 A_2^* A_3 A_4^* (-A_2) e^{p_1\pi} (-A_1)^* (-A_4) (-A_3)^*, \quad (3.33)$$

c'est à dire $p_1\pi$.

Regardons l'état octaédrique pour lequel on oublie σ . R_6 impose que l'hexagone ait un flux des A_{ij} de 0 ou π . En effet, R_6 transforme le flux de l'hexagone en son opposé (on décale le premier point de la boucle d'un cran, $(-1)^6 A_1 A_2^* A_3 A_4^* A_5 A_6^*$ devient $(-1)^6 A_2 A_3^* A_4 A_5^* A_6 A_1^*$) et ne le modifie pas. Pour l'état cuboc2, c'est σ qui impose la même contrainte : σ transforme le flux de l'hexagone en son opposé. Finalement, on a toujours nos flux 0 et π dans les hexagones et les losanges pour les A_{ij} . Si l'on cherche des Ansätze avec uniquement des A_{ij} premiers voisins, ce n'est pas la peine de continuer : on sait que l'on aura le choix entre les 4 Ansätze que l'on avait trouvé lorsque l'on avait pris toutes les symétries.

Par contre, si l'on voulait mettre des B_{ij} premiers voisins, la situation serait différente. Dans les PSG algébriques respectant toutes les symétries du réseau, le flux des B_{ij} sur l'hexagone est $p_1\pi$ (la réflexion change le signe du flux qui ne peut par conséquent être que 0 ou π , ce qui est vérifié ici). D'après le tableau 3.1, l'état octaédrique ne pourrait donc pas être atteint par ces Ansätze. On aurait donc besoin de calculer les PSG algébriques avec des symétries du réseau réduites.

4 Résumé et perspectives

Dans cette section, nous avons d'abord revu la définition et l'utilisation qui avait été faite jusqu'ici des PSG. Les PSG algébriques ont toujours été utilisé en prenant en compte toutes les symétries du réseau et du Hamiltonien, ce qui impose à de nombreux flux de

valoir 0 ou π . Les états condensés ainsi permis sur les réseaux triangulaires et kagome sont principalement coplanaires ou irréguliers. Les états chiraux réguliers sont absents.

En réduisant les symétries prises en compte, certains flux acquièrent une phase non triviale, ce qui est une condition suffisante à l'existence d'une chiralité scalaire $\mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{S}_j \wedge \mathbf{S}_k)$ non nulle dans les condensats et permet de retrouver les états chiraux de la section 1 du Chap.1.

Nous avons justifié cet élargissement des PSG algébriques en partant de la limite classique. En effet, la SBMFT rejoint la physique classique dans la limite $\kappa \rightarrow \infty$. On sait donc que dans cette limite, les Ansätze minimisant l'énergie seront ceux possédant les flux obtenus dans la configuration classique fondamentale.

Si l'on retourne à κ fini mais grand, il va exister un κ éventuellement fini au dessus duquel l'Ansatz d'énergie minimale sera le même que dans la limite classique. Rien n'interdit à ce κ limite d'être inférieur au κ_c de la condensation. Alors, on aura un liquide de spins possédant les mêmes flux que la limite classique.

Ainsi, il se pourrait que l'Ansatz ($\pi/3$) sur le réseau triangulaire nous fournisse un liquide de spin chiral pour un Hamiltonien AF premiers voisins avec échange cyclique à quatre corps car l'état tétraédrique en est un état condensé et c'est le fondamental classique de cette interaction [76]. L'état fondamental de spins 1/2 a été étudié par diagonalisations exactes [69] [70] [59], mais des incertitudes demeurent dans certaines zones du diagramme de phase.

Peu de liquides de spins spontanément chiraux ont été obtenus jusqu'à aujourd'hui dans des modèles de spins [113]. En SBMFT, ils auraient pour caractéristiques des spinons déconfinés et avec un gap, tous comme les liquides de spin non chiraux obtenus par la même approche et partageraient le même groupe d'invariance de jauge ($\text{IGG} = \mathbf{Z}_2$). La dégénérescence d'un fondamental liquide de spin chiral serait le double de celle d'un liquide de spin non chiral [110]. Pour un liquide de spin chiral topologique, on aurait ainsi une dégénérescence égale à deux fois la dégénérescence topologique (2×4 sur un tore pour un liquide $\mathbf{Z}_2$ par exemple).

Après avoir considéré les flux dans les états fondamentaux obtenus par SBMFT, nous nous sommes intéressés aux excitations élémentaires de spin nul : les visons. Ce sont des défauts ponctuels possédant une charge topologique, tout comme les vortex $\mathbf{Z}_2$ rencontrés dans le premier chapitre. Là aussi, le passage du quantique au classique grâce à la SBMFT nous permet d'établir un lien entre ces deux objets, tout comme on est passé de la chiralité d'un état ordonnée aux liquides de spins chiraux.

La SBMFT nous fournit donc une approche simple pour les vortex et la chiralité de systèmes quantiques, objets étudiés dans leur version classique dans le Chap.1. Cette approche a maintenant besoin d'être exploitée pour répondre à certaines des nombreuses questions encore sans réponses sur ces sujets.

Chapitre 4

Application de la SBMFT à l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya sur le réseau kagomé

Le réseau kagomé $S = 1/2$ n'a pas encore livré tous ses secrets : on ne sait toujours pas décrire les propriétés de l'état fondamental du Hamiltonien AF premiers voisins. Si les calculs théoriques ou numériques sont difficiles, on peut penser à s'inspirer des résultats expérimentaux. En effet, plusieurs réseaux kagomé avec $S = 1/2$ ont été synthétisés, comme la Kapellasite, la Volborthite ou l'Herbertsmithite. Ils comportent des couches d'atomes magnétiques formant des réseaux kagomé faiblement couplés. Chacun possède ses particularités (anisotropies, défauts magnétiques, ...), mais un de leurs points communs est la présence de l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya.

Connaissant les symétries d'un composé, on peut éliminer toutes les interactions qui ne les respectent pas. Celles restantes sont obligatoirement présentes, avec une intensité qui dépend de la chimie du composé. Si les liens premiers voisins ne sont pas reliés par une inversion selon leur centre, ce qui est le cas des composés cités, l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya (DM) est présente, comme l'ont montré Elhadj *et al.* [28]. Cette interaction anisotrope, proposée par Dzyaloshinskii [27] pour expliquer l'aimantation globale de composé pourtant antiferromagnétiques, a été justifiée microscopiquement par Moriya [78] à partir du couplage spin-orbite. Son intensité dépend du composé, mais elle est généralement beaucoup plus faible que les interactions Heisenberg.

L'interaction DM se caractérise par un vecteur $\mathbf{D}_{ij}$ sur chaque lien orienté entre plus proches voisins, comportant une composante dans le plan du réseau et une composante perpendiculaire (voir Fig.4.1(a)). Si l'on parcourt le lien dans le sens opposé, ce vecteur est transformé en son opposé : $\mathbf{D}_{ji} = -\mathbf{D}_{ij}$. En présence d'un couplage AF premiers voisins anisotrope, le Hamiltonien s'écrit

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} (J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)). \quad (4.1)$$

Dans ce chapitre, nous allons considérer des vecteurs $\mathbf{D}_{ij}$ tous de même module D et dirigés perpendiculairement au plan du réseau, selon l'axe Oz (on enlève la composante magenta des $\mathbf{D}_{ij}$ de la Fig.4.1(a)). La symétrie par rotation des spins passe ainsi de SU_2 à U_1 (il reste les rotations globales autour de l'axe Oz). Cette approximation est justifiée d'une part par la valeur beaucoup plus importante de la composante perpendiculaire au plan obtenue à partir de résultats expérimentaux sur l'Herbertsmithite [119] et d'autre part, parce qu'on peut se ramener à cette situation par des rotations locales des spins [95], en ne rajoutant que des termes d'ordre D^2 . Bien que faible, l'interaction DM a des effets

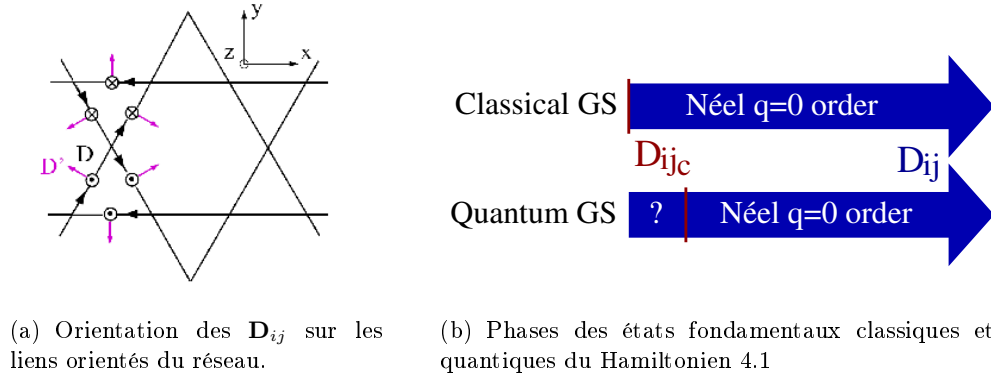


FIG. 4.1 – L'interaction Dzyaloshinskii-Moriya sur le réseau kagome.

importants sur l'état fondamental. Elle brise l'invariance par rotation SU_2 des spins et ainsi, réduit les fluctuations quantiques et défavorise les états liquides de spin. Classiquement, l'ajout d'une interaction DM infinitésimale a pour effet de lever l'immense dégénérescence de l'état fondamental pour ne conserver que les ordres $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ dont les spins sont dans le plan perpendiculaire à $\mathbf{D}_{ij}$ et ont une chiralité fixée [28]. Quantiquement, le système subit une transition de phase en un D critique d'environ $0.1J$ (Fig.4.1(b)), valeur obtenue en diagonalisation exacte par Cepas *et al.* [13]. En dessous de cette valeur, il est encore dans la phase obtenue sans DM. Au dessus, il s'ordonne selon l'ordre $\mathbf{q} = \mathbf{0}$.

En utilisant la méthode des bosons de Schwinger en champ moyen, nous allons obtenir un diagramme de phase pour cette interaction, et calculer des facteurs de structure statiques et dynamiques. Ces quantités, mesurables expérimentalement, pourront renseigner les expérimentateurs sur la présence de l'interaction DM, dont l'intensité dans un composé est difficile à déterminer. En effet, en fonction de la phase (ordre à longue portée ou liquide de spin topologique) et de l'Ansatz dans lesquels on se trouve, elles ont des caractéristiques spécifiques.

Dans une première partie, nous verrons comment la théorie des bosons de Schwinger utilisée dans les chapitres précédents pour des interactions Heisenberg peut être étendue à des Hamiltoniens avec DM. Dans une deuxième section, nous analyserons les résultats : le diagramme de phase et les facteurs de structure obtenus en SBMFT. Enfin, en Sec.3, nous imposerons moins de symétries à l'état fondamental, ce qui ajoutera au diagramme de phases une phase chirale.

1 L'interaction Dzyaloshinskii-Moriya en SBMFT

1.1 Expression du Hamiltonien en fonction des opérateurs bosoniques

Le Hamiltonien 4.1 ne peut pas s'exprimer uniquement en fonction des opérateurs de liens $\hat{A}_{ij}$ définis dans la Sec.1, contrairement au Hamiltonien sans DM. Deux possibilités se présentent alors :

- soit on exprime le Hamiltonien en fonction de deux opérateurs de lien, dont les $\hat{A}_{ij}$, ce qui a été fait par Huh *et al.* [40].
- soit on modifie la définition des $\hat{A}_{ij}$ en les rendant dépendants de l'intensité de l'interaction DM, ce qui permet d'exprimer le Hamiltonien en fonction uniquement de ces nouveaux $\hat{A}_{ij}$ au premier ordre en $|D_{ij}|$ (c'est la technique utilisée dans [62] où elle est en plus combinée à une rotation locale des spins pour la description d'ordres spiraux).

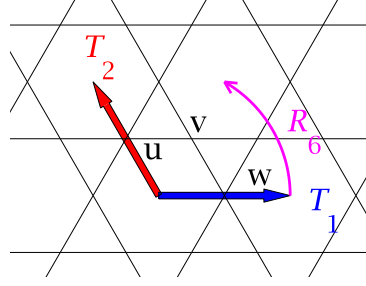


FIG. 4.2 – Symétries du réseau kagome avec DM.

La dernière façon de faire est celle que nous avons choisie car elle présente l'avantage de n'avoir à ajuster qu'un seul paramètre et un seul potentiel chimique, contre deux et un pour la première méthode. Nous allons maintenant la détailler.

Les nouveaux opérateurs de lien

On définit $\theta_{ij} = \mathbf{D}_{ij} \cdot \mathbf{e}_z / 2J$ et $\theta = D/2J$. Ce paramètre donne l'intensité de l'interaction DM. Les opérateurs de lien $\hat{A}_{ij}$ sont définis comme

$$\hat{A}_{ij} = \frac{1}{2} \left(e^{-i\theta_{ij}} a_i b_j - e^{i\theta_{ij}} b_i a_j \right). \quad (4.2)$$

On peut réécrire cet opérateur comme

$$\hat{A}_{ij} = \frac{\cos \theta_{ij}}{2} (a_i b_j - b_i a_j) - \frac{i \sin \theta_{ij}}{2} (a_i b_j + b_i a_j). \quad (4.3)$$

Pour $\theta = 0$, $\hat{A}_{ij}^\dagger$ est le créateur d'un singulet sur le lien ij . Avec $\theta \neq 0$, c'est le créateur d'une superposition d'un singulet et d'un triplet $S^z = 0$.

Le nouvel Hamiltonien

Il est pris égal à

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S^2 - 2\hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \right), \quad (4.4)$$

ce qui permet d'effectuer le même champ moyen que dans la Sec.2 du Chap.2, avec comme principale modification les coefficients des matrices $\mathcal{A}_{\mathbf{q}}$ de l'équation 2.48 page 70 sont maintenant

$$(\mathcal{A}_{\mathbf{q}})_{ij} = \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} e^{i\theta(\mathbf{0},i)(\mathbf{x},j)} A_{(\mathbf{0},i)(\mathbf{x},j)}. \quad (4.5)$$

Le Hamiltonien 4.4 n'est pas rigoureusement identique au Hamiltonien 4.1, mais se réexprime en fonction des opérateurs de spin comme

$$H = \frac{\cos^2(\theta)}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\vec{S}_i \vec{S}_j + 2 \tan \theta_{ij} (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) \cdot \vec{e}_z + \tan^2 \theta_{ij} (2S_i^z S_j^z - \vec{S}_i \vec{S}_j) \right) \quad (4.6)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S_i^z S_j^z + \frac{e^{2i\theta_{ij}}}{2} S_i^+ S_j^- + \frac{e^{-2i\theta_{ij}}}{2} S_i^- S_j^+ \right), \quad (4.7)$$

qui n'est différent qu'au deuxième ordre en θ . Cette différence n'est pas importante, car d'autres termes d'interaction du même ordre de grandeur ont déjà été négligés dans le

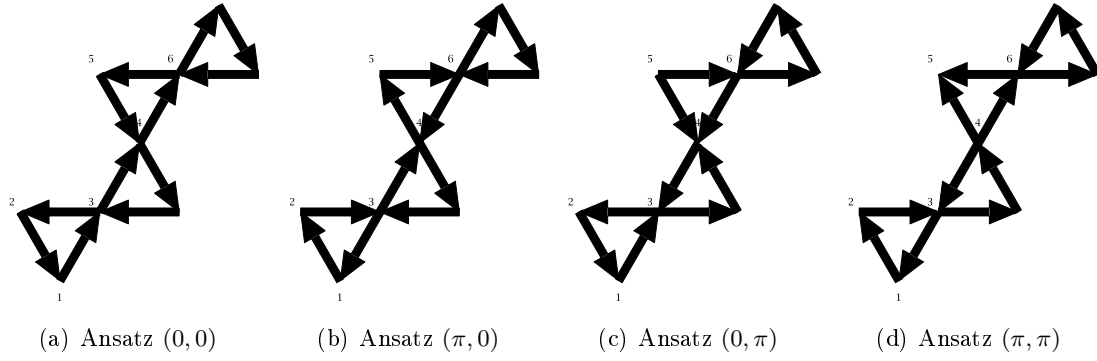


FIG. 4.3 – Les quatre Ansätze respectant les symétries du réseau kagome avec DM. Les liens orientés indiqués possèdent tous le même A_{ij} réel positif, noté A . Tous les sites ont le même λ . Un Ansatz est repéré par deux flux : celui d'un hexagone et celui d'un losange à huit liens.

Hamiltonien 4.1. Les valeurs de θ qui nous intéressent sont donc petites et la périodicité de 2π du Hamiltonian n'a que peu d'intérêt. Cependant, cette périodicité a été étudiée en annexe C.4 et révèle une périodicité de l'énergie du fondamental plus grande : $\pi/3$ en θ , qui s'explique grâce à des rotations locales des spins.

1.2 Les Ansätze respectant les symétries du réseau

Grâce au formalisme des PSG (Sec.1), on peut sélectionner les Ansätze respectant les symétries spatiales du système. Celles-ci sont générées par les trois transformations de la Fig.4.2 : les deux translations T_1 et T_2 , et la rotation de $\pi/3$ notée R_6 . La réflexion σ qui avait été prise en compte lorsque l'on n'avait pas DM ne l'est plus. Cette suppression de σ peut se visualiser sur l'état classique fondamental : $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. Les spins sont confinés dans un plan perpendiculaire à $\mathbf{D}_{ij}$ et forment des angles de 120° les uns avec les autres. Des deux chiralités vectorielles $(\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)$ possibles sur un lien donné, l'une est énergétiquement plus favorable que l'autre. La réflexion σ envoie un fondamental vers un état de chiralité opposée, donc d'énergie plus élevée.

On obtient quatre Ansätze : $(0,0)$, $(\pi,0)$, $(0,\pi)$ et (π,π) , identiques à ceux que l'on avait obtenus en incluant σ , page 95. Ils sont représentés sur la Fig.4.3. En effet, on peut facilement vérifier qu'aucun Ansatz supplémentaire n'est possible : les translations imposent un flux de 0 ou π pour le losange à huit liens, comme on l'a vu page 112, et la rotation impose les mêmes possibilités sur l'hexagone.

2 Résultats

2.1 Le diagramme de phases

Pour chacun de ces quatre Ansätze, on peut à présent résoudre les équations de champ moyen. Deux paramètres ont à être ajustés : le potentiel chimique λ , identique sur tous les sites et A , le module des A_{ij} , identique sur tous les liens. Cela nous donne une énergie fonction de θ , représentée Fig.4.4 pour différentes valeurs de κ (identifié à $2S$). En fonction de la valeur de κ et de θ , on sélectionne l'Ansatz d'énergie minimale, ce qui permet de dessiner le diagramme de phases de la Fig.4.5. Les traits pointillés sont des résultats obtenus en développant l'énergie des quatre Ansätze à l'ordre 8 en puissances de S , à la façon de Tchernyshyov [99] (calculs en Ann.C.3).

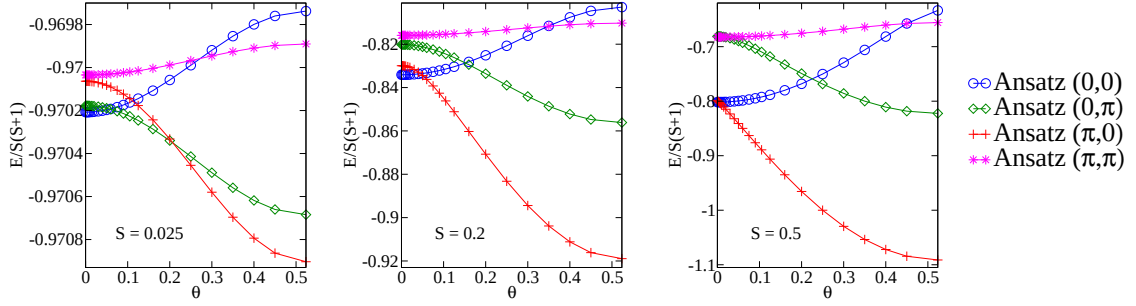


FIG. 4.4 – Energie du fondamental sur le réseau kagome avec DM en SBMFT pour les quatre Ansätze symétriques.

Certaines portions de ce diagramme de phases sont bien connues. La limite $S \rightarrow \infty$ donne l'Ansatz $(\pi, 0)$ (en rouge) comme fondamental dès que $\theta > 0$, ce qui est le cas dans la limite classique puisqu'on retrouve l'état ordonné $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$. En $\theta = 0$ et $S \rightarrow \infty$, les deux Ansätze $(0, 0)$ et $(\pi, 0)$ sont dégénérés, tous comme les deux configurations classiques correspondantes : les ordres $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ et $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. La ligne du diagramme $\theta = 0$ a été étudié par Sachdev [92] et par Wang et Vishwanath [108], qui trouvent eux aussi que l'Ansatz $(0, 0)$ est le fondamental, avec un spin critique $S_c = 0.27$.

Trois des quatre Ansätze symétriques sont des états fondamentaux dans certaines zones du diagramme. L'Ansatz (π, π) n'y apparaît pas. L'Ansatz $(0, \pi)$ (en vert) est présent à bas spin et donne une phase liquide de spin topologique (TSL). Les deux autres Ansätze (en rouge et bleu) sont d'énergie minimale sur une large gamme de spin. A bas spin, ils donnent aussi une phase TSL, et à grand spin, une phase ordonnée à longue portée (LRO) : $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ pour l'Ansatz $(0, 0)$ et $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ pour le $(\pi, 0)$.

On remarque que pour $S = 0.5$ ($\kappa = 1$), l'état fondamental est LRO, quel que soit la valeur de θ . De plus, la transition entre l'Ansatz $(0, 0)$ et le (π, π) se produit pour $\theta \simeq 0.01$, ce qui est cinq fois plus faible que la valeur trouvée par Cepas *et al.* [13] à partir de diagonalisations exactes. Il semble que la valeur de κ choisie nous donne un état plus proche de la limite classique que celui qui nous intéresse : celui de spin $1/2$. Ceci se comprend qualitativement grâce au contenu de la Sec.2.6 du Chap.2, page 75. Si la valeur moyenne du nombre de bosons sur chaque site est bien de $2S = 1$, en revanche, les corrélations spin-spin sont surestimées en raison des fluctuations du nombre de bosons, ainsi que d'autres quantités de degrés supérieurs en S . Pour les réajuster, il faudrait diminuer κ (mais de combien : cela reste arbitraire). Dans ce qui suit, on a choisi $\kappa = 0.4$, soit un spin effectif $S = 0.2$, ce qui permet d'obtenir un θ_c correspondant aux résultats de [13], ainsi qu'une phase désordonnée à $\theta = 0$ (voir Fig.4.5).

On remarque que le spin critique S_c entre les phases TSL et LRO évolue en fonction de θ . Par exemple, il décroît pour l'Ansatz $(\pi, 0)$ (rouge) lorsque θ augmente, ce que nous allons comprendre qualitativement dans le paragraphe suivant à partir des spectres de spinons.

2.2 Les spectres de spinon

Les spinons sont les excitations élémentaires de la théorie de champ moyen, introduites en Sec.2.4 du Chap.2, page 72. Comme la maille élémentaire comporte trois ou six sites selon l'Ansatz, on a six ou douze bandes d'énergie dans l'espace réciproque (le facteur 2 provient de la présence d'un boson $\uparrow$ et $\downarrow$ dans chaque bande). Elles sont représentées en

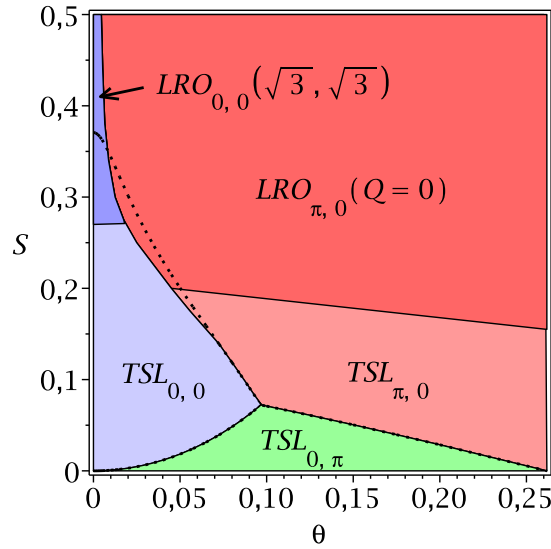


FIG. 4.5 – Diagramme de phases du réseau kagome AF avec DM en SBMFT obtenu en sélectionnant l'énergie minimale parmi celles des quatre Ansätze symétriques. Les traits pointillés sont obtenus par un développement de l'énergie des 4 Ansätze en puissances de S à l'ordre 8.

Fig.4.6 pour les Ansätze $(0,0)$ et $(\pi,0)$, pour $S = 0.2$ et $\theta = 0$ et $\neq 0$.

L'effet d'un $\theta \neq 0$ est de briser l'invariance par rotation des spins, donc, de lever certaines dégénérescences, ce qui est le cas pour l'Ansatz $(0,0)$ en $\mathbf{q} = \mathbf{K}$, ainsi que pour l'Ansatz $(\pi,0)$ sur toute la ZdB pour les quatre bandes les plus basses. Dans ce dernier cas, on remarque que le spinon d'énergie la plus basse passe d'une dégénérescence 4 à 2 et que l'écart entre les deux bandes anciennement dégénérées au point mou évolue en $\sqrt{\theta}$ (résultat numérique).

2.3 Les facteurs de structure

Les facteurs de structure statiques et dynamiques sont des quantités accessibles expérimentalement. Elles ont été définies en Sec.3.4 du Chap.2 et les effets de l'ordre à longue portée y ont été détaillés. Jusque là, l'ordre à longue portée a plutôt été une conséquence

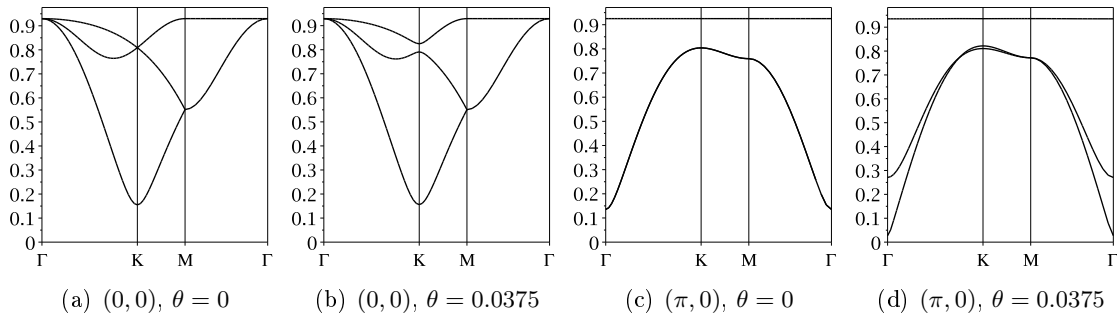


FIG. 4.6 – Spectres de spinons avec DM en SBMFT pour $S = 0.2$. Les spectres des Ansätze $(0,0)$ et $\pi,0$, apparaissant principalement sur le diagramme de phases 4.5 sont représentés, chacun pour $\theta = 0$ et $\theta > 0$.

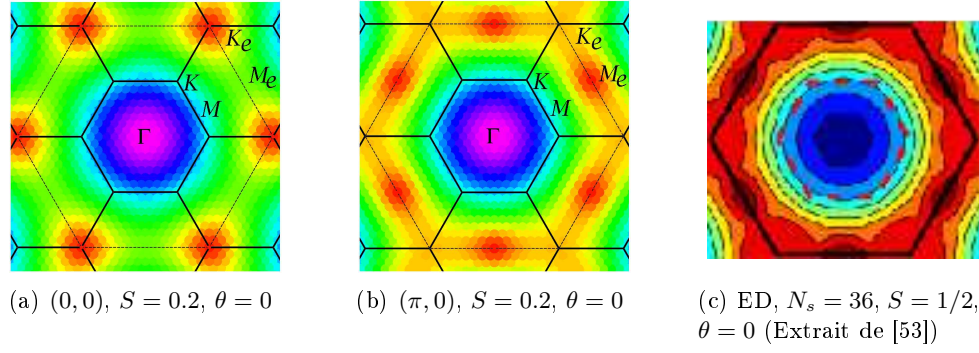


FIG. 4.7 – Comparaison de trois facteurs de structure statiques obtenus par SBMFT ou par ED. Les deux derniers sont très similaires.

de la grande taille du spin. Avec l'interaction DM, en se plaçant à $\kappa = 0.4$ fixé, on peut passer d'un TSL à une phase ordonnée en faisant varier la force de l'interaction θ . Avec les facteurs de structure, on dispose d'observables dont le comportement change radicalement selon la situation de θ par rapport à un θ_c critique.

La description des facteurs de structures statiques et dynamiques est faite dans l'article [66] (reproduit dans la section suivante) auquel nous renvoyons le lecteur pour les figures, la discussion étant principalement celle de la Sec.3.4 du Chap.2, page 86.

La comparaison des trois facteurs de structure statiques suivants est instructive (Fig.4.7) :

- celui de l'Ansatz $(0,0)$ pour $S = 0.2$ et $\theta = 0$,
- celui de l'Ansatz $(\pi,0)$ pour les mêmes paramètres,
- celui obtenu par Laüchli *et al.* dans [53] en diagonalisation exacte (ED) sur un kagome AF de 36 sites.

En SBMFT, c'est l'Ansatz $(0,0)$ qui possède l'énergie minimale en $S = 0.2$ et $\theta = 0$. Pourtant, le facteur de structure obtenu par ED possède des maxima en M_e : les milieux de côtés de la ZdBE, comme c'est le cas pour celui de l'Ansatz $(\pi,0)$. Bien que la position des maxima en ED puisse évoluer avec la taille du système, cette constatation rend l'Ansatz $(\pi,0)$ intéressant même pour de petits θ , bien que son énergie soit plus élevée que celle de l'Ansatz $(0,0)$. De plus, des calculs de DMRG (density matrix renormalisation group) sur des tailles légèrement plus grandes qu'en ED ($N_s = 108$, [46]) donnent un maxima du facteur de structure statique aux mêmes points M_e .

3 Elargissement des PSG à des liquides de spins chiraux

Dans ce qui précède, nous nous sommes limités aux Ansätze qui respectaient les symétries spatiales du Hamiltonien avec DM, c'est à dire qu'aucune observable physique n'était modifiée par une symétrie du réseau, ou encore qu'une opération de symétrie du réseau pouvait se compenser par une transformation de jauge.

Nous allons maintenant affaiblir ces définitions du respect des symétries spatiales : elles seront respectées si elles peuvent se compenser par une transformation de jauge et/ou par une inversion du temps T (qui se traduit par une conjugaison complexe des variables de lien A_{ij}). La symétrie par renversement du temps correspond classiquement à la transformation géométrique par inversion des spins, que l'on a pris en compte dans le chapitre classique de la thèse au même titre qu'une rotation (on a choisi $S_S = O_3$ et non SO_3), mais que l'on n'avait pas prise en compte dans les calculs de PSG précédents. Nous aurons donc des Ansätze supplémentaires.

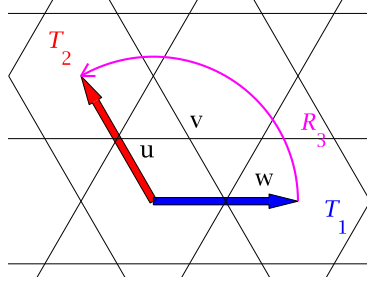


FIG. 4.8 – Symétries réduites du réseau kagome avec DM.

Tout d'abord, nous allons déterminer les nouveaux Ansätze symétriques. Puis, nous utiliserons un développement à bas spin, qui nous permettra de faire des calculs analytiques valables dans la limite $\kappa \rightarrow 0$. Nous verrons que des phases chirales sont présentes sur le diagramme de phases, qui est donc différent de celui calculé dans la section précédente. Puis nous passerons aux calculs numériques en taille finie, où l'on retrouvera ces phases chirales, qui disparaissent au delà d'un κ limite. Enfin, nous calculerons les spectres de spinons et la chiralité dans ces états.

3.1 Détermination des Ansätze symétriques modulo T

PSG algébriques

On ne sait pas calculer de façon simple les PSG algébriques avec cette convention. Mais dans notre situation, on peut s'en sortir en calculant les PSG algébriques pour le sous-groupe des symétries spatiales respectant obligatoirement T . Comme ces PSG algébriques ne sont pas trop nombreux et comme on cherche des Ansätze simples (uniquement des A_{ij} premiers voisins), on pourra sélectionner ensuite seulement les Ansätze respectant toutes les symétries du réseau, y compris celles ne respectant pas T au milieu de cet ensemble plus large d'Ansätze.

La rotation R_6 doit être compensée par une transformation de jauge, éventuellement composée avec le renversement du temps T , mais quelle que soit la situation (avec ou sans T), R_6^2 sera compensée uniquement par une transformation de jauge et peut donc être prise en compte dans la détermination des PSG algébriques.

Par le même type d'argument, on peut trouver que les translations T_1 et T_2 doivent aussi respecter la symétrie par renversement du temps. Supposons le contraire. Comme $T_1 = R_6^{-1}T_2R_6$, T_1^2 et T_2^2 doivent toutes deux briser T . Or, la translation $T_1T_2^{-1}$ doit respecter T en tant que composée de deux transformation inversant le temps... mais elle ne doit pas la respecter car elle est aussi égale à $R_6^{-1}T_1R_6$. On aboutit à une contradiction.

Finalement, nous allons chercher un grand ensemble de PSG algébriques : ceux obtenus selon l'ancienne définition du respect des symétries, avec les symétries du réseau générées par T_1 , T_2 et $R_6^2 = R_3$ (voir Fig4.8).

La suite de ce paragraphe consiste essentiellement en le calcul des PSG algébriques compatibles avec ces symétries, menant aux Eq.4.13.

On choisit un repère de centre 0 le centre d'un hexagone, et deux axes à 120 degrés, $\vec{T}_1$ et $\vec{T}_2$, pointant vers le centre de deux hexagones voisins, de coordonnées $\vec{T}_1 = (2a, 0)$ et $\vec{T}_2 = (-a, a\sqrt{3})$, où a est la distance entre plus proches voisins (voir Fig4.8). Les transformations du réseau sont engendrées par deux translations T_1 et T_2 et une rotation

$R_{2\pi/3}$.

$$\begin{aligned}
 T_1 : (r_1, r_2)_u &\rightarrow (r_1 + 1, r_2)_u \\
 (r_1, r_2)_v &\rightarrow (r_1 + 1, r_2)_v \\
 (r_1, r_2)_w &\rightarrow (r_1 + 1, r_2)_w \\
 T_2 : (r_1, r_2)_u &\rightarrow (r_1, r_2 + 1)_u \\
 (r_1, r_2)_v &\rightarrow (r_1, r_2 + 1)_v \\
 (r_1, r_2)_w &\rightarrow (r_1, r_2 + 1)_w \\
 R_{2\pi/3} : (r_1, r_2)_u &\rightarrow (-r_2 - 1, r_1 - r_2 - 1)_v \\
 (r_1, r_2)_v &\rightarrow (-r_2 - 1, r_1 - r_2)_u \\
 (r_1, r_2)_w &\rightarrow (-r_2, r_1 - r_2 + 1)_w
 \end{aligned}$$

Ces transformations ont les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned}
 T_1 T_2 &= T_2 T_1 \\
 R_{2\pi/3}^3 &= I \\
 R_{2\pi/3} T_1 &= T_2 R_{2\pi/3} \\
 T_1 T_2 R_{2\pi/3} T_2 &= R_{2\pi/3}
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

Les contraintes sur les transformations de jauge qui en découlent sont :

$$\begin{aligned}
 T_1 T_2 = T_2 T_1 &\Leftrightarrow G_1 T_1 G_2 T_2 T_1^{-1} G_1^{-1} T_2^{-1} G_2^{-1} \in IGG \\
 &\Leftrightarrow \phi_1(r) + \phi_2(T_1^{-1}r) - \phi_1(T_2^{-1}r) - \phi_2(r) = p_1\pi
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

$$\begin{aligned}
 R_{2\pi/3}^3 = I &\Leftrightarrow G_R R_{2\pi/3} G_R R_{2\pi/3} G_R R_{2\pi/3} \in IGG \\
 &\Leftrightarrow \phi_R(r) + \phi_R(R_{\pi/3}r) + \phi_R(R_{\pi/3}^2r) = p_2\pi
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

$$\begin{aligned}
 R_{2\pi/3} T_1 = T_2 R_{2\pi/3} &\Leftrightarrow G_R R_{2\pi/3} G_1 T_1 R_{2\pi/3}^{-1} G_R^{-1} T_2^{-1} G_2^{-1} \in IGG \\
 &\Leftrightarrow \phi_R(r) + \phi_1(R_{2\pi/3}^{-1}r) - \phi_R(T_2^{-1}r) - \phi_2(r) = p_4\pi
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

$$\begin{aligned}
 T_1 T_2 R_{2\pi/3} T_2 = R_{2\pi/3} &\Leftrightarrow G_1 T_1 G_2 T_2 G_R R_{2\pi/3} G_2 T_2 R_{2\pi/3}^{-1} G_R^{-1} \in IGG \\
 &\Leftrightarrow \phi_1(r) + \phi_2(T_1^{-1}r) + \phi_R(T_2^{-1} T_1^{-1}r) + \phi_2(T_2 R_{2\pi/3}^{-1}r) - \phi_R(r) = p_5\pi
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Après quelques calculs et simplifications utilisant des changements de jauge, on arrive aux PSG algébriques suivants :

$$\begin{aligned}
 \phi_1(x, y, i) &= 0 \\
 \phi_2(x, y, i) &= p_1\pi x \\
 \phi_R(x, y, i) &= p_1\pi \left(xy - \frac{x(x+1)}{2} - x\delta_{iw} \right),
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

avec $p_1 = 0$ ou 1 , distinguant deux familles de PSG ayant des flux de 0 et π autour des losanges à 8 côtés.

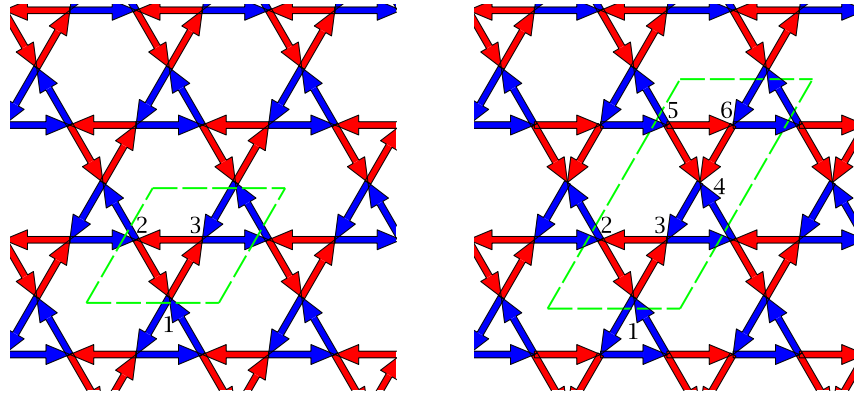


FIG. 4.9 – Les deux continuum d'Ansätze (à des transformations de jauge près) respectant les symétries de la Fig.4.8. Les flèches rouges ont un A_{ij} égal à A_1 , réel positif, les flèches bleues, à un A_2 complexe (de phase $\phi/3$). A gauche, l'Ansätze correspond au PSG de l'équation 4.13 obtenu pour $p_1 = 0$ et possède un flux de 0 autour d'un losange à huit côtés. A droite, $p_1 = 1$ et le flux d'un losange à huit côtés est de π . Dans chacun de ces Ansätze, le flux de l'hexagone dépend de l'argument de A_2 et peut prendre n'importe quelle valeur.

Ansätze compatibles avec les PSG algébriques

On cherche maintenant les Ansätze comportant des A_{ij} premiers voisins compatibles avec les PSG algébriques des Eq.4.13. On a besoin de deux A_{ij} indépendants pour déterminer tous les A_{ij} du réseau à partir d'un PSG algébrique car deux liens suffisent à générer le réseau entier à partir des symétries T_1 , T_2 et R_3 . L'un des deux, désigné par A_1 , peut être choisi réel positif par un choix de jauge approprié. Le deuxième, appelé A_2 , possède un argument quelconque ϕ . Il nous reste deux continuum d'Ansätze, caractérisés par $p_1 = 0$ ou 1 et ϕ , l'argument de A_2 , représentés sur la Fig.4.9.

Il ne faut pas oublier que certaines symétries ont été négligées jusque là et éliminer les Ansätze ne les respectant pas. La symétrie R_6 n'a pas été prise en compte. La contrainte supplémentaire qui en découle est $|A_1| = |A_2|$. Si $A_2 = A_1$, alors, on retrouve les Ansätze $(\pi, 0)$ pour $p_1 = 0$ et $(0, \pi)$ pour $p_1 = 1$. Si $A_2 = -A_1$, on a les Ansätze $(0, 0)$ pour $p_1 = 0$ et (π, π) pour $p_1 = 1$. Le flux de l'hexagone peut prendre toutes les valeurs possibles dans chacun des deux continuum d'Ansätze lorsque l'argument de A_2 varie.

3.2 Calcul de l'énergie grâce au développement en puissances de κ

A θ et S fixé, on peut calculer l'énergie de ces deux Ansätze à l'ordre 8 en S en fonction de ϕ , le flux de l'hexagone, en fixant $|A_1| = |A_2|$, grâce au développement de Tchernyshyov [99] adapté à la présence de l'interaction DM et effectué jusqu'à l'ordre 8 (les calculs se trouvent en Ann.C.3, le développement est écrit en Eq.C.19, page 157). Ce calcul utilise la matrice d'adjacence d'un réseau kagome pour trouver les flux de toutes les boucles de longueur allant jusqu'à 16 liens (car on est à l'ordre 8 en S). Pour que l'énergie soit celle du réseau infini, il suffit donc de prendre un réseau assez grand pour que les boucles de longueur 16 ne puisse pas en faire le tour. Cette méthode, très fiable à bas spin, permet d'avoir une première idée du diagramme de phase et de corroborer les résultats numérique que nous donnons dans le paragraphe précédent.

En Fig.4.10 est représentée l'évolution de l'énergie du fondamental en fonction de ϕ , le flux de l'hexagone, pour différentes valeurs de θ et S telles que toutes les situations rencon-

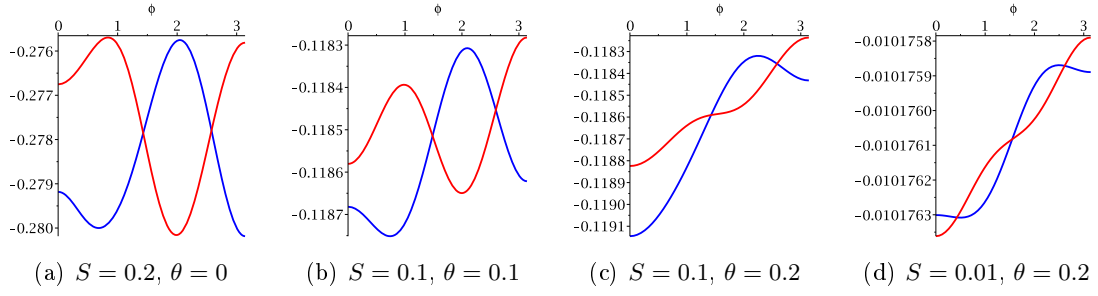


FIG. 4.10 – Energie du développement de Tchernyshyov pour les Ansätze $(\phi, 0)$ (en bleu) et (ϕ, π) (en rouge). Quatre situations se rencontrent lorsque l'on fait varier S et θ , qui donneront quatre zones sur le diagramme de phases : de gauche à droite, les flux des états fondamentaux sont $(0, 0)$, $(\phi \neq 0, 0)$, $(\pi, 0)$ et $(0, \pi)$.

trées lors de la construction du diagramme de phases soient présentes : état fondamental de flux $(0, 0)$, $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ ou $(\phi \neq 0[\pi], 0)$. On a donc quatre zones sur le diagramme de phase représenté en Fig.4.11. Les frontières entre ces zones correspondent toutes à des transitions du premier ordre, excepté celle entre la zone jaune et rouge, c'est à dire entre les phases $(\phi \neq 0[\pi], 0)$ et $(\pi, 0)$, où la transition est continue.

3.3 Résultats numériques

Le diagramme de phases obtenu numériquement est en Fig.4.11, avec les résultats du développement à bas spin. L'accord à bas spin est excellent, mais pour $S > 0.2$, les états chiraux (jaune) disparaissent des résultats numériques.

Le spectre de spinons et de magnons dans la phase chirale pour $\lambda = \lambda_c$ est représenté Fig.4.12. Les minima du spectre de spinons ne se trouvent pas en des points de haute symétrie de la zone de Brillouin, mais en des vecteurs d'onde incommensurables : ce sont des points des lignes ΓK .

La nouvelle phase est appelée chirale parce qu'elle brise l'invariance par renversement du temps : elle possède des flux différents de 0 et π . On est tenté d'appliquer les formules sur les flux provenant du Chap.3, mais il ne faut pas oublier que celles-ci ne sont plus valables : l'opérateur A_{ij} fait maintenant intervenir θ_{ij} . Calculons la chiralité sur un triangle en différents points du diagramme de phase :

$$\sigma_{ijk} = |(\mathbf{S}_i \wedge \mathbf{S}_j) \cdot \mathbf{S}_k|. \quad (4.14)$$

Les résultats sont donnés en Fig.4.13. Selon le spin, on peut rencontrer zéro, une, ou deux discontinuités dans la chiralité fonction de θ .

3.4 Conclusion

Dans cette section, nous avons vu que certains états fondamentaux en SBMFT pouvaient ne pas respecter toutes les symétries du réseau. Pour arriver à cette conclusion, nous avons élargi l'espace des Ansätze possibles, en ne leur imposant pas de respecter autant de symétries qu'avant. L'élargissement consenti est assez faible : l'espace des Ansätze sans aucune contrainte est immense et ne se laisse pas explorer facilement, à moins de se limiter à de petits réseaux, mais c'est une première étape qui a été franchie, avec l'apparition de phases chirales dans le diagramme de phase SBMFT, survivant éventuellement au delà du champ moyen.

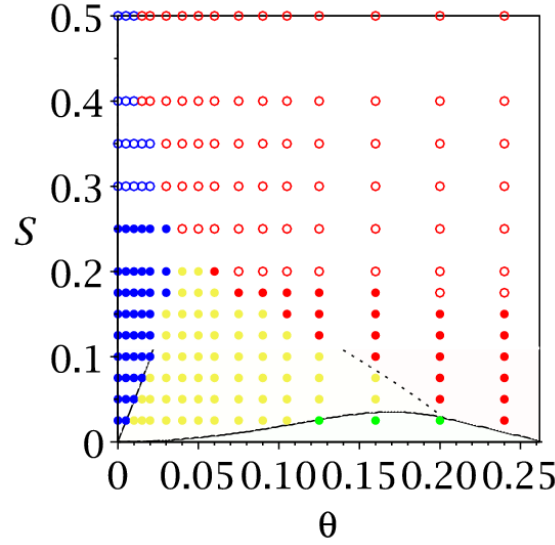


FIG. 4.11 – Diagramme de phases pour les Ansätze $(\phi, 0)$ et (ϕ, π) sur kagome avec DM. En bleu, l'Ansatz $(0, 0)$, en rouge le $(\pi, 0)$, en vert le $(0, \pi)$ et en jaune, le nouveau domaine, chiral, qui brise T : l'Ansatz $(\phi, 0)$ avec $0 < \phi < \pi$. Les traits sont les frontières entre les différentes phases obtenues à partir de l'énergie du développement de Tchernyshyov. Les lignes continues sont des transitions du premier ordre, la ligne pointillée est une transition continue. Les points sont les résultats numériques. Les points vides sont ceux de phases ordonnées, les points remplis, de phases gappées. La correspondance entre les résultats provenant des simulations numériques et ceux provenant du développement est très bonne pour $S < \sim 0.15$.

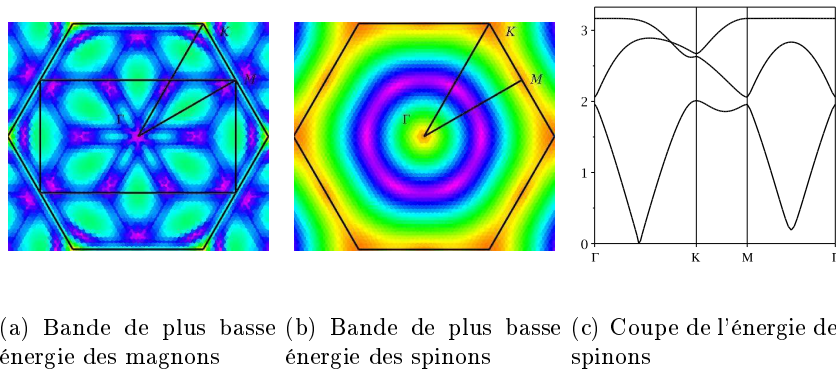


FIG. 4.12 – Spectre de spinons et de magnons de l'état chiral. $A = 1$, $\lambda = \lambda_c$ et $\phi = \pi/2$. Ces valeurs ne correspondent à aucun point du diagramme de phases, mais permettent de dégager les caractéristiques de ce type d'Ansatz.

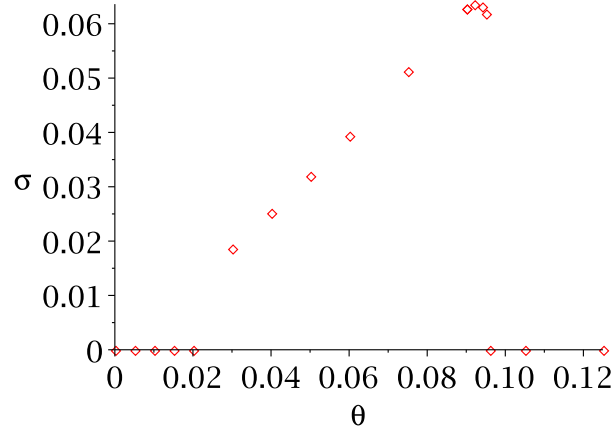


FIG. 4.13 – Chiralité σ des états fondamentaux en SBMFT pour $S=0.15$. Elle n'est non nulle que dans la phase chirale, correspondant à la zone jaune du diagramme en Fig.4.11. Vers $\theta = 0.02$, il y a une discontinuité due à une transition du premier ordre. Vers $\theta = 0.95$, la chiralité passe continûment à 0.

Cépas *et al.* [13] ont déterminé un θ critique en dessous duquel il n'y a pas d'ordre à longue portée dans le système de spins 1/2 (Fig.4.1(b)). Mais la nature de cette phase est encore inconnue, tout comme celle au point $\theta = 0$. Ce point serait bien décrit par une approche fermionique, mais alors, l'extension à des valeurs de θ non nulles serait difficile [37] [84]. La phase chirale trouvée ci-dessus offre une nouvelle possibilité pour remplir ce vide.

4 Article

[1] *Schwinger-boson approach to the kagome with Dzyaloshinskii-Moriya interactions : phase diagram and dynamical structure factors*,
L. Messio, O. Cepas and C. Lhuillier,
Phys. Rev. B, 81, 064428 (2010).

Schwinger-boson approach to the kagome antiferromagnet with Dzyaloshinskii-Moriya interactions: Phase diagram and dynamical structure factors

L. Messio,¹ O. Cépas,² and C. Lhuillier¹¹*Laboratoire de physique théorique de la matière condensée, UMR 7600 CNRS, Université Pierre-et-Marie-Curie-Paris 6, 75252 Paris Cedex 05, France*²*Institut Néel, CNRS et Université Joseph Fourier, BP 166, F-38042 Grenoble Cedex 9, France*

(Received 14 December 2009; revised manuscript received 4 February 2010; published 24 February 2010)

We have obtained the zero-temperature phase diagram of the kagomé antiferromagnet with Dzyaloshinskii-Moriya interactions in Schwinger-boson mean-field theory. We find quantum phase transitions (first or second order) between different topological spin-liquid and Néel-ordered phases (either the $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ state or the so-called $\mathbf{Q}=0$ state). In the regime of small Schwinger-boson density, the results bear some resemblances with exact diagonalization results and we briefly discuss some issues of the mean-field treatment. We calculate the equal-time structure factor (and its angular average to allow for a direct comparison with experiments on powder samples), which extends earlier work on the classical kagomé to the quantum regime. We also discuss the dynamical structure factors of the topological spin-liquid and the Néel-ordered phases.

DOI: [10.1103/PhysRevB.81.064428](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.81.064428)

PACS number(s): 75.10.Jm, 75.40.Mg, 75.50.Ee

I. INTRODUCTION

The Dzyaloshinskii-Moriya (DM) interactions¹ are inevitably present in $S=1/2$ magnetic oxides when the magnetic bonds lack inversion centers, which is the case of the kagome lattice. Although small in strength (it originates in the spin-orbit coupling), such a correction may favor other phases than the ones usually predicted by using the standard Heisenberg model. By breaking explicitly the spin-rotation symmetry of the system, the Dzyaloshinskii-Moriya forces tend to reduce the spin fluctuations and may therefore be detrimental to the long-sought spin-liquid phases. However, would the Heisenberg phase be gapped, such as in valence bond crystals (generalized spin-Peierls states) or in topological spin liquids (TSLs),²⁻⁴ then it would be robust against perturbations typically smaller than the gap. An example is given by the Shastry-Sutherland compound $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ which remains in the singlet phase in the presence of Dzyaloshinskii-Moriya couplings.⁵ In the kagome antiferromagnet (with pure nearest-neighbor Heisenberg interaction), the very existence of a gap remains an open question,⁶ algebraic spin-liquid and gapless vortex phases have been proposed as alternatives in the recent years.⁷⁻⁹ Current numerical estimates of the gap provide a small upper bound $\sim 0.05J$.^{6,10-13} In any case the gap (if it exists) could be smaller than the Dzyaloshinskii-Moriya coupling (especially in copper oxides where it is typically $\sim 0.1J$) and the latter is therefore particularly relevant. Experiments on the kagome compound $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_3$ (Refs. 14–17) have found no spin gap (despite a temperature much lower than the upper estimation of the gap) but the chemical disorder¹⁸⁻²⁰ and, precisely, the existence of Dzyaloshinskii-Moriya interactions²¹⁻²⁴ make the spin gap issue not yet clear.

In fact, the Dzyaloshinskii-Moriya interactions were argued to induce long range $\mathbf{Q}=0$, 120° Néel order in the kagome antiferromagnet: the algebraic spin-liquid theory predicts the instability at a critical strength $D_c=0$ (Ref. 25) while there is a finite quantum critical point at $D_c \sim 0.1J$ in

exact diagonalization results on samples of size up to $N=36$.²³ Since it is clear that there is no Néel order at D strictly zero^{10,26} and there is Néel order for D large enough,²³ it is tempting to tackle the problem using the Schwinger-boson representation for the spin operators.²⁷ Indeed this approach allows in principle to capture both topological spin-liquid and Néel-ordered phases²⁸ and offers a first framework to describe this quantum phase transition. The caveat is that the actual Schwinger-boson mean-field solution for the $S=1/2$, $D=0$ kagome antiferromagnet is already long-ranged ordered (LRO) and it is only at smaller values of S (which in this approach is a continuous parameter) that a disordered spin-liquid phase is stabilized. This result may however be an artifact of the mean-field approach and it is possible that fluctuations not taken into account at this level do stabilize the disordered phase for the physical spin-1/2 system. It is therefore interesting to see what phases the Schwinger-boson mean-field theory predicts for the kagome antiferromagnet perturbed by Dzyaloshinskii-Moriya interactions.

In Sec. II we present the model and the method. In Sec. III we discuss the phase diagram together with general ground-state properties. In Sec. IV, we illustrate the evolution of observables across the quantum phase transition from topological spin liquid to long-ranged Néel order: the spinon spectrum, the gap, the order parameter, and the condensed fraction of bosons. We calculate the equal-time structure factor, its powder average, and briefly compare both to classical calculation and experimental results. In Sec. V we present the dynamical spin structure factor and its behavior in the two phases. We also describe how these behaviors emerge from the properties of the spinon spectrum.

II. MODEL

We have considered additional DM interactions to the standard Heisenberg model on the kagome lattice

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} [J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)], \quad (1)$$

where $\langle i,j \rangle$ stands for nearest neighbors (each bond is counted once) and $\mathbf{S}_i$ is a quantum spin operator on site i , the

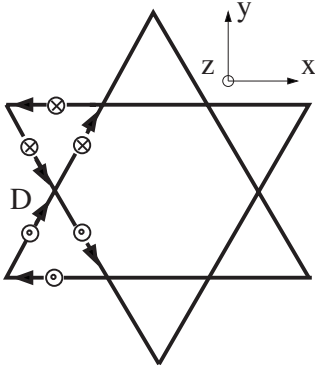


FIG. 1. The Dzyaloshinskii-Moriya field in the model (spin rotated frame—see text).

Dzyaloshinskii-Moriya field $\mathbf{D}_{ij}$ is taken to be along the z axis and is staggered from up to down triangles (see Fig. 1). For this, we work in a rotated frame which allows to eliminate the other components (the $\mathbf{S}_i$ are to be viewed as rotated operators).²³ In this case, the Dzyaloshinskii-Moriya field favors a vector chirality along z and the model (1) has a global U(1) symmetry which can be spontaneously broken or not.

The Schwinger-boson representation is written

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} a_i^\dagger & b_i^\dagger \end{pmatrix} \sigma \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \end{pmatrix} \quad n_i \equiv a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i = 2S, \quad (2)$$

where $a_i^\dagger$ (respectively, $b_i^\dagger$) creates a boson on site i with spin $\uparrow$ (respectively, $\downarrow$) and σ are the Pauli matrices. To fix the length of the spin, $\mathbf{S}_i^2 = (n_i/2)(n_i/2 + 1) = S(S+1)$, we need to have $n_i = 2S$ bosons per site. We define the bond creation operator

$$A_{ij}^\dagger \equiv \frac{1}{2} (e^{i\theta_{ij}} a_i^\dagger b_j^\dagger - e^{-i\theta_{ij}} b_i^\dagger a_j^\dagger) \quad (3)$$

with $\theta_{ij} = D_{ij}/(2J)$. A similar approach has been developed by Manuel *et al.*²⁹ on the square lattice. With this definition and up to small corrections of order D_{ij}^2/J , the model takes its standard form²⁷

$$H = -2J \sum_{\langle i,j \rangle} A_{ij}^\dagger A_{ij} + NzJS^2/2, \quad (4)$$

where N is the number of lattice sites and $z=4$ the coordination number. H has a local U(1) gauge symmetry: it is invariant under $(a_i, b_i) \rightarrow (e^{i\alpha_i} a_i, e^{i\alpha_i} b_i)$, where $\alpha_i \in [0, 2\pi]$. Applied to the vacuum of boson, $A_{ij}^\dagger$ creates a superposition of a singlet and a triplet state on the ij bond, i.e., the exact ground state of a single bond of Eq. (4). In mean-field theory,^{27,30} the quartic Hamiltonian (4) is replaced by a self-consistent quadratic Hamiltonian with a bond varying order parameter $\mathcal{A}_{ij} \equiv \langle A_{ij} \rangle$ and the constraint $n_i = 2S$ enforced on average with Lagrange multipliers λ_i . Up to a constant the mean-field Hamiltonian reads

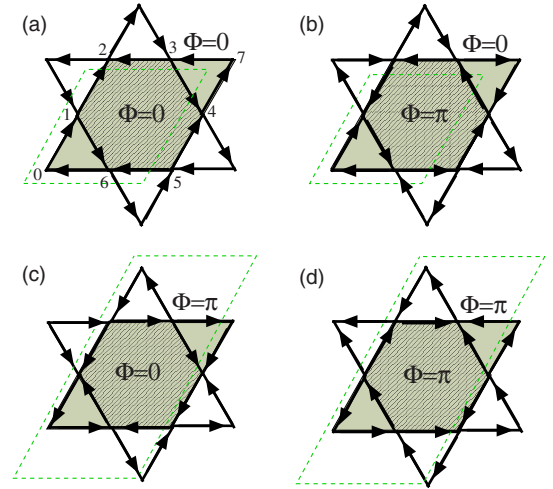


FIG. 2. (Color online) The bond order parameter $\mathcal{A}_{ij}$ of the four symmetric *Ansätze* of model Eq. (1). Its modulus $\mathcal{A}$ is a constant for all bonds, an arrow from i to j means $\mathcal{A}_{ij} > 0$. The fluxes through the hexagon and the rhombus (Φ_{Hex}, Φ_{Rho}) are in (a) (0,0), (b) $(\pi, 0)$, (c) $(0, \pi)$, and (d) (π, π) . The unit cell is shown by dashed lines (twice larger for the last two *Ansätze*).

$$H_{MF} = -2J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{A}_{ij}^* A_{ij} + A_{ij}^\dagger A_{ij} - |\mathcal{A}_{ij}|^2 - \sum_i \lambda_i (n_i - 2S). \quad (5)$$

We now restrict our search to solutions whose physical (thus gauge invariant) observables do not break the space-group symmetry of the Hamiltonian and hence could realize spin-liquid states. There are only four classes of such states (called *Ansätze* in Refs. 28 and 31 and in the following), labeled by their projective symmetry group,³¹ or equivalently by fluxes around hexagons and rhombus (Φ_{Hex}, Φ_{Rho}) = (0,0), $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$, or (π, π) . The flux Φ around a loop $(i_1, i_2, \dots, i_{2n})$ with an even number of links is defined by³²

$$Ke^{i\Phi} = \mathcal{A}_{12}(-\mathcal{A}_{23}^*), \dots, \mathcal{A}_{2n-1,2n}(-\mathcal{A}_{2n,1}^*). \quad (6)$$

It is a gauge-invariant quantity. In each of the four *Ansätze*, all $\mathcal{A}_{ij}$ have the same amplitude $|\mathcal{A}_{ij}| = \mathcal{A}$ and are real in a well chosen gauge. Their signs are represented on Fig. 2. These four *Ansätze* are identical to those obtained by Wang and Vishwanath for the kagome Heisenberg model: they are fully determined by rotational and translational invariances of the spin Hamiltonian on the lattice. Note that to be invariant under the lattice symmetries, the bosonic Hamiltonian of these *Ansätze* must be gauge transformed, which does not modify the corresponding spin Hamiltonian. That explains the noninvariance of these *Ansätze* under the lattice symmetries. The (0,0) *Ansatz* corresponds to the $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ state and the $(\pi, 0)$ *Ansatz* to the $\mathbf{Q}=0$ state, originally found by Sachdev²⁸ while the last two involve larger unit cells and may as well be relevant for longer range interaction or ring exchange.^{31,33}

Using the translation symmetry of the mean-field *Ansätze*, the Hamiltonian is Fourier transformed,

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{q}} \phi_{\mathbf{q}}^{\dagger} N_{\mathbf{q}} \phi_{\mathbf{q}} + NJz\mathcal{A}^2 + (2S+1)N\lambda \quad (7)$$

with

$$\phi_{\mathbf{q}}^{\dagger} \equiv [(a_{1\mathbf{q}})^{\dagger}, \dots, (a_{m\mathbf{q}})^{\dagger}, b_{1-\mathbf{q}}, \dots, b_{m-\mathbf{q}}], \quad (8)$$

$$a_{i\mathbf{q}} \equiv \frac{1}{\sqrt{N/m}} \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} a_{i\mathbf{x}} \quad (9)$$

(the same for the $b_{i\mathbf{q}}$ operators), where m is the number of sites in the unit cell: $m=3$ for the first two *Ansätze* and $m=6$ for the second two. A given site is defined by a sublattice $i \in [1, m]$ and unit-cell $\mathbf{x}$ indices. $N_{\mathbf{q}}$ are $2m \times 2m$ matrices whose coefficients depend on $\mathcal{A}$, λ , $\mathbf{q}$, and of the *Ansatz*. The Hamiltonian is diagonalized using a numerically constructed³⁴ Bogoliubov transformation

$$\phi_{\mathbf{q}} = P_{\mathbf{q}} \tilde{\phi}_{\mathbf{q}} \quad P_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} U_{\mathbf{q}} & -V_{\mathbf{q}} \\ V_{\mathbf{q}} & U_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

where $U_{\mathbf{q}}$ and $V_{\mathbf{q}}$ are $m \times m$ matrices,

$$H_{MF} = \sum_{\mathbf{q}\mu} \omega_{\mathbf{q}\mu} \tilde{\phi}_{\mathbf{q}\mu}^{\dagger} \tilde{\phi}_{\mathbf{q}\mu} + NJz\mathcal{A}^2 + (2S+1)N\lambda, \quad (11)$$

where $\omega_{\mathbf{q}\mu}$ is the dispersion relation of the $\mu=1, \dots, 2m$ spinon modes. Each mode is twice degenerate because of the time-reversal symmetry. The ground state $|\tilde{0}\rangle$ is the vacuum of the Bogoliubov bosons. At zero temperature, $\mathcal{A}$ and λ are determined by extremizing the total energy, subject to the constraints,

$$\mathcal{A} = |\langle A_{ij} \rangle| \quad \langle n_i \rangle = 2S \quad (12)$$

[the energy is in fact a saddle point, minimum in $\mathcal{A}$ and maximum in λ (Ref. 35)].

III. PHASE DIAGRAM

To obtain the phase diagram, the two self-consistent Eq. (12) are implemented numerically for each of the four *Ansätze* of Fig. 2. The energies of the different *Ansätze* are shown in Fig. 3 versus $\theta = D/(2J)$ for three values of S : 0.025, 0.2, and 0.5. The corresponding full phase diagram of the model is shown in Fig. 4.

Before discussing the predictions of this model, let us remark that in the small S limit all these phases can in fact be captured by an analytic perturbative expansion in term of flux through closed loops.³² At small S , the density of bosons is small and the constraints [Eq. (12)] imply that $\mathcal{A}$ must be small compared to λ . The mean-field energy can then be expanded in terms of gauge-invariant products of bond order parameters $\mathcal{A}_{ij}$ along closed loops. Following Tchernyshyov *et al.*,³² we have computed the expansion up to loops of length 16 in order to calculate the energy difference between the four *Ansätze*. The results of these calculations give the low S phase boundaries (dashed lines superimposed to the exact results in Fig. 4). It is seen on this example that the so-called flux expulsion conjecture³² which predicts that the ground state in nonfrustrated models has zero flux through

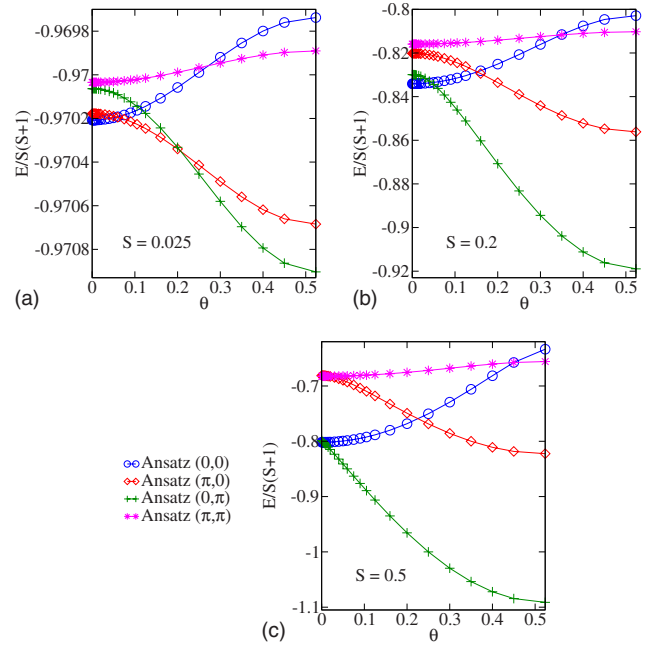


FIG. 3. (Color online) Ground state energies per site of the four *Ansätze* vs $\theta = D/2J$, for $S=0.025$, 0.2, and 0.5.

any closed loop does not apply to frustrated problem, where the $(0, \pi)$ and $(\pi, 0)$ appear as ground states in an extended range of parameters.

For the sake of clarity, we will first discuss the full phase diagram (Fig. 4). (We postpone to the next paragraph the illustration on the spinon spectrum of the differences between topological spin-liquid and Néel-ordered phases. Let us only mention at this stage that a spin-liquid phase is characterized by a fully gapped spinon spectrum, whereas in a Néel-ordered phase the spinon spectrum is gapless at the thermodynamic limit, as the magnon modes.) For $S=1/2$, there is a direct first-order transition between the long-ranged Néel-ordered $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ and $\mathbf{Q}=0$ phases for a finite

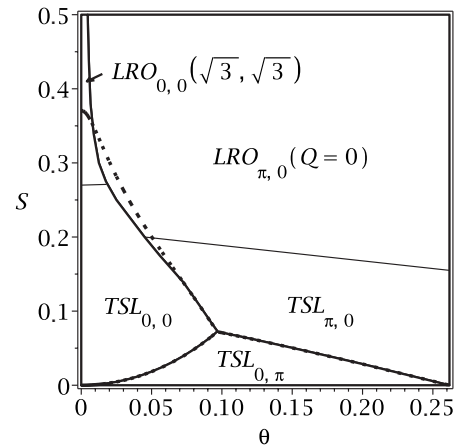


FIG. 4. Phase diagram at zero temperature [spin S , $\theta = D/(2J)$]: TSL and Néel LRO phases characterized by their fluxes through hexagons and rhombi. For larger S the region of existence of the $(0,0)$ phase shrinks. Dashed lines are the result of a perturbative expansion at small S (see text).

Dzyaloshinskii-Moriya coupling. This finite range of existence of the $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ phase shrinks with increasing values of the spin, which is fully compatible with the classical solution.³⁶

For low S values, and increasing θ , Figs. 3 and 4 show a sequence of first-order transitions between the $(0,0)$ ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ short-range fluctuations), $(0,\pi)$, and $(\pi,0)$ ($\mathbf{Q}=0$, short-range fluctuations) spin-liquid phases. [The (π,π) state is always at higher energy and never realized.] The $(0,\pi)$ state was argued to be stabilized by four-spin interactions up to a large critical S .³¹ It also appears here in a small part of the phase diagram for very small S but first-order transitions prevent its stability at larger S .

In the absence of Dzyaloshinskii-Moriya coupling, the $S = 1/2$ results of this approach are qualitatively not consistent with exact diagonalizations which point to a nonmagnetic phase. But in the range of parameters around $S \sim 0.2$, the $(\pi,0)$ Schwinger-boson mean-field results are qualitatively not very far from exact diagonalization results: there are short-ranged $\mathbf{Q}=0$ correlations in the Heisenberg case^{12,37} and a second-order phase transition to 120° $\mathbf{Q}=0$ Néel order under the effect of Dzyaloshinskii-Moriya coupling.²³

As already mentioned, it may be that a theory beyond mean field, with a better treatment of the constraint shifts the region $S \sim 0.2$ to the physically accessible $S = 1/2$. Indeed in the Schwinger bosons mean-field approach it is well known²⁷ that there are large fluctuations of the number of bosons. As a consequence, the square of the spin operator

$$\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle = S(S+1) + (\langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2)/4 \quad (13)$$

takes a value $3/2$ times larger than $S(S+1)$ (at $D=0$).³⁸ The prefactor is even larger in the presence of Dzyaloshinskii-Moriya interaction and amounts to ~ 1.75 for $\theta=0.25$. From the physical spin-1/2 point of view, the mean-field approximation leads to (unwanted) extra fluctuations and, on average, the spin length is larger than assumed [because of (13)]. The $SU(2)$ symmetry of the Heisenberg model can be generalized to $Sp(\mathcal{N})$ [which reduces to $SU(2)$ when $\mathcal{N}=1$] by duplicating $\mathcal{N}$ times each pair (a_i, b_i) of boson operators: $(a_{i\alpha}, b_{i\alpha})$, where $\alpha=1 \dots \mathcal{N}$ is a “flavor” index.² It can be shown that the different boson flavors decouple in the limit of large $\mathcal{N}$, leading to $\mathcal{N}$ uncorrelated copies of the single flavor problem, for which the *exact* solution is given by the present *mean-field* treatment of the $\mathcal{N}=1$ model. Thus, it is only in the $\mathcal{N}=\infty$ limit of the model that the mean-field treatment becomes exact and that the fixed “spin length” is recovered. However, the mean-field theory can describe qualitatively the magnetically ordered phases and the deconfined $\mathbb{Z}_2$ spin-liquid phases of the $SU(2)$ model.³⁹

IV. SPINON SPECTRUM AND QUANTUM PHASE TRANSITION FROM A TOPOLOGICAL SPIN-LIQUID TO A NÉEL-ORDERED PHASE

A. Spin-liquid phases (low S)

In the low S regime, the spinon spectrum of Eq. (11) is gapped everywhere. Figure 5 (left) gives a typical example

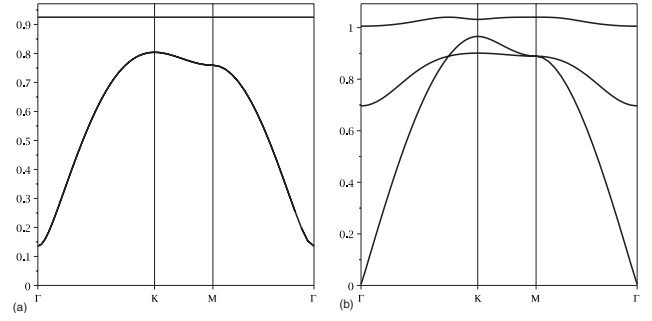


FIG. 5. Spinon dispersions along Γ -K-M- Γ of the first Brillouin Zone (see Fig. 6 for the definition) for the $(\pi,0)$ Ansatz, $S=0.2$. Left: $\theta=0$, the system has a gap and is a topological spin liquid with short-range $\mathbf{Q}=0$ correlations. The lower band is twofold degenerate corresponding to two different chiralities. Right: $\theta=0.25$, the lower branch becomes gapless at Γ in the thermodynamic limit and gives rise to the Goldstone mode of the long-range Néel order.

of such a spectrum for the Ansatz $(\pi,0)$. The spinon band structure is shown in the first Brillouin zone, it has a gap of order $\mathcal{O}(1)$ at point Γ indicative of short-range $\mathbf{Q}=0$ correlations. This gap does not go to zero in the thermodynamic limit: this phase is a disordered topological spin liquid. Adding a Dzyaloshinskii-Moriya perturbation has two effects on the spectrum. It lifts the degeneracy of the lower band corresponding to the symmetry breaking of the model from $SU(2)$ to $U(1)$ and it reduces the gap of the spinon mode that has the chirality opposite to that of the Dzyaloshinskii-Moriya field.

B. Bose-Einstein condensation

With increasing S or θ , the gap decreases and above a critical spin $S_c(\theta)$, the spinon spectrum shows a finite-size gap, which collapses with system size N as $\mathcal{O}(1/N)$. Such a spectrum is shown in Fig. 5 (right). In the thermodynamic limit, the bosons condense in the soft mode (noted $\tilde{\phi}_{\mathbf{q}_0 \sigma}$ with $\sigma = \uparrow, \downarrow$).⁴¹ This gives a macroscopic contribution to the total number of Schwinger bosons,

$$\frac{1}{2S} \sum_i \langle n_i \rangle = N = \sum_{\mathbf{q}ij} \frac{|V_{\mathbf{q}ij}|^2}{S} = x_{\mathbf{q}_0} N + \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{q}_0, ij} \frac{|V_{\mathbf{q}ij}|^2}{S}. \quad (14)$$

The condensed fraction $x_{\mathbf{q}_0}$ in the soft mode is of order $\mathcal{O}(1)$ (or equivalently $|V_{\mathbf{q}_0 i l_0}| \sim \sqrt{N}$). The transition to this Bose-Einstein condensed phase corresponds to the development of long-range antiferromagnetic correlations, as can be seen by computing the static structure factor,

$$S^{xx}(\mathbf{Q}) = \frac{3}{4N} \sum_{i,j} e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle \tilde{O} | S_i^x S_j^x | \tilde{O} \rangle, \quad (15)$$

where $\mathbf{R}_i$ is the position of site i and x is an axis in the easy plane perpendicular to $\mathbf{D}_{ij}$.

The difference in static structure factor between topological spin-liquid and Néel-ordered phases is illustrated in Fig. 6 for the $(\pi,0)$ Ansatz across the Bose-Einstein condensation. In the spin-liquid phase, the structure factor has broad

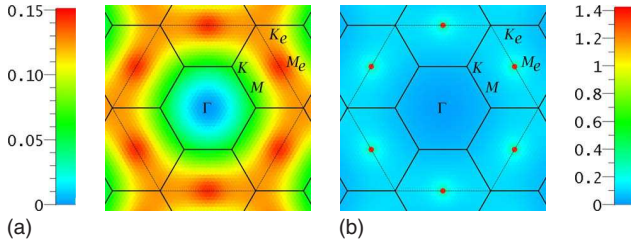


FIG. 6. (Color online) Static structure factor S^{xx} in the extended Brillouin zone for the $(\pi,0)$ state ($\mathbf{Q}=0$) for a lattice size $N=1296$. In the spin-liquid phase $\text{TSL}_{\pi,0}$ (left, $S=0.2$, $\theta=0$) there are broad features about $\mathbf{M}_e$ which become peaks with divergent intensity in the ordered phase $\text{LRO}_{\pi,0}$ (right, $S=0.2$, $\theta=0.25$).

features located at $\mathbf{Q}=\mathbf{M}_e$ (Fig. 6, left) and at equivalent reciprocal points (these are the Γ points of the second Brillouin zone). This structure factor looks very similar to exact diagonalization and density matrix renormalization group (DMRG) results.^{12,37} The features become sharp in the Bose-Einstein condensed phase (Fig. 6, right), where $S^{xx}(\mathbf{M}_e)$ becomes proportional to N ,

$$\frac{3}{4N}S^{xx}(\mathbf{M}_e) = m_{AF}^2 + \frac{C^{st}}{\sqrt{N}} + \dots, \quad (16)$$

where m_{AF}^2 is the order parameter corresponding to long-range correlations of the 120° $\mathbf{Q}=0$ Néel type.⁴² We have extracted m_{AF}^2 by fitting the numerical results (up to $N=1764$) to Eq. (16) with finite-size corrections up to order $1/N$.⁴³ The extrapolation to the thermodynamic limit of m_{AF} , together with the condensate fraction x_{q_0} and the gap of the soft spinon are given in Fig. 7 for $S=0.2$. While near the second-order phase transition, the extrapolation of the condensed fraction behaves very smoothly and vanishes right at the point where the gap opens, the extrapolation of the order parameter gives a small shift. We note that m_{AF} is very small (a few percent) in this range of parameters and, therefore, more accurate extrapolations would require using larger system sizes close to the critical point. For strong enough Néel order, however, the two order parameters are clearly proportional ($m_{AF} \propto x_{q_0}$).

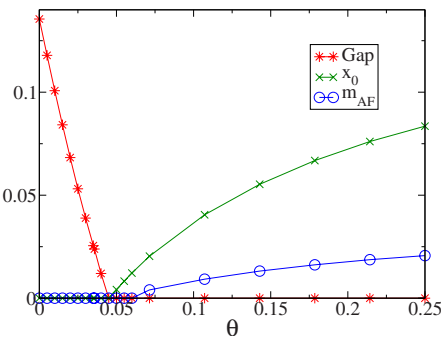


FIG. 7. (Color online) Gap of the soft mode, order parameter m_{AF} , and condensed fraction, x_{q_0} extrapolated to the thermodynamic limit for the $(\pi,0)$ Ansatz as a function of $\theta=D/(2J)$ ($S=0.2$).

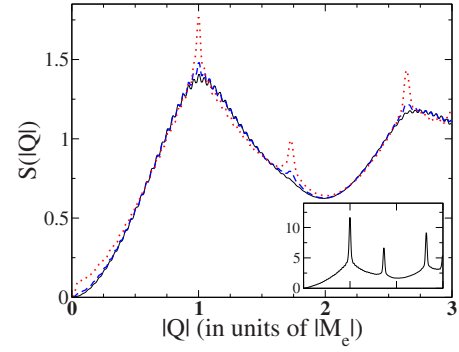


FIG. 8. (Color online) Static structure factor (powder averaged) across the quantum phase transition from the spin liquid to the Néel phase [$S=0.2$ and $\theta=0$ (solid, black), 0.05 (dash, blue), and 0.2 (dot, red)]. Inset: $S=1/2$, $\theta=0$. Small oscillations are finite-size effects.

We have also calculated the static structure factor for powder samples [denoted by $S(|\mathbf{Q}|)$] by averaging Eq. (15) over all directions of $\mathbf{Q}$. In the $(\pi,0)$ spin-liquid phase (Fig. 8 at small D), the overall shape is characteristic of short-range correlations of liquids. We can compare with the calculation of the diffuse scattering for the classical spin-liquid kagomé antiferromagnet by Monte Carlo simulation.⁴⁴ Here the position of the first broad peak is at $|\mathbf{M}_e|$ instead of $|\mathbf{K}_e|$ (and the second broad feature is at $\sqrt{7}|\mathbf{M}_e|$). This simply reflects the difference of short-range correlations of the $(\pi,0)$ Ansatz and the $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ classical spin liquid. In addition, compared with classical Monte Carlo simulations, we find no intermediate shoulder between the two main broad peaks (except for a little hump at $\sqrt{3}|\mathbf{M}_e|$), a point which seems in fact to be closer to recent experiments on a spin-liquid deuterium jarosite.⁴⁵ Moreover, since the response is due to quantum fluctuations we expect a rather weak sensitivity to the temperature up to temperatures of the order of a fraction of J . When D increases, we see the development of the Bragg peaks in the ordered phase, which increase as the square of the order parameter when we go deep into the ordered phase [Fig. 8 (inset)]. In the ordered phase we can identify two distinct contributions to Eq. (15) by using the sum rule

$$S^{xx}(\mathbf{Q}) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega S^{xx}(\mathbf{Q}, \omega). \quad (17)$$

There are the Bragg peaks ($\omega=0$) and also the inelastic collective modes (which we will detail below) which give the additional magnetic background scattering (which is the only contribution to scattering in the spin-liquid phase). It is noteworthy that the latter is relatively strong for low spin (Fig. 8) and becomes relatively much smaller once the order parameter is large (inset of Fig. 8). In fact the transfer of spectral weight from the magnetic continuum background to the Bragg peaks goes as the square of the order parameter. Note also that $S(|\mathbf{Q}|)$ does not vanish any more for small $\mathbf{Q}$ at $D \neq 0$, this is because in the presence of the anisotropy the ground state is no longer an $\text{SU}(2)$ singlet. Although the effect is small the measurement at small $|\mathbf{Q}|$ in the spin-

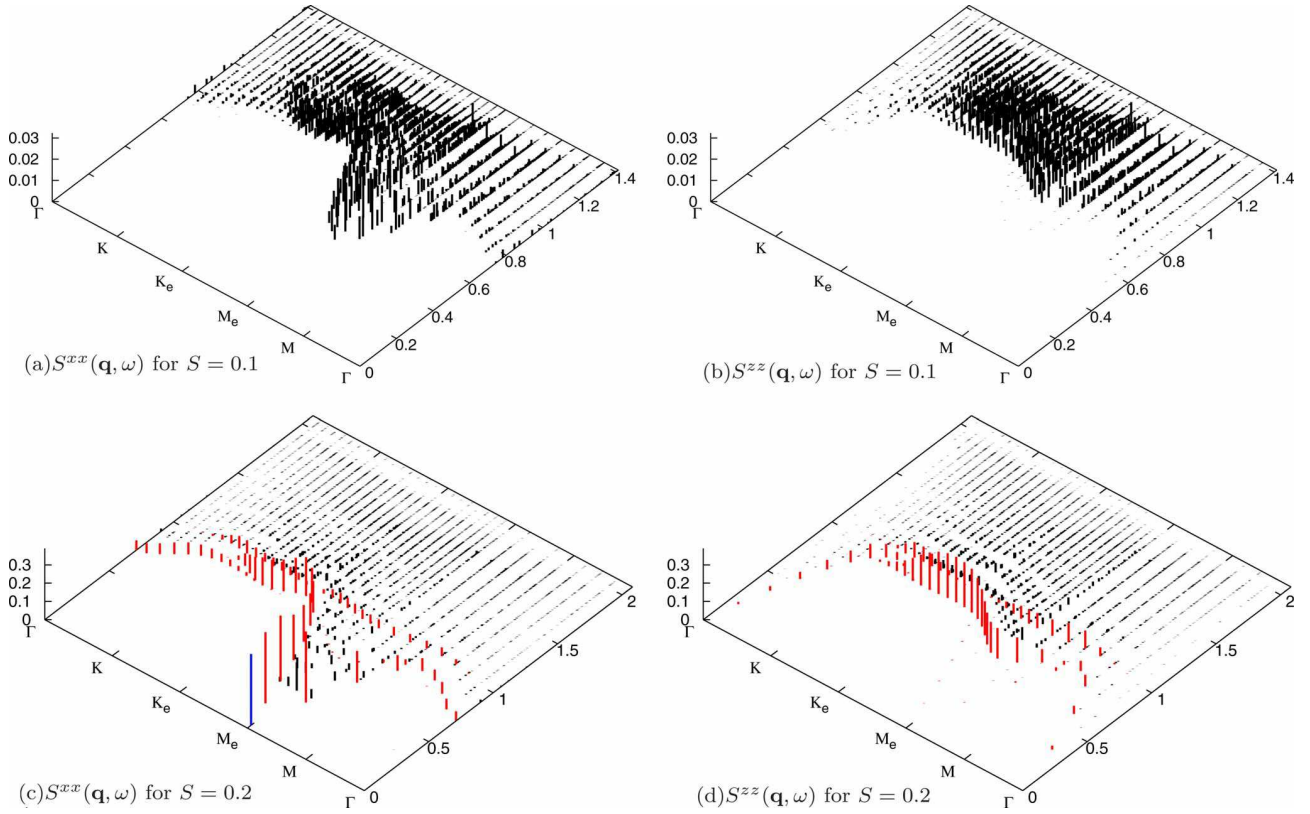


FIG. 9. (Color online) Dynamical structure factors $S^{xx}(\mathbf{q}, \omega)$ and $S^{zz}(\mathbf{q}, \omega)$ for the $\mathbf{Q}=0$ Ansatz in the spin-liquid phase, $S=0.1$ or with long-range order, $S=0.2$. The system size is $N=576$. θ is taken to be 0.25 to emphasize the anisotropy of $S^{xx}(\mathbf{q}, \omega)$ and $S^{zz}(\mathbf{q}, \omega)$. In the Néel phase, the largest peak (in blue online) is the quasielastic peak, next in intensity are the magnon branches (in red online) (intensities are cut to see the weaker continuum).

liquid phase could help to figure out what the anisotropy is (or give an upper bound when the signal is small, see, e.g., Ref. 46). In the ordered phase, the finite uniform susceptibility should give a finite contribution at $\mathbf{Q}=0$ but we recall that this contribution is absent for the U(1) singlet ground state of Schwinger-boson theory.

V. DYNAMICAL SPIN STRUCTURE FACTOR

The Schwinger-boson approach allows to calculate the dynamical response of the system, which is interesting both theoretically and for a direct comparison with experiments. The inelastic neutron cross section is proportional to the spin dynamical structure factor

$$S^{\alpha\alpha}(\mathbf{Q}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle S_{-\mathbf{Q}}^{\alpha}(t) S_{\mathbf{Q}}^{\alpha}(0) \rangle, \quad (18)$$

$$= 2\pi \sum_p |\langle p | S_{\mathbf{Q}}^{\alpha} | \tilde{0} \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_p), \quad (19)$$

where $\alpha=x, y, z$ depending on the polarization of the incident neutrons, $|\tilde{0}\rangle$ is the ground state, and

$$\mathbf{S}_{\mathbf{Q}} = \sqrt{\frac{3}{4N}} \sum_{i\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{i\mathbf{x}}} \mathbf{S}_{i\mathbf{x}} \quad (20)$$

with $\mathbf{R}_{i\mathbf{x}}$ the position of the site $i\mathbf{x}$. We use the Fourier transform and the Bogoliubov transformation to express $\mathbf{S}_{\mathbf{Q}}$ in terms of quasiparticle operators [Eq. (10)]. At zero temperature, since $|\tilde{0}\rangle$ is the vacuum of quasiparticles, only creation operators are retained. Given that $\mathbf{S}_{i\mathbf{x}}$ is quadratic in boson operators, we can only create spinons by pair. For example, the following term is present in $S_{\mathbf{Q}}^z$:

$$\sum_{qln} U_{qil}^* V_{(q+Q)in} (\tilde{a}_{lq})^{\dagger} (\tilde{b}_{n-(q+Q)})^{\dagger}, \quad (21)$$

which applied to $|\tilde{0}\rangle$ in the matrix element [Eq. (19)] creates a pair of spinons $|p\rangle$ with energy $\omega_p = \omega_{ql} + \omega_{-(q+Q)n}$ and wave vector $-\mathbf{Q}$. The intensity of the transition is obtained by computing the product of matrices such as in Eq. (21) for each pair of modes.

We now discuss the general features of the dynamical spin structure factor and show the results for the $\mathbf{Q}=0$ Ansatz in Fig. 9. In the spin-liquid phase [$S < S_c(\theta)$], all spinons are gapped and the two-spin excitations form a gapped continuum, the bottom edge of which is given by the minimum of $\omega_{ql} + \omega_{-(q+Q)n}$ over all $\mathbf{q}$ and all spinon bands (l, n) . $S^{xx}(\mathbf{Q}, \omega)$ and $S^{zz}(\mathbf{Q}, \omega)$ are given in Figs. 9(a) and 9(b). In

these figures, we have taken D large enough to see the anisotropy of the response (and a small $S=0.1$ to be in the spin-liquid phase). When S increases the lower edge of the continuum shifts to zero and its intensity increases continuously.

For $S > S_c(\theta)$ [Figs. 9(c) and 9(d), $S=0.2$, $\theta=0.25$], due to the soft spinon mode $\tilde{\phi}_{\mathbf{q}_0/\sigma}$ [see Fig. 5 (right)] the system enters a Bose-condensed phase: it has long-range correlations and low-energy excitations varying as $1/N$, at $\mathbf{M}_e$. This spinon mode has a singular contribution $\sim \sqrt{N}$ [see Eq. (14)]. As a consequence, the intensities have different finite-size scaling, depending on whether the pair of excited spinons contains the soft spinon or not. We can therefore identify three contributions.

Elastic peak. This is the peak with the largest intensity at $\mathbf{Q}=\mathbf{M}_e$ [shown in blue (online) in Fig. 9(c) and cut in intensity to show the other excitations]. It comes from a pair of (identical) soft spinons (with wave vector $\mathbf{q}_0=0$) in Eq. (21) and so has energy $\mathcal{O}(1/N)$ and intensity proportional to $|U_{\mathbf{q}_0 i l_0} V_{\mathbf{q}_0 i l_0} / \sqrt{N}|^2 \sim N$. By integrating over all frequencies, only this (zero-frequency) peak contributes to the peak of the (equal-time) structure factor, $S^{xx}(\mathbf{M}_e)$ [Fig. 6 (right)]. We also note that the peak is absent in the zz response [Fig. 9(d)], which is expected because the correlations are long ranged in the plane only.

Magnon branches. There are three magnon branches [shown in red (online) in Figs. 9(c) and 9(d)], two are “optical” modes, the third one, gapless, is the Goldstone mode of the $U(1)$ symmetry. The (almost) flat mode is the *weather-vane mode* which is always gapped in the Schwinger-boson approach, contrary to spin-wave theory,⁴⁷ and irrespective of S .²⁸ The magnon here consists of a pair of the soft spinon and a spinon of wave vector $\mathbf{Q}$ [see Eq. (21)] so that the magnon dispersion is the spinon dispersion $\omega_{\mathbf{Q}\mu}$ (Ref. 48) and the intensities are of order $|U_{\mathbf{q}_{in}} V_{\mathbf{q}_0 i l_0} / \sqrt{N}|^2 \sim 1$.

Continuum. As for the spin-liquid phase, there is a continuum of excitations obtained from contributions in Eq. (21) with two spinons both different from the soft mode. Each peak has intensity $|U_{\mathbf{q}_{in}} V_{\mathbf{q}_{kl}} / \sqrt{N}|^2 \sim \mathcal{O}(1/N)$ and the sum of them gives a continuum with finite intensity in the thermodynamic limit, which is absent in lowest-order spin-wave theory.

All these excitations contribute to the sum rule, $N\langle(S_i^x)^2\rangle = \sum_q \int (d\omega/2\pi) S^{xx}(q, \omega)$, given the different density of states. Note that, as expected, the Dzyaloshinskii-Moriya interac-

tion introduces an anisotropy between the in-plane [Figs. 9(a) and 9(c)] and the out-of-plane [Figs. 9(b) and 9(d)] dynamical factors. This anisotropy is visible in the spin-liquid as well as in the Néel-ordered phase. The effect is more spectacular in the latter where the Dzyaloshinskii-Moriya interaction strongly suppresses the low-energy response in the zz channel around the $\mathbf{M}_e$ point.

VI. CONCLUSION

We have obtained the Schwinger-boson mean-field phase diagram for different values of S . The large S limit is in agreement with the semiclassical order by disorder mechanism which selects the $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ state.²⁸ We find that this phase remains stable at small anisotropy in a region which becomes broader and broader when the spin decreases (and hence quantum-mechanical effects increase). It is therefore possible in principle to observe both ordered phases experimentally and first-order transitions between them. However, given the small critical strength, the $\mathbf{Q}=0$ phase is more likely to occur in a real compound with large enough S and the kagome potassium jarosite ($S=5/2$) offers such an example.^{49,50}

We have identified a region of the phase diagram [$S \sim 0.2$, Ansatz $(\pi, 0)$] which resembles qualitatively to the exact diagonalization results for the $S=1/2$ system, where the Dzyaloshinskii-Moriya interaction induces a quantum phase transition between a topological spin liquid and the $\mathbf{Q}=0$ Néel-ordered phase. This suggests to consider smaller values of the “spin” parameter S as possibly relevant within the Schwinger-boson theory, given that the treatment on average of the constraint leads to enhance $\langle S_i^2 \rangle$ compared to $S(S+1)$. Within this framework, we could calculate observables such as (i) the cross section of diffuse neutron scattering, with the evolution from broad diffuse scattering to Bragg peaks across the quantum phase transition (Figs. 6 and 8) and (ii) the neutron inelastic cross section which, in addition to Bragg peaks and spin waves, shows a broad continuum in both disordered and ordered phases (Fig. 9), absent in the lowest-order of spin-wave theory.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank G. Misguich and B. Douçot for numerous enlightening comments on the Schwinger-boson theory.

¹I. Dzyaloshinskii, J. Phys. Chem. Solids **4**, 241 (1958); T. Moriya, Phys. Rev. **120**, 91 (1960).

²N. Read and S. Sachdev, Phys. Rev. Lett. **66**, 1773 (1991).

³X. G. Wen, Phys. Rev. B **44**, 2664 (1991).

⁴G. Misguich and C. Lhuillier, in *Frustrated Spin Systems*, edited by H. T. Diep (World Scientific, Singapore, 2005).

⁵O. Cépas, K. Kakurai, L. P. Regnault, T. Ziman, J. P. Boucher, N. Aso, M. Nishi, H. Kageyama, and Y. Ueda, Phys. Rev. Lett. **87**, 167205 (2001).

⁶P. Sindzingre and C. Lhuillier, EPL **88**, 27009 (2009).

⁷M. B. Hastings, Phys. Rev. B **63**, 014413 (2000).

⁸Y. Ran, M. Hermele, P. A. Lee, and X.-G. Wen, Phys. Rev. Lett. **98**, 117205 (2007).

⁹S. Ryu, O. I. Motrunich, J. Alicea, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **75**, 184406 (2007).

¹⁰P. Lecheminant, B. Bernu, C. Lhuillier, L. Pierre, and P. Sindzingre, Phys. Rev. B **56**, 2521 (1997).

¹¹C. Waldtmann, H.-U. Everts, B. Bernu, C. Lhuillier, P. Sindzingre, Phys. Rev. B **63**, 014413 (2000).

- gre, P. Lecheminant, and L. Pierre, *Eur. Phys. J. B* **2**, 501 (1998).
- ¹²H. C. Jiang, Z. Y. Weng, and D. N. Sheng, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 117203 (2008).
- ¹³R. R. P. Singh and D. A. Huse, *Phys. Rev. B* **77**, 144415 (2008).
- ¹⁴P. Mendels, F. Bert, M. A. de Vries, A. Olariu, A. Harrison, F. Duc, J. C. Trombe, J. S. Lord, A. Amato, and C. Baines, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 077204 (2007).
- ¹⁵J. 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, and Y. S. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 107204 (2007).
- ¹⁶M. A. de Vries, K. V. Kamenev, W. A. Kockelmann, J. Sanchez-Benitez, and A. Harrison, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 157205 (2008).
- ¹⁷M. A. de Vries, J. R. Stewart, P. P. Deen, H. M. Ronnow, and A. Harrison, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 237201 (2009).
- ¹⁸G. Misguich and P. Sindzingre, *Eur. Phys. J. B* **59**, 305 (2007).
- ¹⁹T. Imai, E. A. Nytko, B. M. Bartlett, M. P. Shores, and D. G. Nocera, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 077203 (2008).
- ²⁰A. Olariu, P. Mendels, F. Bert, F. Duc, J. C. Trombe, M. A. de Vries, and A. Harrison, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 087202 (2008).
- ²¹M. Rigol and R. R. P. Singh, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 207204 (2007); *Phys. Rev. B* **76**, 184403 (2007).
- ²²A. Zorko, S. Nellutla, J. van Tol, L. C. Brunel, F. Bert, F. Duc, J. C. Trombe, M. A. de Vries, A. Harrison, and P. Mendels, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 026405 (2008).
- ²³O. Cépas, C. M. Fong, P. W. Leung, and C. Lhuillier, *Phys. Rev. B* **78**, 140405(R) (2008).
- ²⁴I. Rousochatzakis, S. R. Manmana, A. M. Läuchli, B. Normand, and F. Mila, *Phys. Rev. B* **79**, 214415 (2009).
- ²⁵M. Hermele, Y. Ran, P. A. Lee, and X.-G. Wen, *Phys. Rev. B* **77**, 224413 (2008).
- ²⁶P. W. Leung and V. Elser, *Phys. Rev. B* **47**, 5459 (1993).
- ²⁷A. Auerbach and D. P. Arovas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 617 (1988).
- ²⁸S. Sachdev, *Phys. Rev. B* **45**, 12377 (1992).
- ²⁹L. O. Manuel, C. J. Gazza, A. E. Trumper, and H. A. Ceccatto, *Phys. Rev. B* **54**, 12946 (1996).
- ³⁰S. Sarker, C. Jayaprakash, H. R. Krishnamurthy, and M. Ma, *Phys. Rev. B* **40**, 5028 (1989).
- ³¹F. Wang and A. Vishwanath, *Phys. Rev. B* **74**, 174423 (2006).
- ³²O. Tchernyshyov, R. Moessner, and S. L. Sondhi, *Europhys. Lett.* **73**, 278 (2006).
- ³³J.-C. Domenge, P. Sindzingre, C. Lhuillier, and L. Pierre, *Phys. Rev. B* **72**, 024433 (2005).
- ³⁴J. H. P. Colpa, *Physica A* **93**, 327 (1978).
- ³⁵This fact was already mentioned implicitly by T. Yavorskii, W. Apel, and H.-U. Everts, *Phys. Rev. B* **76**, 064430 (2007).
- ³⁶M. Elhajal, B. Canals, and C. Lacroix, *Phys. Rev. B* **66**, 014422 (2002).
- ³⁷A. Laeuchli and C. Lhuillier, arXiv:0901.1065 (unpublished).
- ³⁸A simple way to derive the 3/2 factor (see, however, A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer-Verlag, Berlin, 1994 for the discussion of the $1/\mathcal{N}$ corrections) is to use the Wick theorem: $\langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2 = \langle n_{ai} \rangle (\langle n_{ai} \rangle + 1) + \langle n_{bi} \rangle (\langle n_{bi} \rangle + 1) + \langle a_i^2 \rangle + \langle b_i^2 \rangle + 2|\langle a_i b_i \rangle|^2$. At $D=0$, the Hamiltonian is SU(2) invariant and we obtain $\langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2 = 2S(S+1)$. For $D \neq 0$, $\langle a_i b_i \rangle \neq 0$.
- ³⁹At finite $\mathcal{N}$ and for sufficiently small boson density, the problem is strictly equivalent to gapped spinons (the Schwinger bosons) interacting with a fluctuating bond field. It has been understood that the low-energy physics of such a system will be that of a lattice gauge theory coupled to charged matter fields. But the nature (group) of the gauge field crucially depends on the lattice geometry and in the present case where the lattice is not bipartite, it should generically be of $\mathbb{Z}_2$ type and has two types of phases (Refs. 2 and 40). If the effective $\mathbb{Z}_2$ gauge theory is in a deconfined phase (which should be the case for large enough $\mathcal{N}$), the ground state is qualitatively close to the mean-field one, with gapped and unconfined spinons. If the phase is instead confined, the gauge fluctuations are strong and cannot be neglected, the mean-field picture is not valid any more.
- ⁴⁰G. Misguich, arXiv:0809 (unpublished). Lectures given at the Les Houches summer school on *Exact Methods in Low-Dimensional Statistical Physics and Quantum Computing*, 2008.
- ⁴¹For the sake of simplicity we develop only the formulas corresponding to a unique soft mode. This is the case of the Néel order in presence of a Dzyaloshinskii-Moriya interaction: due to the U(1) symmetry of the original Hamiltonian, the Goldstone mode is unique. The general case is straightforward but more cumbersome in writing.
- ⁴² m_{AF}^2 is delicate to normalize because of the fluctuations of the spin length on each site. Fluctuations also increase with the strength of the Dzyaloshinskii-Moriya coupling, making the normalization partly arbitrary.
- ⁴³H. Neuberger and T. Ziman, *Phys. Rev. B* **39**, 2608 (1989); D. S. Fisher, *ibid.* **39**, 11783 (1989); P. Hasenfratz and F. Niedermayer, *Zeitschrift für Physik B* **92**, 91 (1993).
- ⁴⁴J. N. Reimers, *Phys. Rev. B* **46**, 193 (1992).
- ⁴⁵B. Fåk, F. C. Coomer, A. Harrison, D. Visser, and M. E. Zhitomirsky, *EPL* **81**, 17006 (2008).
- ⁴⁶S.-H. Lee, C. Broholm, G. Aeppli, A. P. Ramirez, T. G. Perring, C. J. Carlile, M. Adams, T. J. L. Jones, and B. Hessen, *Europhys. Lett.* **35**, 127 (1996).
- ⁴⁷A. B. Harris, C. Kallin, and A. J. Berlinsky, *Phys. Rev. B* **45**, 2899 (1992).
- ⁴⁸If $\mathbf{q}_0 \neq 0$, the spinon dispersion is folded in the magnetic Brillouin zone.
- ⁴⁹A. S. Wills, *Phys. Rev. B* **63**, 064430 (2001).
- ⁵⁰For $S > 1/2$, we note that single-ion anisotropies are also present and may affect the form of magnetic order.

Conclusion

Dans cette thèse, nous avons cherché à expliquer les propriétés de basse énergie de réseaux bi-dimensionnels de spins frustrés qui, dans la limite classique, ont un état fondamental non coplanaire. Ces ordres chiraux subissent une transition de phase à température finie, liée au caractère discret de la chiralité (± 1). Des lignes de défauts : les murs de domaines de chiralité, apparaissent lorsque la température augmente et prolifèrent à la température de transition. Les ordres chiraux étant non colinéaires, ils possèdent de plus des défauts ponctuels appelés vortex $\mathbf{Z}_2$. L'étude de l'interaction entre les vortex et les murs de domaines a montré que l'apparition des murs de domaines favorisait celle des vortex en leur voisinage, conduisant à l'explosion de la densité de vortex à la température de la transition chirale.

Peu d'états chiraux classiques ont été découverts jusqu'à aujourd'hui [50] [26], pour la raison simple qu'il n'y a pas de méthode générale permettant de trouver l'état fondamental d'un modèle de spin classique sur un réseau. Nous avons défini des états dits *réguliers* associés à un ensemble de symétries du réseau. Ces états forment un vivier d'états fondamentaux possibles. En effet, il arrive, comme on vient de le dire, que l'on ne sache pas déterminer analytiquement l'état fondamental d'un Hamiltonien donné, mais aussi que l'on ne connaisse pas les interactions entre spins dans un composé mais uniquement les symétries de son cristal. Nous avons vu sur des exemples quelle pouvait être l'utilité des états réguliers dans ces situations. Notamment, nous proposons l'ordre appelé cuboc2 comme état classique parent de l'état désordonné rencontré à basse température dans la Kapellasite, composé de formule $\text{Cu}_3\text{Zn}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ comportant un réseau kagome de spins $1/2$. Des mesures de facteurs de structure statiques sont à l'origine de cette supposition. Une collaboration entre expérimentateurs et théoriciens est en cours sur ce sujet avec entre autre un projet de mesures expérimentales complémentaires afin de préciser les interactions (susceptibilité, chaleur spécifique), la détermination de l'influence des défauts (présence de lacunes dans le réseau de spins $1/2$). Nous projetons de calculer des facteurs de structures statiques et dynamiques en théorie des bosons de Schwinger en champ moyen (SBMFT) avec des interactions ferromagnétiques entre premiers voisins et antiferromagnétiques (AF) entre seconds voisins pour une comparaison plus approfondie avec les expériences.

Nous avons calculé ces quantités sur le réseau kagome avec des interactions AF premiers voisins et une interaction Dzyaloshinskii-Moriya (DM), qui est présente dans de nombreux composés, mais dont l'intensité est difficile à connaître. Le diagramme de phases SBMFT a été déterminé ainsi que les facteurs de structure statiques et dynamiques dans certaines de ces phases, ce qui permet de les distinguer expérimentalement. L'analyse en taille finie de ces quantités permet de distinguer les phases ordonnées à longue portée des autres. L'effet de l'interaction DM est de favoriser l'ordre à longue portée $\mathbf{q} = 0$, ce qui confirme les résultats obtenus par Cepas *et al.* [13]. La nature de la phase du modèle sans DM reste une question ouverte. Cependant les corrélations à courte portée de la phase liquide de spins $(\pi, 0)$ (parent de l'ordre $\mathbf{q} = 0$) ressemblent fortement à celles du fondamental d'un échantillon de 36 sites [53]. Nous avons trouvé une phase chirale dans le diagramme de phase, dont l'énergie en champ moyen est plus basse que celle des états ne brisant pas de

symétrie du Hamiltonien. C'est à notre connaissance la première brisure spontanée de la symétrie par renversement du temps en SBMFT.

La théorie des groupes de symétries projectives (PSG) de Wen permet de classifier des liquides de spins en les distinguant par leurs flux, tout comme les groupes de symétries ont permis de classifier les états réguliers classiques. Les liquides de spins n'ont pas de paramètre d'ordre local, ce qui complique leur caractérisation. Leur signe distinctif est la dégénérescence topologique. Malheureusement, sa mise en évidence numérique est délicate. Les flux sont des observables locales qui pourraient permettre un jour de caractériser des phases liquides de spins. Grâce à la SBMFT, et à son paramètre κ continu, analogue à une longueur de spin, des analogies entre des quantités définies dans des états de Néel et d'autres définies dans des phases liquides de spins ont été mises en évidence, dont une limite classique du flux. Des liens existaient déjà entre certains liquides de spins et des ordres réguliers, lorsque la limite pour $\kappa \rightarrow \infty$ du liquide de spins donnait cet ordre régulier. Sachdev [92] avait analysé les liquides de spins topologiques associés aux ordres coplanaires réguliers sur les réseaux triangulaire et kagomé. Mais la compréhension des autres liquides de spins obtenus grâce aux PSG par Wang et Vishwanath [108] restait limitée et une question était ouverte : pourquoi ne donnaient-ils pas les ordres réguliers obtenus dans le Chap.1 ? Dans cette thèse, la notion de flux a été approfondie. Ils ont été exprimé en terme d'opérateurs de spins et leur définition a été élargie aux états classiques. Ceci a permis de prendre le problème en sens inverse : au lieu de partir des liquides de spins incompris et d'aller vers la limite classique, on a pris comme point de départ les ordres réguliers et on a déterminé les liquides de spins associés, qui se sont révélés différents des liquides de spins de Wang et Vishwanath. On a ainsi déterminé la phase liquide de spins associée à l'ordre tétraédrique sur le réseau triangulaire.

Ce liquide de spins manquait à la liste des liquides de spins totalement symétriques pour la simple raison qu'il est chiral : il brise la symétrie par renversement du temps du Hamiltonien et possède des flux différents de 0 ou π . Les liquides de spins chiraux ne sont encore l'état fondamental d'aucun modèle de spins expérimentalement réalisable dans lequel la symétrie par renversement du temps existe. Nous proposons un tel modèle pour lequel notre liquide de spins chiral pourrait être le fondamental : le Hamiltonien d'échange multiple sur le réseau triangulaire. En effet, ce modèle possède un large intervalle de paramètres dans lequel le fondamental classique est l'ordre tétraédrique. Il est donc fort possible qu'en diminuant progressivement la valeur de κ en SBMFT, cette phase tétraédrique survive assez longtemps pour atteindre un κ équivalent à un spin $1/2$, et qu'en ce point, l'ordre à longue portée ait disparu pour laisser place à un liquide de spins chiral. Les diagrammes de phases obtenus en SBMFT étant souvent qualitativement corrects, il serait alors envisageable que cette phase soit l'état fondamental au delà du champ moyen. Des diagonalisations exactes (ED) ont déjà été menées sur ce problème [69] [70] [59] et l'hypothèse d'un liquide de spins chiral permettra peut-être d'expliquer des résultats incompris jusqu'ici. L'expression du flux en terme d'opérateurs de spin le rend mesurable en ED, ce qui pourra servir à mettre en évidence cette phase. Elle posséderait à la limite thermodynamique le double de la dégénérescence d'un liquide de spins non chiral, c'est à dire une dégénérescence de 8 sur un tore à surface 2D. Un indice de l'existence de cette phase serait une transition chirale à température non nulle. Les visons, analogues quantiques des vortex $\mathbb{Z}_2$, pourraient alors apparaître en nombre important à la transition, comme c'est le cas classiquement.

Annexe A

Les ordres réguliers classiques : suppléments

1 Etats réguliers sur le réseau hexagonal : calculs

Les symétries du réseau hexagonal (Fig.A.1) et par conséquent les groupes de symétrie algébriques sont les mêmes que sur le réseau triangulaire, mais il y a deux types de sites : u et v .

On décrit les coordonnées d'un point dans le repère formé des deux vecteurs de base $\mathbf{T}_1$ et $\mathbf{T}_2$ (Fig.A.1) et ayant pour origine le centre d'un hexagone. L'effet des générateurs des symétries du réseau sur les coordonnées est

$$\begin{aligned}
 T_1 : (r_1, r_2, u) &\mapsto (r_1 + 1, r_2, u) \\
 (r_1, r_2, v) &\mapsto (r_1 + 1, r_2, v) \\
 T_2 : (r_1, r_2, u) &\mapsto (r_1, r_2 + 1, v) \\
 (r_1, r_2, v) &\mapsto (r_1, r_2 + 1, u) \\
 \sigma : (r_1, r_2, u) &\mapsto (r_2, r_1, u) \\
 (r_1, r_2, v) &\mapsto (r_2, r_1, v) \\
 R_{\pi/3} : (r_1, r_2, u) &\mapsto (r_1 - r_2 - 1, r_1, v) \\
 (r_1, r_2, v) &\mapsto (r_1 - r_2, r_1, u).
 \end{aligned}$$

Les propriétés du réseau (invariance de certains sites selon des transformations du

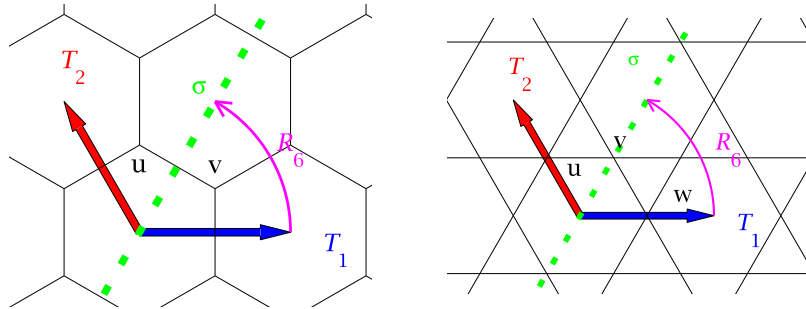


FIG. A.1 – Symétries des réseaux hexagonal et kagome. Des générateurs des symétries du réseau S_R sont représentés : les deux translations T_1 et T_2 , la rotation R_6 et la réflexion σ .

réseau) sont modifiées par rapport au réseau triangulaire. Deux nous seront utiles :

$$\sigma R_6(0, 0, v) = (0, 0, v) \quad (\text{A.1})$$

$$T_1 R_6^2(0, 0, v) = (0, 0, v). \quad (\text{A.2})$$

Les groupes $\mathcal{S}_e^0$, $\mathcal{S}_e^1$ et $\mathcal{S}_e^2$ ne laissent comme possibilités que les états F et AF (voir Fig.A.2(a) et A.2(b)).

$\mathcal{S}_e^3$ permet deux sous-réseaux complètement indépendants pour $\varepsilon_\sigma = \varepsilon_R$ (voir Fig.A.2(c))

$\mathcal{S}_e^4$ et $\mathcal{S}_e^5$ donneront encore des états invariants par translation. Or, on a fait tous les états possibles. Donc, ces groupes ne donneront aucun nouvel état.

Pour le groupe $\mathcal{S}_e^6$, il faut distinguer 4 cas :

- $\varepsilon_\sigma = \varepsilon_R = 1$ Le spin $\mathbf{S}(0, 0, v)$ doit être colinéaire à $(-1, 0, 1)$ d'après la première condition. Or, il doit aussi être colinéaire à $(1, -1, 1)$ d'après la deuxième. Donc, pas d'état pour ce groupe.
- $\varepsilon_\sigma = \varepsilon_R = -1$ Même conclusion : $\mathbf{S}(0, 0, v)$ doit être colinéaire à la fois à $(1, 0, 1)$ et à $(-1, 1, 1)$.
- $\varepsilon_\sigma = -\varepsilon_R = 1$ $\mathbf{S}(0, 0, v)$ doit être colinéaire à $(-1, 1, 1)$ d'après la deuxième condition. Ce vecteur fait partie du sous-espace invariant de $M_\sigma M_R$. Donc, il remplit les deux conditions. On obtient 8 sous-réseaux. Les spins se placent aux sommets d'un cube. On a deux possibilités de sens pour $\mathbf{S}(0, 0, v)$, ce qui donne deux états reliés par une inversion des spins. Cet état est chiral. Fig.A.2(c).
- $-\varepsilon_\sigma = \varepsilon_R = 1$ Cette fois $\mathbf{S}(0, 0, v)$ doit être colinéaire à $(1, -1, 1)$. On obtient 4 sous-réseaux. Les spins se placent aux sommets d'un tétraèdre. Cet état est chiral. Fig.A.2(d).

Pour $\mathcal{S}_e^7$ et $\mathcal{S}_e^8$, le vecteur $\mathbf{S}(0, 0, v)$ doit être colinéaire à l'axe z d'après la deuxième condition. On n'a donc que des états à deux sous-réseaux possibles. On les a déjà tous explorés.

2 Etats réguliers sur le réseau hexagonal : récapitulatif

Les cinq états réguliers obtenus sont décrits ici et sur la Fig.A.2 :

- L'état ferromagnétique (Fig.A.2(a)) : tous les spins ont la même direction.
- L'état antiferromagnétique (Fig.A.2(b)) : les spins des deux sous-réseaux sont opposés.
- L'état à deux sous-réseaux quelconques (Fig.A.2(c)) : les spins des deux sous-réseaux prennent deux directions libres. Les états F et AF sont des cas particuliers de cet état.
- L'état cubique (Fig.A.2(d)) : les spins des huit sous-réseaux prennent les directions des sommets d'un cube. Cet état est chiral.
- L'état tétraédrique (Fig.A.2(e)) : les spins des quatre sous-réseaux prennent les directions des sommets d'un tétraèdre. Cet état est chiral.

3 Etats réguliers sur le réseau kagome : calculs

Les symétries du réseau kagome (Fig.A.1) et par conséquent les groupes de symétrie algébriques sont les mêmes que sur le réseau triangulaire, mais il y a trois types de sites : u , v et w .

On décrit les coordonnées d'un point dans le repère formé des deux vecteurs de base $\mathbf{T}_1$ et $\mathbf{T}_2$ (Fig.A.1) et ayant pour origine le centre d'un hexagone. L'effet des générateurs

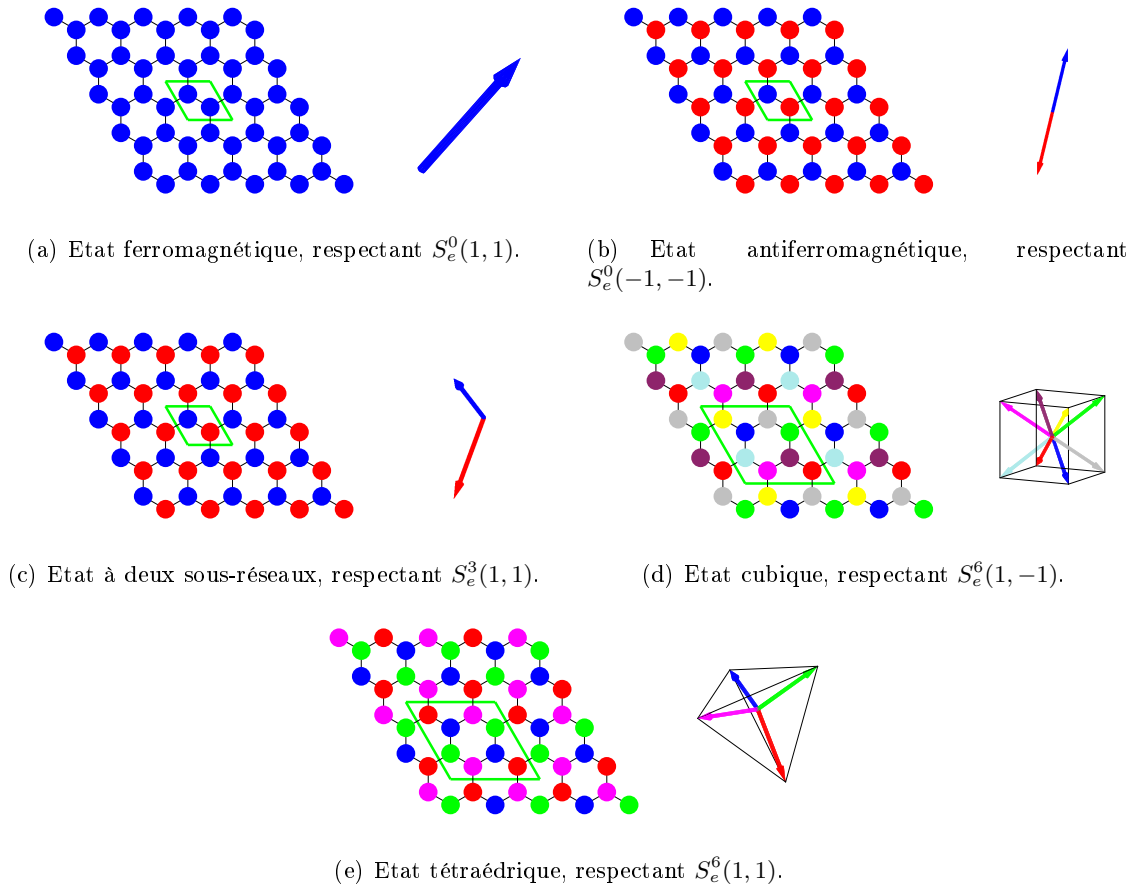


FIG. A.2 – Etats réguliers sur le réseau hexagonal. Pour chacun, l'un des groupes de symétrie algébriques le laissant invariant est donné.

des symétries du réseau sur les coordonnées est

$$\begin{aligned}
 T_1 : (r_1, r_2, u) &\mapsto (r_1 + 1, r_2, u) \\
 (r_1, r_2, v) &\mapsto (r_1 + 1, r_2, v) \\
 (r_1, r_2, w) &\mapsto (r_1 + 1, r_2, w) \\
 T_2 : (r_1, r_2, u) &\mapsto (r_1, r_2 + 1, u) \\
 (r_1, r_2, v) &\mapsto (r_1, r_2 + 1, v) \\
 (r_1, r_2, w) &\mapsto (r_1, r_2 + 1, w) \\
 \sigma : (r_1, r_2, u) &\mapsto (r_2, r_1, w) \\
 (r_1, r_2, v) &\mapsto (r_2, r_1, v) \\
 (r_1, r_2, w) &\mapsto (r_2, r_1, u) \\
 R_{\pi/3} : (r_1, r_2, u) &\mapsto (r_1 - r_2, r_1 - 1, w) \\
 (r_1, r_2, v) &\mapsto (r_1 - r_2, r_1, u) \\
 (r_1, r_2, w) &\mapsto (r_1 - r_2, r_1, v).
 \end{aligned}$$

Les propriétés du réseau (invariance de certains sites selon des transformations du réseau) sont modifiées par rapport au réseau triangulaire. Deux nous seront utiles :

$$\sigma(0, 0, v) = (0, 0, v) \quad (\text{A.3})$$

$$T_1 T_2 R_6^3(0, 0, v) = (0, 0, v). \quad (\text{A.4})$$

Les groupes $\mathcal{S}_e^0$ à $\mathcal{S}_e^5$ permettent de un à trois sous réseaux ($M_1 = M_2 = I_3$). Les cinq premiers ne permettent au maximum que deux orientations différentes de spins (car $M_r^2 = I_3$). En fait, deux orientations différentes ne sont pas possibles : on a forcément $\mathbf{S}(0, 0, u) = \mathbf{S}(0, 0, w)$ puisque $\mathbf{S}(0, 0, u) = M_r^2 \mathbf{S}(0, 0, w) = \mathbf{S}(0, 0, w)$. Mais on a aussi $\mathbf{S}(0, 0, v) = \mathbf{S}(0, 0, w)$ pour la même raison. Il n'y a donc que l'état ferromagnétique (voir Fig.1.7(a)) permis pour les groupes $\mathcal{S}_e^0$ à $\mathcal{S}_e^4$, pour certaines valeurs des ε .

Le groupe $\mathcal{S}_e^5$ nous donne 12 possibilités (ε_σ , ε_R et k).

- $\varepsilon_\sigma = \varepsilon_R = 1$ $\mathbf{S}(0, 0, v)$ est dirigé selon z .
 - $k = 1$ ou 3 : les deux conditions ne peuvent pas être remplies simultanément.
 - $k = 2$: $\mathbf{S}(0, 0, v)$ doit être colinéaire à $\mathbf{e}_z$. On a un fondamental à trois sous-réseaux. Les spins sont coplanaires et se placent aux sommets d'un triangle équilatéral (voir Fig.1.7(b)).
- $\varepsilon_\sigma = 1$, $-\varepsilon_R = -1$:
 - $\mathbf{S}(0, 0, v)$ doit être selon $\mathbf{e}_z$.
 - $k = 1$: état à trois sous-réseaux précédent (voir Fig.1.7(b)),
 - $k = 2$: pas de solutions,
 - $k = 3$: état ferromagnétique (voir Fig.1.7(a)).
- $\varepsilon_\sigma = \varepsilon_R = -1$
 - $\mathbf{S}(0, 0, v)$ doit être orienté perpendiculairement à $\mathbf{e}_z$.
 - $k = 1$: état à trois sous-réseaux, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ selon $\mathbf{e}_y$ (voir Fig.1.7(b)),
 - $k = 2$: pas de solutions,
 - $k = 3$: état ferromagnétique, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ selon $\mathbf{e}_y$ (voir Fig.1.7(a)).
- $\varepsilon_\sigma = -1$, $\varepsilon_R = 1$
 - $\mathbf{S}(0, 0, v)$ doit être orienté perpendiculairement à z .
 - $k = 1$: état ferromagnétique, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ selon $\mathbf{e}_x$ (voir Fig.1.7(a)).
 - $k = 2$: $\mathbf{S}(0, 0, v)$ combinaison linéaire de $\mathbf{e}_x$ et $\mathbf{e}_y$. Etat à trois sous réseaux. Les spins se placent aux sommets d'un triangle équilatéral, mais ils peuvent ne pas être coplanaires (voir Fig.1.7(c)).

- $k = 3$: état ferromagnétique, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ selon $\mathbf{e}_x$ (voir Fig.1.7(a)).

Le groupe $\mathcal{S}_e^6$

- Si $\varepsilon_\sigma = \varepsilon_R = 1$, il n'y a pas de solution.
- Si $\varepsilon_R = \varepsilon_\sigma = -1$, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ est colinéaire à $\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y$. On a douze sous-réseaux. Les spins se placent sur les milieux des côtés d'un cube (aux sommets d'un cuboctaédron). Les spins d'un triangle du réseau forment des angles de 120 degrés entr'eux (ordre appelé cuboc1, voir Fig.1.7(d)).
- Si $\varepsilon_R = 1$ et $\varepsilon_\sigma = -1$, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ est colinéaire à $\mathbf{e}_z$. On a douze sous-réseaux, les spins se placent sur les milieux des faces d'un cube (aux sommets d'un octaèdre : 6 orientations différentes). Les spins d'un triangle du réseau forment un trièdre orthogonal (ordre appelé octaédrique, voir Fig.1.7(e)).
- Si $\varepsilon_R = -1$ et $\varepsilon_\sigma = 1$, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ est colinéaire à $\mathbf{e}_y - \mathbf{e}_x$. On a douze sous-réseaux. Les spins se placent sur les milieux des côtés d'un cube (aux sommets d'un cuboctaédron). Les spins d'un triangle du réseau ne sont pas coplanaires et sont tous à une distance d'une demi-arête de cube d'un même coin (ordre appelé cuboc2, voir Fig.1.7(f)).

Le groupe $\mathcal{S}_e^7$: on doit avoir $\varepsilon_\sigma = 1$.

- Si $\varepsilon_R = 1$, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ est colinéaire à $(-1, \sqrt{3})$. Etat à trois sous-réseaux. Spins coplanaires aux sommet d'un triangle équilatéral (voir Fig.1.7(g)).
- Si $\varepsilon_R = -1$, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ est combinaison linéaire de $(\sqrt{3}, 1, 0)$ et de $(0, 0, 1)$. Etat à trois sous-réseaux. Spins non-coplanaires aux sommet d'un triangle équilatéral (voir Fig.1.7(h)). Maille élémentaire à 9 spins.

Le groupe $\mathcal{S}_e^8$:

- Si $\varepsilon_\sigma = \varepsilon_R = 1$, pas de solutions.
- Si $\varepsilon_\sigma = 1$ et $\varepsilon_R = -1$, état ferromagnétique, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ selon z (voir Fig.1.7(a)).
- Si $\varepsilon_\sigma = \varepsilon_R = -1$, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ selon $(\sqrt{3}, 1, 0)$, ordre à 3 sous réseaux, spins coplanaires aux sommets d'un triangle équilatéral. Maille élémentaire à 9 spins (voir Fig.1.7(g)).
- Si $\varepsilon_\sigma = -1$ et $\varepsilon_R = 1$, $\mathbf{S}(0, 0, v)$ selon $(-1, \sqrt{3}, 0)$. Trois sous réseaux, spins coplanaires à 120 degrés (Voir Fig.1.7(g)).

4 Fondamentaux du Hamiltonien Heisenberg sur le réseau triangulaire

Ils sont récapitulés sur la Fig. A.3 pour $J_1 = -1, 0$ et 1 en fonction de J_2 et J_3 . Les énergies par site des ordres réguliers sont :

- pour l'état F : $E_f = 3J_1 + 3J_2 + 3J_3$,
- pour l'état tétraédrique : $E_p = -J_1 - J_2 + 3J_3$,
- pour l'état coplanaire $E_t = -3/2J_1 + 3J_2 - 3/2J_3$.

Comme le réseau triangulaire est un réseau de Bravais, on sait que chaque état fondamental est un état spiral ou est dégénéré avec un état spiral à spins coplanaires. Les états F et coplanaires sont spiraux, et l'état tétraédrique est dégénéré avec l'état spiral décrit par $\mathbf{Q}$ au milieu d'un côté de la zone de Brillouin et deux sous-réseaux portant des spins opposés. Une portion des diagrammes de phase est occupée par des états spiraux.

5 Fondamentaux du Hamiltonien Heisenberg sur le réseau hexagonal

Ils sont récapitulés sur la Fig. A.4 pour $J_1 = -1, 0$ et 1 en fonction de J_2 et J_3 . Les énergies des ordres réguliers sont :

- pour l'état F : $E_f = 3/2J_1 + 3J_2 + 3/2J_3$,

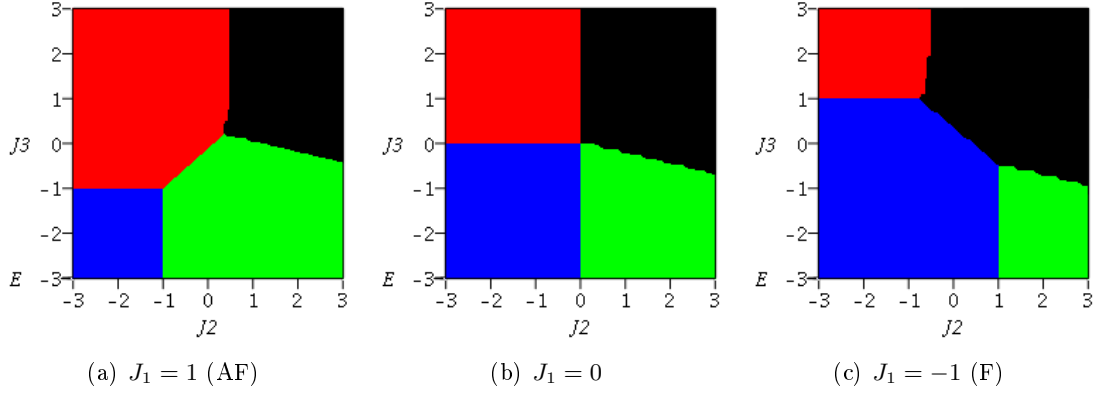


FIG. A.3 – Etats fondamentaux sur le réseau triangulaire pour le Hamiltonien 1.15. En bleu : état F, en vert : état tétraédrique, en rouge : état coplanaire, en noir : état spiral.

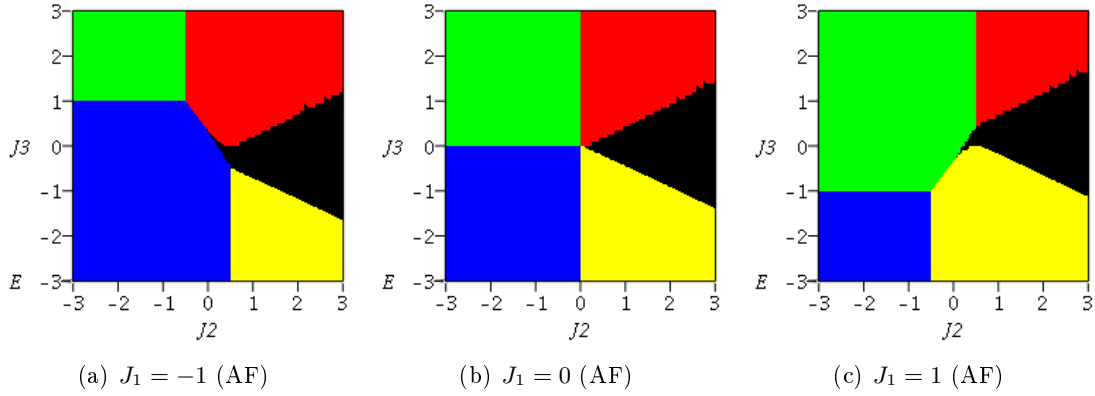


FIG. A.4 – Etats fondamentaux sur le réseau hexagonal pour le Hamiltonien 1.15. En bleu : état F, en vert : état AF, en jaune : état tétraédrique, en rouge : état cubique, en noir : état spiral.

- pour l'état AF : $E_a = -3/2J_1 + 3J_2 - 3/2J_3$,
- pour l'état cubique $E_c = J_1/2 - J_2 - 3/2J_3$,
- pour l'état tétraédrique : $E_t = -J_1/2 - J_2 + 3/2J_3$.

On retrouve les diagrammes de phase de l'article de Fouet *et al.* [31]. Les états F et AF sont spiraux colinéaires. Chaque ordre régulier avec des spins non coplanaires possède un état spiral coplanaire de même énergie, favorisé entropiquement à basse température (ordre par le désordre). L'état tétraédrique a la même énergie qu'un état où les spins prennent les directions $\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow$ sur les 4 sous-réseaux, ce qui est un état spiral colinéaire. L'état cubique a la même énergie que l'état où 4 des 8 spins de la maille (4 spins touchant l'une des faces du cube de la Fig.A.2(d)) sont $\uparrow$, et les 4 autres $\downarrow$.

Les états colinéaires dégénéré avec tout un continuum d'états ont des chances d'être stabilisés par l'ordre par le désordre. Par un développement en onde de spin, Fouet *et al.* [31] ont montré qu'ils étaient sélectionnés par les fluctuations quantiques.

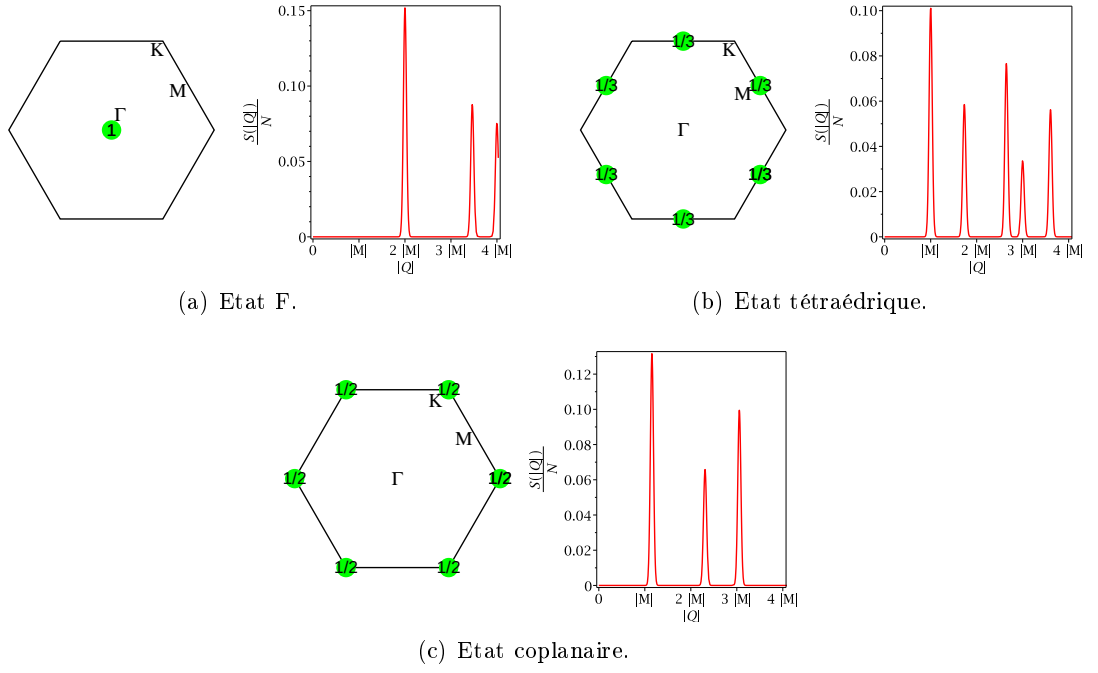


FIG. A.5 – Facteurs de structure $S(\mathbf{Q})/N_s$ et $S(|\mathbf{Q}|)/N_s$ des états réguliers du réseau triangulaire. L'hexagone est la ZdB.

6 Les facteurs de structure des états réguliers sur le réseau triangulaire

Ils sont récapitulés sur la Fig.A.5.

7 Les facteurs de structure des états réguliers sur le réseau hexagonal

Ils sont récapitulés sur la Fig.A.6.

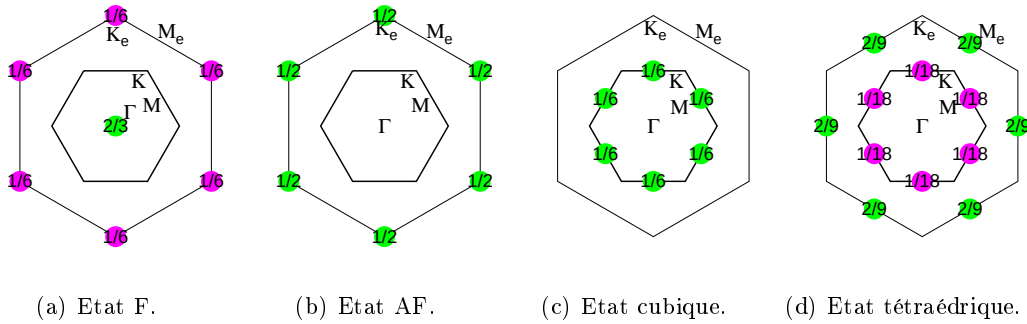


FIG. A.6 – Facteurs de structure $S(\mathbf{Q})/N_s$ des états réguliers du réseau hexagonal. L'hexagone central est la ZdB, le grand la ZdB.

Annexe B

Méthodes numériques

1 La méthode Wang-Landau

1.1 La méthode Monte Carlo

La méthode Monte Carlo est un processus stochastique avec un processus d'évolution décrit par une chaîne de Markov. Pour les systèmes en équilibre, l'équation maîtresse de ce processus vérifie la stationnarité de la cinétique à long terme : cela donne un système avec une infinité d'équations à résoudre. Pour obtenir un algorithme facile à implémenter, on peut introduire le bilan détaillé pour chaque paire d'états A et B :

$$p(A)w(A \rightarrow B) = p(B)w(B \rightarrow A) \quad (\text{B.1})$$

où $p(A)$ est la probabilité d'être dans l'état A et $w(A \rightarrow B)$ la probabilité d'aller vers l'état B étant dans l'état A .

L'interprétation physique de cette équation est une réversibilité locale. Il est facile de vérifier que le bilan détaillé est une condition suffisante pour obtenir un algorithme stationnaire. Cependant, le bilan détaillé admet une infinité de solutions.

Le choix historique de Metropolis consiste à réaliser un échantillon $\{\alpha_i\}_{i=1..n}$ de n configurations spatiales à une température donnée T . La probabilité d'un état α d'énergie E_α est

$$P(\alpha, T) = \frac{e^{-E_\alpha/k_B T}}{Z(T)} \quad (\text{B.2})$$

avec Z la fonction de partition et k_B la constante Boltzmann.

$$Z(T) = \sum_{\alpha} e^{-E_\alpha/k_B T} \quad (\text{B.3})$$

En partant d'une configuration α_i et d'une énergie E_i , on fait un changement local (un retournement de spin, un déplacement aléatoire d'une particule, ...) on obtient une nouvelle configuration α_j d'énergie E_j . La nouvelle configuration est acceptée selon le critère de Métropolis avec la probabilité

$$p(\alpha_i \rightarrow \alpha_j) = \min(1, e^{-\beta(E_j - E_i)}).$$

Selon l'acceptation ou le refus, l'état suivant est α_i ou α_j .

Une simulation typique est divisée en deux parties : d'abord, on part d'une configuration aléatoire, puis le système évolue jusqu'à atteindre l'équilibre. Ensuite, la cinétique se poursuit et des moyennes (la magnétisation, la chiralité, la vorticit  ...) sont calcul  es en

utilisant les configurations générées par la chaîne de Markov de l'algorithme de Métropolis. Si l'on choisit une quantité A , sa valeur moyenne exacte à la température T est

$$\langle A \rangle(T) = \frac{1}{Z(T)} \sum_{\alpha} A(\alpha) e^{-E_{\alpha}/k_B T} \quad (\text{B.4})$$

Avec la méthode Monte Carlo, elle est approximée par

$$\langle A \rangle(T) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A(\alpha_i) \quad (\text{B.5})$$

Cet algorithme de Métropolis est une méthode puissante et est très facile à implémenter, mais elle a deux inconvénients majeurs : premièrement, elle nécessite une simulation pour chaque température et deuxièmement, on observe un ralentissement critique près d'une transition de phase du second ordre, ce qui mène à une faible convergence de l'algorithme. Le ralentissement critique est caractérisé par un temps caractéristique divergent associé à la relaxation des fluctuations. Ces fluctuations sont aussi associées à l'existence d'une longueur caractéristique, appelée longueur de corrélation, qui devient infinie à la transition. Pour une transition du premier ordre, l'algorithme de Métropolis présente un temps caractéristique associé à l'existence d'une barrière d'énergie libre divergente entre états stables.

Pour surmonter ces difficultés, différentes stratégies ont été développées durant les 20 dernières années. Parmi elles, des algorithmes de cluster (Swendsen and Wang,), la méthode du recuit simulé (Bergs and Neuhaus,), ... Comme la nature de la transition de phase n'est pas bien définie dans notre cas, nous avons utilisé une méthode récente, due à Wang-Landau, basée sur le calcul de la densité d'états $g(E)$.

En effet, une fois cette quantité obtenue, les quantités thermodynamiques peuvent être facilement obtenues selon la formule

$$\langle A \rangle(T) = \int_E \langle A \rangle_E g(E) e^{-E/k_B T} dE \quad (\text{B.6})$$

où $\langle A \rangle_E$ est la moyenne de A sur les états d'énergie E et $g(E)$ la densité d'état pour E . Connaissant $\langle A \rangle_E$ et $g(E)$, on connaît alors $\langle A \rangle_T$ pour toute température T . La méthode Wang-Landau nous permet d'accéder à ces quantités en une seule simulation. De plus, nous n'avons ni le problème du ralentissement pour une transition du second ordre, ni l'effet d'hystérésis pour une transition du premier ordre.

1.2 L'algorithme de Wang-Landau

Si l'on réalise une marche aléatoire à température finie T , la probabilité d'obtenir l'énergie E est proportionnelle à $g(E)e^{-E/k_B T}$. Quand $T \rightarrow \infty$, c'est proportionnel à $g(E)$. Mais une telle marche aléatoire n'est pas réalisable car l'étalement des valeurs de $g(E)$ est grand : la probabilité d'avoir une énergie où $g(E)$ est grand est grande et la précision sur $g(E)$ sera excellente. Mais d'un autre côté, la probabilité d'avoir une énergie pour laquelle $g(E)$ est faible est faible et l'erreur sur $g(E)$ sera grande. Pour avoir une bonne distribution là où $g(E)$ est petit, on aurait besoin d'un nombre de pas énorme.

La solution est d'échantillonner uniformément en énergie. Si l'on accepte une configuration d'énergie E avec une probabilité proportionnelle à $1/g(E)$, alors la probabilité d'avoir l'énergie E devient indépendante de E . La méthode Wang-Landau consiste à trouver par approximation successive une loi de probabilité qui donne une distribution uniforme en énergie lors d'une marche aléatoire. ([107], [106]) Lors de la simulation, l'énergie est discretisée : $E \in \{E_j = E_{\text{down}} + j\Delta E, j = 0..N_E\}$. Le nombre de fois où chaque énergie est

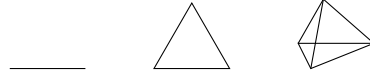


FIG. B.1 – Simplexes à une, deux et trois dimensions.

atteinte est stockée dans un histogramme et une fonction $sg(E)$ (le $g(E)$ supposé, pris constant au départ) est modifié jusqu'à obtenir un histogramme plat.

A chaque fois qu'une configuration est acceptée, $sg(E)$ est multiplié par un facteur de modification f ($f > 1$), où E est l'énergie de l'état. On a alors fait un pas de la marche aléatoire. On accepte le mouvement avec la probabilité

$$\min\left(\frac{sg(E)}{sg(E_{new})}, 1\right) \quad (\text{B.7})$$

(selon le critère de Métropolis). Si le mouvement est accepté, on multiplie $sg(E_{new})$ par f , sinon, on le fait de nouveau à $sg(E)$, pour respecter le bilan détaillé.

Lorsque l'histogramme est "plat" (lorsque toutes les colonnes sont plus grandes qu'un pourcentage arbitraire de leur valeur moyenne, par exemple 80 %), on diminue le facteur de modification (par exemple, $f \rightarrow \sqrt{f}$), on efface l'histogramme et on recommence, jusqu'à ce que f soit assez proche de 1. En faisant ainsi, $sg(E)$ converge vers $g(E)$. Une fois le $sg(E)$ obtenu satisfaisant, on peut calculer la moyenne de quantités comme la chiralité et la vorticité, pour chaque énergie, pendant une marche aléatoire produisant un histogramme plat.

On peut ensuite calculer la fonction de partition, l'évolution de la chiralité C avec la température, la distribution d'énergie à une température donnée $P(E, T)$, ... :

$$Z(T) = \sum_E g(E) e^{E/k_B T} \Delta E \quad (\text{B.8})$$

$$\langle C \rangle(T) = \frac{1}{Z(T)} \sum_E g(E) \langle C \rangle_E e^{E/k_B T} \Delta E \quad (\text{B.9})$$

$$P(E, T) = \frac{1}{Z(T)} g(E) e^{E/k_B T} \Delta E \quad (\text{B.10})$$

2 La méthode Nelder-Mead

2.1 Quelques définitions

Polytope Un polytope en 2D est un polygone, en 3D, c'est un polyèdre... en dimension quelconque, c'est un polytope.

Simplexe Un simplexe est l'enveloppe convexe d'un ensemble de $n + 1$ points formant un repère affine dans un espace euclidien de dimension n . En dimension 1, un simplexe est un segment de longueur non nulle. En dimension 2, c'est un triangle non trivial. En dimension 4, c'est un tétraèdre (voir Fig.B.1), ... En dimension n , c'est un polytope à $n + 1$ points.

2.2 La méthode

Inventée en 1965, elle sert à minimiser une fonction f dans un espace à N dimensions. Elle est infaillible pour une fonction convexe.

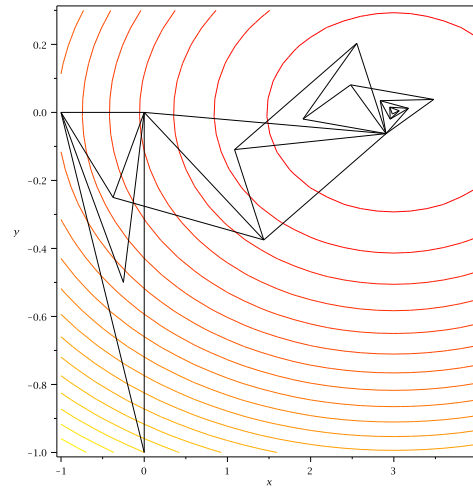


FIG. B.2 – Exemple de trajectoire d'un simplexe en 2D. Les lignes rouges-oranges sont des courbes de niveau.

On démarre avec un simplexe de l'espace des inconnues. Soit x_M le coin où la fonction est maximale, x_0 le centre de gravité de tous les points sauf x_M . On cherche à remplacer x_M par un autre point. Plusieurs opérations sont possibles pour obtenir le point de remplacement :

- la réflexion de x_M par rapport à l'hyperplan défini par la face opposée du simplexe (celle passant par tous les points autres que x_M) qui donne le point $2x_0 - x_M$,
- l'homothétie de rapport -2 et de centre x_0 qui donne le point $3x_0 - 2x_M$,

Si on tourne en boucle (réflexion du même point à répétition), on est dans une vallée, et on réduit le simplexe par une similitude centrée sur le point du simplexe où la fonction est minimale. Un exemple de trajectoire dans un espace à deux dimensions est représenté Fig.B.2. Le simplexe (un triangle) subit des réflexions, des étirements et des contractions vers la fin de la trajectoire, où il est *tombé* vers le minimum de la fonction.

2.3 L'algorithme

Il est décrit Fig.B.3.

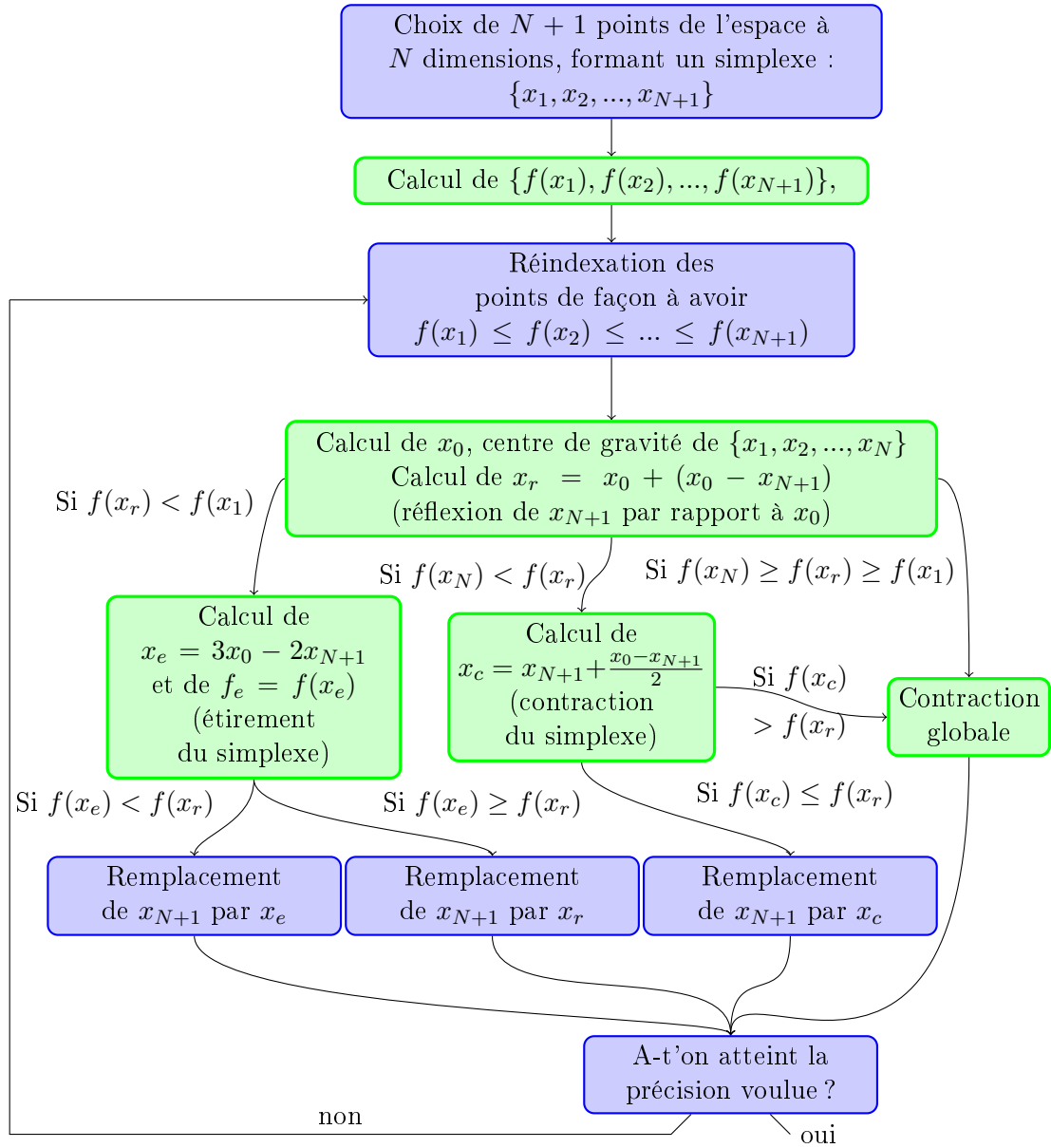


FIG. B.3 – Description de l'algorithme du simplexe.

Annexe C

Les bosons de Schwinger en champ moyen

1 Réglage des λ_i , efficacité du simplexe

1.1 Unicité des λ_i respectant la contrainte

Soit H un Hamiltonien d'opérateurs bosoniques comprenant le terme

$$- \sum_i \lambda_i (\hat{n}_i - \kappa). \quad (\text{C.1})$$

permettant d'ajuster le nombre moyen de bosons sur chaque site i du fondamental grâce aux multiplicateurs de Lagrange λ_i .

Si ce Hamiltonien possède d'autres paramètres que les λ_i (par exemple des paramètres de lien A_{ij} ou B_{ij}), on les prend fixés dans cette section. L'énergie E_0 du fondamental de H n'est donc une fonction que des $\lambda_i : E_0(\{\lambda_i\})$. On cherche les λ_i qui vérifient la contrainte, c'est à dire ceux pour lesquels la dérivée de E_0 par rapport à chacun des λ_i est nulle :

$$\forall k, \quad \frac{\partial E_0(\{\lambda_i\})}{\partial \lambda_k} = 0. \quad (\text{C.2})$$

Nous allons montrer que s'il existe une solution, elle est unique et correspond à un maximum de la fonction $E_0(\{\lambda_i\})$. Pour cela, il est suffisant de montrer que cette fonction est concave aux points de dérivée nulle en λ_i , ce se montre facilement grâce à un développement en perturbation autour d'un de ces points de dérivée nulle :

$$H_\delta = H - \alpha \sum_i \delta \lambda_i (n_i - \kappa) \quad (\text{C.3})$$

$$= H + \alpha V. \quad (\text{C.4})$$

Soit $|\phi\rangle$ l'état fondamental de H_δ (que l'on suppose non dégénéré) associé à l'énergie E . On peut exprimer $|\phi\rangle$ et E comme un développement limité en α :

$$|\phi\rangle = |\phi_0\rangle + \alpha |\phi_1\rangle + \alpha^2 |\phi_2\rangle + O(\alpha^3) \quad (\text{C.5})$$

$$E = E_0 + \alpha E_1 + \alpha^2 E_2 + O(\alpha^3) \quad (\text{C.6})$$

En réinjectant ces expressions dans C.4 et en séparant les différents ordres, on obtient :

$$\begin{cases} H_0 |\phi_0\rangle = E_0 |\phi_0\rangle \\ H_0 |\phi_1\rangle + V |\phi_0\rangle = E_0 |\phi_1\rangle + E_1 |\phi_0\rangle \\ H_0 |\phi_2\rangle + V |\phi_1\rangle = E_0 |\phi_2\rangle + E_1 |\phi_1\rangle + E_2 |\phi_0\rangle \end{cases} \quad (\text{C.7})$$

En multipliant ces égalités à gauche par $\langle \phi_0 |$ ou par un élément d'une base de vecteurs propres de $H_0 : \langle \phi_0^i |$, associés aux énergies propres $E^i \neq E_0$, on obtient :

$$E_1 = \langle \phi_0 | V | \phi_0 \rangle \quad (\text{C.8})$$

$$|\phi_1\rangle = \sum_i \frac{\langle \phi_0^i | V | \phi_0 \rangle}{E_0 - E^i} |\phi_0^i\rangle \quad (\text{C.9})$$

$$E_2 = \sum_i \frac{|\langle \phi_0^i | V | \phi_0 \rangle|^2}{E_0 - E^i}. \quad (\text{C.10})$$

$E_2 \leq 0$, donc, l'énergie est concave (sauf cas particulier où cette valeur est nulle, ce qui se produit si $|\phi_0\rangle$ est une fonction propre de V). Le point où la dérivée s'annule est donc un maximum de l'énergie. S'il existe, il est donc unique (preuve par l'absurde : s'il en existe deux, il y a un point entre les deux où l'énergie est minimale dans une direction de l'espace des λ_i , donc, non concave).

1.2 Méthode numérique de résolution

Une méthode numérique de maximisation d'une fonction possible est celle du simplexe (ou méthode de Nelder-Mead). Pour l'ajustement des λ_i , il se trouve que cette méthode est particulièrement appropriée. En effet, le simplexe trouve toujours le maximum d'une fonction lorsque

- la fonction est concave,
- et le domaine de recherche est convexe.

Le rôle de la deuxième condition est que le simplexe ne reste pas coincé à proximité d'une frontière où se trouve bien un maximum local, mais où les dérivées de la fonction ne sont pas nulles. Dans notre cas, le domaine de recherche est l'ensemble des λ_i pour lesquels les énergies propres du Hamiltonien sont strictement positives. Prenons deux points de cet espace. En ces points, les Hamiltoniens n'ont que des énergies propres strictement positives. Ce sont donc deux formes quadratiques strictement positives. Les points de la droite les reliant correspondent donc à des Hamiltoniens combinaisons linéaires à coefficients positifs de ces deux formes quadratiques, qui possèdent donc aussi des énergies propres strictement positives. Ces points font donc partie du domaine de recherche. Nous avons prouvé qu'il était convexe.

En conclusion, lorsque les λ_i ajustant le nombre de bosons existent, le simplexe est une méthode numérique adaptée, qui va toujours converger vers la solution recherchée.

2 Réglage des A_{ij} et B_{ij}

2.1 Conséquence de l'autocohérence sur les dérivées de l'énergie

On a vu dans la section précédente comment ajuster les λ_i . On les considère à présent comme des fonctions des A_{ij} et B_{ij} . Le Hamiltonien n'a donc plus comme paramètres que ces A_{ij} et B_{ij} .

Soit $E_0(\{A_{ij}\}, \{B_{ij}\})$ l'énergie du fondamental $|\tilde{0}\rangle$ du Hamiltonien de champ moyen H_{MF} . Nous allons montrer que pour avoir l'autocohérence (A_{ij} et B_{ij} égaux aux valeurs moyennes des opérateurs $\hat{A}_{ij}$ et $\hat{B}_{ij}$ dans l'état $|\tilde{0}\rangle$), il est nécessaire et suffisant que les dérivées de E_0 par rapport à ces variables soient nulles.

$$\frac{\partial E_0}{\partial A_{ij}} = \frac{\partial (\langle \tilde{0} | H_{MF} | \tilde{0} \rangle)}{\partial A_{ij}} \quad (\text{C.11})$$

$$= \frac{\partial \langle \tilde{0} |}{\partial A_{ij}} H_{MF} | \tilde{0} \rangle + \langle \tilde{0} | \frac{\partial H_{MF}}{\partial A_{ij}} | \tilde{0} \rangle + \langle \tilde{0} | H_{MF} \frac{\partial | \tilde{0} \rangle}{\partial A_{ij}}. \quad (\text{C.12})$$

La contrainte sur la norme de l'état $|\tilde{0}\rangle$ implique que $\frac{\partial \langle \tilde{0} |}{\partial A_{ij}} |\tilde{0}\rangle$ est imaginaire pur.

$$\Rightarrow \frac{\partial E_0}{\partial A_{ij}} = \langle \tilde{0} | \frac{\partial H_{MF}}{\partial A_{ij}} | \tilde{0} \rangle. \quad (C.13)$$

Or, d'après l'Eq.2.34, $\frac{\partial H_{MF}}{\partial A_{ij}}$ donne un terme proportionnel à $A_{ij}^* - \hat{A}_{ij}^\dagger$ plus le terme $\sum_l \frac{\partial \lambda_l}{\partial A_{ij}} (\hat{n}_l - \kappa)$. La moyenne de ce dernier terme dans l'état $|\tilde{0}\rangle$ est nulle lorsque la contrainte du nombre de bosons par site est respectée.

On a donc montré qu'aux points autocohérents, l'énergie du fondamental est un point où toutes les dérivées par rapport aux paramètres s'annulent. Pour appliquer cette constatation, on peut utiliser à nouveau la méthode de Nelder-Mead. Cette fois ci, on n'a pas d'argument disant que cette méthode est adaptée. Le paysage énergétique en fonction des A_{ij} et B_{ij} peut être très compliqué, et posséder de multiples points autocohérents. Le simplexe nous oblige à nous limiter aux extrêmes (en fait, on s'est même limité en pratique aux minima).

2.2 Borne supérieure au module des A_{ij} et B_{ij}

Pour tout lien ij , la phase de A_{ij} peut être quelconque, puisqu'on peut la modifier par une transformation de jauge. Par contre, son module est invariant de jauge et a donc une signification physique. Pour l'ajuster par autocohérence, il est utile de connaître ses bornes, ce qui restreint le domaine à explorer. En un point vérifiant les équations d'autocohérence, $|A_{ij}| \leq (\kappa + 1)/2$ et $|B_{ij}| \leq \kappa/2$. La démonstration suit ci-dessous.

Soit un état fondamental $|\phi\rangle$ normé. On l'exprime dans la base des états à nombre de bosons fixés :

$$|\phi\rangle = \sum_n \alpha_n |n\rangle, \quad (C.14)$$

où n est l'ensemble des nombres de bosons n_{a_i} , n_{b_i} et α_n est un nombre complexe.

On cherche à majorer $|A_{12}|$ et $|B_{12}|$. La première ligne est une conséquence de l'autocohérence.

$$\begin{aligned} |A_{12}| &= |\langle \phi | A_{12} | \phi \rangle| \\ &= \frac{1}{2} \left| \langle \phi | a_1 b_2 - a_2 b_1 | \sum_n \alpha_n |n\rangle \right| \\ &= \frac{1}{2} \left| \sum_n \alpha_n \langle \phi | (\sqrt{n_{a_1}} \sqrt{n_{b_2}} |n_{a_1}-1, n_{b_2}-1, \dots\rangle - \sqrt{n_{a_2}} \sqrt{n_{b_1}} |n_{a_2}-1, n_{b_1}-1\rangle) \right| \\ &= \frac{1}{2} \left| \sum_n \alpha_n \sqrt{n_{a_1}} \sqrt{n_{b_2}} \alpha_{n_{a_1}-1, n_{b_2}-1, \dots}^* - \alpha_n \sqrt{n_{a_2}} \sqrt{n_{b_1}} \alpha_{n_{a_2}-1, n_{b_1}-1, \dots}^* \right| \\ &\leq \frac{1}{2} \sum_n \left(\left| \sqrt{n_{a_1}} \alpha_n \sqrt{n_{b_2}} \alpha_{n_{a_1}-1, n_{b_2}-1, \dots}^* \right| + \left| \sqrt{n_{a_2}} \alpha_n \sqrt{n_{b_1}} \alpha_{n_{a_2}-1, n_{b_1}-1, \dots}^* \right| \right). \end{aligned}$$

On utilise maintenant l'inégalité $|u||v| < (|u|^2 + |v|^2)/2$ pour se débarrasser des produits d' α .

$$|A_{12}| \leq \frac{1}{4} \sum_n \left(n_{a_1} |\alpha_n|^2 + n_{b_2} |\alpha_{n_{a_1}-1, n_{b_2}-1, \dots}^*|^2 + n_{a_2} |\alpha_n|^2 + n_{b_1} |\alpha_{n_{a_2}-1, n_{b_1}-1, \dots}^*|^2 \right).$$

Chacune des 4 sommes sur n est une valeur moyenne d'un nombre de bosons. Or, grâce à l'autocohérence, on connaît leur nombre total κ sur un site, ce qui permet d'avoir une

borne supérieure ne dépendant que de κ :

$$\begin{aligned} |A_{12}| &\leq \frac{1}{4}(\langle n_{a_1} \rangle + \langle n_{b_2} + 1 \rangle + \langle n_{a_2} \rangle + \langle n_{b_1} + 1 \rangle) \\ &\leq \frac{\kappa + 1}{2}. \quad \square \end{aligned}$$

On s'y prend de la même manière pour B_{12} :

$$\begin{aligned} |B_{12}| &= \frac{1}{2} \left| \langle \phi | a_1^\dagger a_2 + b_1^\dagger b_2 | \sum_n \alpha_n | n \rangle \right| \\ &= \frac{1}{2} \left| \sum_n (\alpha_n \sqrt{n_{a_2}} \sqrt{n_{a_1} + 1} \alpha_{n_{a_1}+1, n_{a_2}-1, \dots}^* + \alpha_n \sqrt{n_{b_2}} \sqrt{n_{b_1} + 1} \alpha_{n_{b_1}+1, n_{b_2}-1, \dots}^*) \right| \\ &\leq \frac{1}{4} \sum_n (n_{a_2} |\alpha_n|^2 + (n_{a_1} + 1) |\alpha_{n_{a_1}+1, n_{a_2}-1, \dots}|^2 + n_{b_2} |\alpha_n|^2 \\ &\quad + (n_{b_1} + 1) |\alpha_{n_{b_1}+1, n_{b_2}-1, \dots}|^2) \\ &\leq \frac{1}{4} (\langle n_{a_2} \rangle + \langle n_{a_1} \rangle + \langle n_{b_2} \rangle + \langle n_{b_1} \rangle) \\ &\leq \frac{\kappa}{2}. \end{aligned}$$

3 Expulsion du flux : conditions et limitations

La raison pour laquelle on choisit d'imposer des symétries est principalement la limitation du nombre de paramètres à ajuster en SBMFT, tout en garantissant l'existence d'un état autocohérent dans le domaine restant. Tchernyshyov *et al.* [99] ont montré qu'alors, grâce à un développement en puissances de κ , les flux interviennent dans l'énergie de champ moyen pour un Hamiltonien Heisenberg AF. Ce développement, rappelé en Sec.3.1 suggère que les flux 0 minimisent l'énergie. Des flux nuls ne sont pas toujours possibles : certains réseaux dit frustrés ne peuvent pas avoir des flux nuls partout. D'autre part, il arrive que ce soient les interactions qui, en modifiant le développement en κ , modifient la conclusion, comme nous le verrons en Sec.3.2.

Mais le choix d'imposer des symétries est-il justifié ? Il suppose que les symétries du réseau ne sont pas brisées dans l'état de champ moyen d'énergie minimale. Nous verrons en Sec.3.3 sur un exemple qu'il n'est pas toujours justifié.

3.1 Développement de Tchernyshyov

Soit un Ansatz avec uniquement des A_{ij} , avec $P_{ij} = J_{ij} A_{ij} / 8$. Avec l'hypothèse que tous les λ sont identiques et que tous les J_{ij} sont identiques, disons 1, on arrive aux deux équations suivantes (les calculs sont détaillés dans l'article [99]) :

$$H = - \frac{\left(\text{Tr} \left(U (I - U)^{-1/2} \right) \right)^2}{4 \text{Tr} (U)} \quad (\text{C.15})$$

$$N_s(1 + \kappa) = \text{Tr} \left((I - U)^{-1/2} \right) \quad (\text{C.16})$$

où $U = \frac{PP^\dagger}{\lambda^2}$.

Soit $u_i = \frac{1}{N_s} \text{Tr}(U^i)$. κ et H sont développables en puissances de U par l'intermédiaire des u_i .

$$2\kappa = u_1 + \frac{3u_2}{4} + \frac{5u_3}{8} + \frac{35u_4}{56} + O(u_5) \quad (\text{C.17})$$

$$\frac{H}{N_s} = -\frac{u_1}{4} - \frac{u_2}{4} - \frac{3u_3}{16} - \frac{u_2^2}{16u_1} - \frac{5u_4}{32} - \frac{3u_2u_3}{32u_1} + O(u_5) \quad (\text{C.18})$$

En combinant ces deux développements, on peut développer H en puissances de κ jusqu'à l'ordre voulu en U , Les coefficients devant les κ^i étant d'ordre 0 en U . Voilà le résultat à l'ordre 8 :

$$\begin{aligned} \frac{H}{N_s} = & -\frac{\kappa}{2} - \frac{\kappa^2}{4} \frac{u_2}{u_1^2} - \frac{\kappa^3}{4} \left(\frac{u_3}{u_1^3} - \frac{u_2^2}{u_1^4} \right) - \frac{\kappa^4}{16} \left(5 \frac{u_4}{u_1^4} - 14 \frac{u_2u_3}{u_1^5} + 9 \frac{u_2^3}{u_1^6} \right) \\ & - \frac{\kappa^5}{16} \left(7 \frac{u_5}{u_1^5} - 12 \frac{u_3^2}{u_1^6} - 25 \frac{u_2u_4}{u_1^6} + 57 \frac{u_2^2u_3}{u_1^7} - 27 \frac{u_2^4}{u_1^8} \right) \\ & - \frac{\kappa^6}{32} \left(21 \frac{u_6}{u_1^6} - 91 \frac{u_2u_5}{u_1^7} - 85 \frac{u_3u_4}{u_1^7} + 230 \frac{u_2u_3^2}{u_1^8} + 240 \frac{u_2^2u_4}{u_1^8} - 504 \frac{u_2^3u_3}{u_1^9} + 189 \frac{u_2^5}{u_1^{10}} \right) \\ & - \frac{\kappa^7}{32} \left(33 \frac{u_7}{u_1^7} - 168 \frac{u_2u_6}{u_1^8} - 154 \frac{u_3u_5}{u_1^8} - 75 \frac{u_4^2}{u_1^8} + 940 \frac{u_2u_3u_4}{u_1^9} + 504 \frac{u_2^2u_5}{u_1^9} + 150 \frac{u_3^3}{u_1^9} \right. \\ & \left. - 1170 \frac{u_2^3u_4}{u_1^{10}} - 1680 \frac{u_3^2u_2^2}{u_1^{10}} + 2349 \frac{u_2^4u_3}{u_1^{11}} - 729 \frac{u_2^6}{u_1^{12}} \right) \\ & - \frac{\kappa^8}{256} \left(-2268 \frac{u_3u_6}{u_1^9} + 429 \frac{u_8}{u_1^8} + 7525 \frac{u_2u_4^2}{u_1^{10}} - 2508 \frac{u_2u_7}{u_1^9} - 2170 \frac{u_4u_5}{u_1^9} + 8442 \frac{u_2^2u_6}{u_1^{10}} \right. \\ & + 24057 \frac{u_2^7}{u_1^{14}} - 21546 \frac{u_2^3u_5}{u_1^{11}} - 19200 \frac{u_2u_3^3}{u_1^{11}} + 89100 \frac{u_2^3u_3^2}{u_1^{12}} + 46575 \frac{u_2^4u_4}{u_1^{12}} \\ & \left. - 90882 \frac{u_2^5u_3}{u_1^{13}} - 60210 \frac{u_2^2u_3u_4}{u_1^{11}} + 15456 \frac{u_2u_3u_5}{u_1^{10}} + 7200 \frac{u_3^2u_4}{u_1^{10}} \right) + O(u_9) \quad (\text{C.19}) \end{aligned}$$

Un terme u_n est la somme sur toutes les boucles de longueur $2n$, $\{ijkl\dots z\}$ du produit

$$P_{ij}P_{jk}^\dagger P_{kl}\dots P_{zi}^\dagger = \frac{1}{(-64)^n} A_{ij}A_{jk}^* A_{kl}\dots A_{zi}^*, \quad (\text{C.20})$$

ce qui fait apparaître les cosinus des flux dans le développement (le terme précédent apparaît, ainsi que son complexe conjugué pour la boucle décalée d'un cran). Pour minimiser l'énergie au second ordre, il faut maximiser u_2 , ce qui, à modules des A_{ij} fixés se réalise en ajustant tous les flux à 0. Sur le réseau kagomé, il n'y a pas de boucles de longueur 4 non triviales. C'est donc le terme d'ordre κ^3 qui jouera le premier un rôle et les états de flux 0 sur les hexagones qui seront favorisés.

Tchernyshyov *et al.* on alors fait la conjecture d'expulsion du flux : si des Ansätze de flux 0 autour de toute boucle paire existent, alors, le fondamental de champ moyen aura l'un de ces Ansätze.

Mais sur certains réseaux, de tels Ansätze n'existent pas. On dit qu'ils sont frustrés. C'est le cas dès qu'il existe une boucle possédant un nombre impair de liens : on peut fabriquer une boucle de longueur paire en la parcourant deux fois dans le même sens, ou une fois dans un sens et une fois dans l'autre. Le flux de l'une de ces deux boucles est π . Un exemple moins trivial mais construit sur le même principe consiste en le motif du noeud papillon (Fig.C.1). En parcourant ses 6 liens de deux façons différentes, on obtient deux flux dont la différence vaut π : quelles que soient les valeurs des 6 A_{ij} , on ne pourra jamais annuler simultanément ces deux flux. Tchernyshyov fournit l'exemple du tétraèdre, lui aussi composé de triangles.

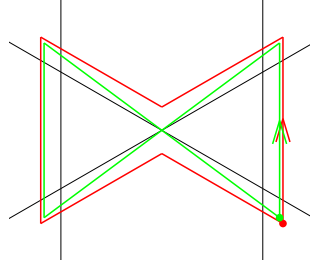


FIG. C.1 – Exemple de réseau frustré pour les flux en A_{ij} : le noeud-papillon, que l'on retrouve sur les réseaux triangulaires et kagome. Les flux rouges et verts ont une différence de π .

3.2 Développement en κ avec Dzyaloshinskii-Moriya

Tchernyshyov s'est limité aux interactions Heisenberg. Si l'on prend en compte d'autres types d'interactions, sa conjecture ne s'étend pas : l'état fondamental dans la limite $\kappa \rightarrow 0$ n'est pas celui qui expulse les flux. Nous allons le montrer sur l'exemple du réseau kagome avec interaction AF premiers voisins et Dzyaloshinskii-Moriya (DM).

L'intensité de l'interaction DM est notée θ_{ij} et intervient dans l'énergie selon

$$H = \frac{\cos^2(\theta)}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\vec{S}_i \vec{S}_j + 2 \tan \theta_{ij} (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) \cdot \vec{e}_z + \tan^2 \theta_{ij} (2S_i^z S_j^z - \vec{S}_i \vec{S}_j) \right) \quad (C.21)$$

Ce Hamiltonien s'exprime comme précédemment en fonction d'opérateurs $\hat{A}_{ij}$ sur les liens premiers voisins, mais ces opérateurs dépendent de θ_{ij} selon :

$$\hat{A}_{ij} = \frac{1}{2} \left(a_i b_j e^{-i\theta_{ij}} - a_j b_i e^{i\theta_{ij}} \right). \quad (C.22)$$

Le développement de Tchernyshyov est très similaire à celui sans DM. Mais les termes u_n font intervenir les θ_{ij} : ils sont la somme sur toutes les boucles de longueur $2n$, $\{ijkl\dots z\}$ du produit

$$P_{ij} P_{jk}^\dagger P_{kl} \dots P_{zi}^\dagger = \frac{1}{(-64)^n} A_{ij} A_{jk}^* A_{kl} \dots A_{zi}^* e^{i(\theta_{ij} + \theta_{jk} + \dots + \theta_{zi})}, \quad (C.23)$$

C'est cette fois le flux corrigé de la somme des θ_{ij} sur la boucle qu'il faut prendre en compte. Sur un hexagone, la sommation de toutes les boucles donne des termes du type $\cos(6\theta + \phi)$, avec $\theta = |\theta_{ij}|$ pris identique sur tous les liens et ϕ le flux d'un hexagone. On comprend grâce à la présence de ces termes que le flux 0 sur l'hexagone ne soit pas énergétiquement favorable pour certaines valeurs de κ et de θ , alors qu'il est favorisé sans DM. Le développement jusqu'à l'ordre 8 en κ sera effectué pour les différents Ansätze respectant les symétries du réseau en Sec.4. Il correspondra avec une grande précision aux calculs numériques de SBMFT.

On a donc montré que ce principe d'expulsion du flux dépend des interactions. S'il est valable pour une interaction Heisenberg, il ne l'est plus lorsqu'on y ajoute une interaction Dzyaloshinskii-Moriya. On peut aussi supposer que l'ajout d'un échange multiple modifiera d'une façon similaire cette conjecture et que sur le réseau triangulaire, le fondamental pourra posséder des flux non nuls autour des losanges.

3.3 Brisure spontanée des symétries du réseau

La conjecture d'expulsion du flux a été prouvée dans la limite $\kappa \rightarrow 0$ et dans le cas très particulier où tous les sites ont le même λ (ce qui est justifié si l'on choisit un Ansatz

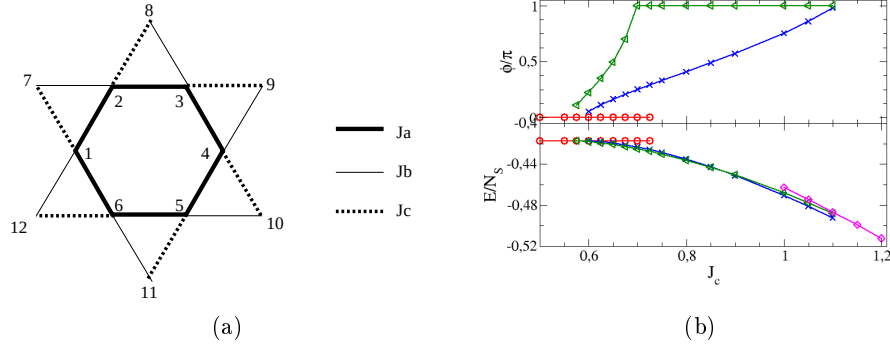


FIG. C.2 – Réseau et interactions avec brisure spontanée de symétrie en SBMFT. (a) L'étoile de David avec les couplages indiqués. (b) Evolution du flux de l'hexagone et de l'énergie par site lorsque $J_a = J_b = 1$ en fonction de J_c pour différents minima locaux d'énergie.

respectant assez de symétries pour que tous les sites soient équivalents), et où toutes les interactions sont Heisenberg et de même intensité (les J_{ij} sont tous identiques). Mais est-on certains que les Ansätze qui respectent les symétries du réseau fournissent le fondamental ?

Nous allons montrer que ce n'est pas toujours le cas. Prenons un réseau en forme d'étoile de David avec des A_{ij} premiers voisins, dessiné Fig.C.2(a). Il possède deux familles de sites non équivalents par symétrie, que l'on va nommer les sites intérieurs et extérieurs, et trois types de liens, sur lesquels on place des interactions Heisenberg d'intensité J_a , J_b et J_c . Ce réseau comporte des triangles, donc, est frustré au niveau des flux. Mais il ne comporte qu'une boucle de longueur 6 non triviale et ne recoupant pas deux fois le même site : l'hexagone central.

Le réseau et les interactions respectent la symétrie par rotation d'ordre 6 autour du centre de l'hexagone. Si l'on impose cette symétrie à l'Ansatz, on a deux possibilités de flux dans l'hexagone : 0 ou π . Le problème de champ moyen consiste en l'ajustement de 3 modules de A_{ij} , une phase et 2λ pour ces deux possibilités. Les énergies par site obtenues sont $E/N_s = -0.46958$ pour le flux 0 et $E/N_s = -0.46786$ pour le flux π , pour $\kappa = 1$ et $J_a = J_b = J_c = 1$.

Relâchons maintenant partiellement les symétries, en n'imposant plus que la symétrie par rotation d'ordre 3. On double le nombre de paramètres à ajuster et les deux Ansätze précédents sont maintenant reliés continûment. L'énergie par site obtenue est $E/N_s = -0.47045$, pour un flux d'environ $3\pi/4$. Aucun élément ne permet d'affirmer que l'on a trouvé le minimum absolu d'énergie, mais cette solution prouve que des symétries spatiales sont spontanément brisées dans l'état fondamental en champ moyen.

L'évolution du flux de l'hexagone et de l'énergie par site avec J_c est représentée Fig.C.2(b). Différents minima locaux sont représentés. L'évolution des flux des différentes solutions se comprend qualitativement : Pour J_c très petit, la solution rouge est d'énergie constante. En effet, les A_{ij} sur les liens J_c sont nuls et les autres ne dépendent donc pas de J_c . C'est une solution de type *greedy bosons* [99]. Il ne reste alors qu'un seul flux défini sur l'étoile : celui de l'hexagone. Il est expulsé et vaut 0. Lorsque J_c augmente, il arrive un moment où mettre une faible intensité sur ces liens devient rentable (lignes bleue et verte), même si la solution précédente reste localement stable. Mais les boucles contribuant le plus à un éventuel développement en κ étant ceux des boucles avec les A_{ij} les plus grands en module, le flux s'écarte progressivement de 0 autour de l'hexagone au fur et à mesure que J_c augmente. La solution verte, qui a des $|A_{ij}|$ plus grands que la bleue sur les liens J_c est d'abord la plus basse en énergie. Elle crée du flux sur l'hexagone mais en défait sur

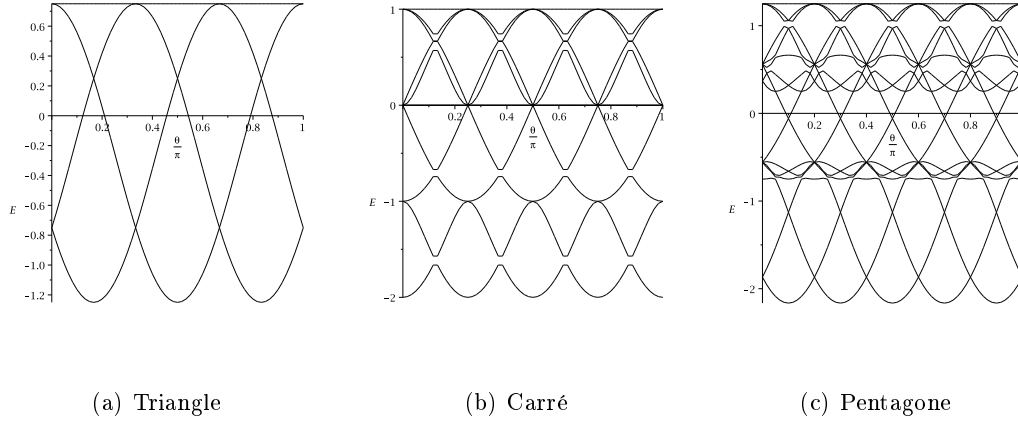


FIG. C.3 – Energies propres obtenues par diagonalisations exactes pour une interaction AF et DM premiers voisins sur de petits clusters.

d'autres boucles, ce qui le rend compétitive. Vers $J_c = 0.65$, le flux de l'hexagone sature à π et la solution bleue la rattrape en énergie vers 0.9. Puis, pour $J_c > 1$, on obtient une solution magenta pour laquelle le flux n'est pas défini : les A_{ij} sont nuls sur l'hexagone. Pour $J_c \sim 2.5$, c'est au tour des A_{ij} des liens J_b de s'annuler. Alors, l'énergie est celle de 6 liens isolés. Encore un exemple de *greedy bosons*.

La prise en compte des symétries permet donc une réduction du nombre de paramètre qui n'est pas du tout justifiée. Lorsque l'on choisit de chercher des fondamentaux qui les respectent, on risque de louper des solutions d'énergie plus basse, qui certes ne seront pas des liquides de spin, mais qui pourraient ressembler au fondamental du système de spins initial.

4 Périodicité en θ du Hamiltonien utilisé en SBMFT pour DM

Soit le Hamiltonien suivant

$$H_\theta = \frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S_i^z S_j^z + \frac{e^{2i\theta_{ij}}}{2} S_i^+ S_j^- + \frac{e^{-2i\theta_{ij}}}{2} S_i^- S_j^+ \right), \quad (\text{C.24})$$

utilisé en approximation d'une interaction AF premier voisins perturbée par une interaction Dzyaloshinskii-Moriya(DM) d'intensité θ selon la direction Oz perpendiculaire au réseau.

La résolution en SBMFT de ce Hamiltonien sur le réseau kagome pour différents Ansatz (détaillée Sec.4.1) et pour θ variant de 0 à 2π semble indiquer une périodicité de $\pi/3$ de l'énergie de l'état fondamental. Cette périodicité provient du Hamiltonien C.24 et du réseau, comme nous l'avons vérifié par des diagonalisations exactes sur de petites chaînes fermées à 3, 4 et 5 sites. L'énergie des différents états propres du Hamiltonien pour ces trois clusters est représentée Fig.C.3 et possède une périodicité de π/N_s en θ , avec N_s le nombre de sites de la chaîne.

Cette périodicité s'explique par une rotation locale des spins envoyant un état propre pour θ en un état propre de même énergie en $\theta + \pi/N_s$. Cette transformation peut s'étendre au réseau kagomé et explique la périodicité de $\pi/3$ constatée. Nous la détaillons ci-dessous.

Supposons que l'on puisse diviser le réseau étudié en N sous réseaux, numérotés de 0 à N tels que tous les liens (dirigés) subissant une interaction DM d'intensité θ relie deux sites des sous-réseaux $i, i + 1[N]$. Alors, la transformation :

$$a_j \rightarrow a_j e^{2ij\pi/N} \quad (C.25)$$

$$b_j \rightarrow b_j e^{-2ij\pi/N} \quad (C.26)$$

(qui correspond à une rotation d'angle $-2j\pi/N$ pour les spins des sites du sous-réseau j), envoie le Hamiltonien H_θ vers $H_{\theta+\pi/N}$. On a donc une périodicité de π/N en θ pour l'énergie.

Le réseau Kagomé avec interaction DM selon un axe fixé vérifie cette propriété pour $N = 3$, ce qui explique la périodicité de l'énergie du fondamental.

5 Certains Ansätze particuliers

5.1 Réseau triangulaire

Il y a deux Ansätze respectant toutes les symétries du réseau, repérés par leur flux autour d'un losange à quatre côtés : (0) et (π) [108]. Les spectres de spinons et de magnons sont décrits en Fig.C.4 et C.5. L'aimantation obtenue lors de la condensation est l'ordre coplanaire (Fig.1.6(c)) pour (0) et un continuum d'ordres non réguliers pour (π) .

L'Ansatz (0) La maille de l'Ansatz possède un seul site (Fig.C.4(a)). L'énergie des spinons est représentée Fig.C.4(c) et C.4(d), celle des magnons, en Fig. C.4(b). En $\kappa_c = 0.34$ [92], des spinons gapless à la limite thermodynamique apparaissent aux coins de zone (pour ce choix de jauge), donc en deux points inéquivalents de la zone de Brillouin notés $\mathbf{K}$ et $-\mathbf{K}$. Le λ critique est $\lambda_c = -3\sqrt{3}A$. L'aimantation obtenue lors de la condensation est l'ordre coplanaire (Fig.1.6(c))

L'Ansatz (π) La maille de l'Ansatz possède deux sites (Fig.C.5(a)). La bande d'énergie des spinons gapless est quatre fois dégénérée. Pour $\kappa_c = 0.75$ [108], des spinons gapless à la limite thermodynamique apparaissent aux points $\mathbf{Q} = (\frac{\pi}{2}, 0)$ et $-\mathbf{Q}$ dans la zone de Brillouin rectangulaire du réseau (dans la base $\mathbf{e}_i^q$). Le λ critique est $\lambda_c = -2\sqrt{3}A$. L'énergie des spinons est représentée Fig.C.5(c) et C.5(d), celle des magnons, en Fig. C.5(b). Les magnons mous ont des vecteurs d'onde aux coins et au centre de la ZdB rectangulaire (soit au centre et aux milieux de côtés de la ZdB du cristal). L'aimantation obtenue lors de la condensation fait partie d'un continuum d'états (calculs effectués en Sec.3.3).

5.2 Réseau kagome

Il y a quatre Ansätze respectant toutes les symétries du réseau, repérés par leur flux autour d'un hexagone et d'un losange à huit côtés : (0,0), $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ et (π, π) [108]. Les spectres de spinons et de magnons sont décrits en Fig.C.6, C.7, C.8, et C.9).

L'Ansatz (0,0) La maille de l'Ansatz possède trois sites. La maille, l'énergie des spinons et des magnons est représentée Fig.C.6. Il y a trois nappes différentes de spinons, chacune deux fois dégénérée. En $\kappa_c = 0.54$, quatre spinons gapless à la limite thermodynamique apparaissent en deux coins opposés de la zone de Brillouin, en $\pm\mathbf{K} = \pm(2\pi/3, 4\pi/3)$. Le λ critique est $\lambda_c = -2\sqrt{3}A$.

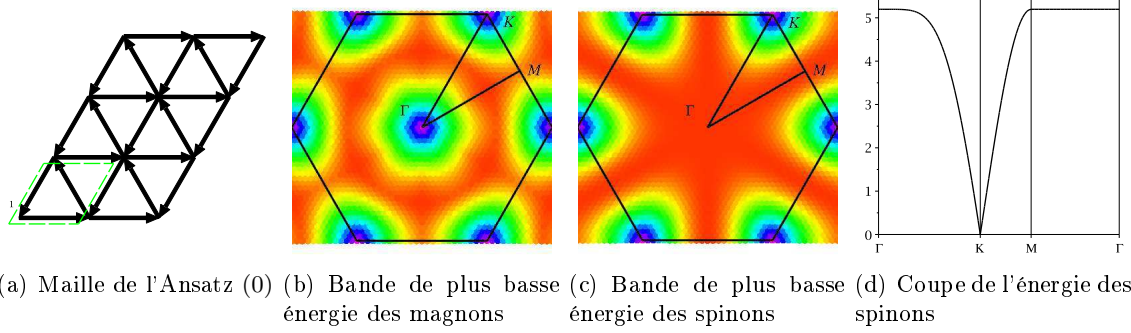


FIG. C.4 – Ansatz (0) sur le réseau triangulaire pour $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$. Le magenta est l'énergie la plus basse, le rouge, la plus haute.

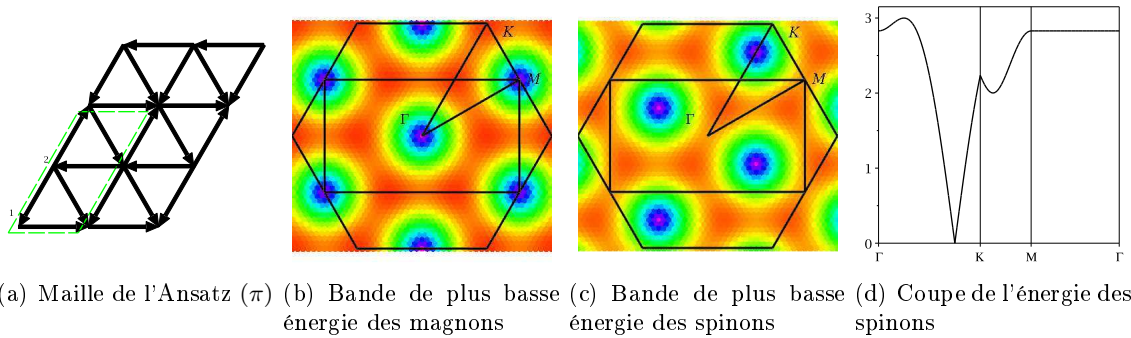


FIG. C.5 – Ansatz (π) sur le réseau triangulaire pour $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$.

Soit $z = e^{i\frac{\pi}{6}}$. La matrice du Hamiltonien en $\mathbf{K}$ est

$$M_{\mathbf{K}} = \sqrt{3} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & z & -z^* \\ 0 & 2 & 0 & -z^* & 0 & z \\ 0 & 0 & 2 & z & -z^* & 0 \\ 0 & -z & z^* & 2 & 0 & 0 \\ z^* & 0 & -z & 0 & 2 & 0 \\ -z & z^* & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.27})$$

où l'on a pris $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$. Cette matrice possède un vecteur propre de valeur propre nulle, de coordonnées

$$u_{\mathbf{K}} = \begin{pmatrix} z^* \\ -z \\ i \\ -iz^* \\ iz \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{C.28})$$

Pour $-\mathbf{K}$, on a le vecteur propre $u_{-\mathbf{K}}$ conjugué.

Pour obtenir les $\langle a_{i\mathbf{x}} \rangle$ et $\langle b_{i\mathbf{x}} \rangle$ d'un état condensé, on utilise l'égalité suivante

$$(\langle a_{1\mathbf{x}} \rangle, \langle a_{2\mathbf{x}} \rangle, \langle a_{3\mathbf{x}} \rangle, \langle b_{1\mathbf{x}} \rangle^*, \langle b_{2\mathbf{x}} \rangle^*, \langle b_{3\mathbf{x}} \rangle^*)^t = c_1 u_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{x}} + c_2 u_{-\mathbf{K}} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{x}} \quad (\text{C.29})$$

où c_i est un nombre complexe.

Les nombres de bosons sur les différents sites sont identiques, quels que soient c_1 et c_2 . Une homothétie des c_i modifie ce nombre. Les libertés restantes, au nombre de 3, correspondent à une rotation globale des spins.

On peut fixer $c_2 = 0$ et $c_1 = 1$. L'orientation obtenue est l'ordre $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ avec 3 sous-réseaux de spins à 120 degrés les uns des autres (Fig.1.7(g)).

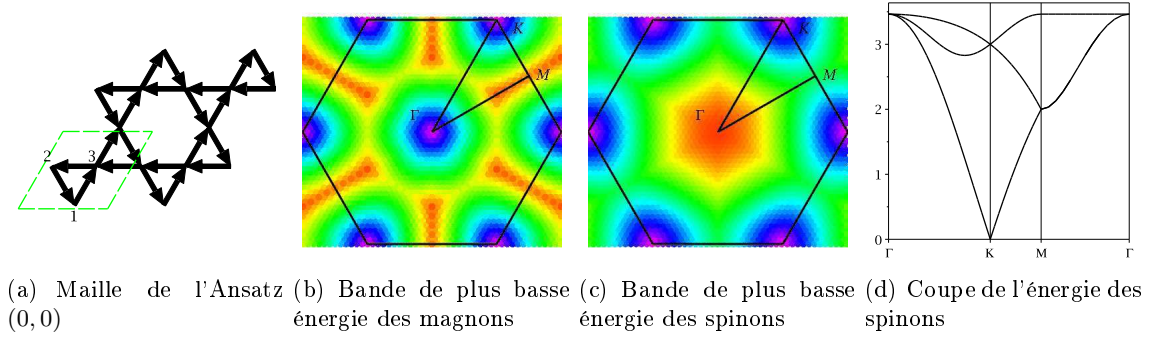
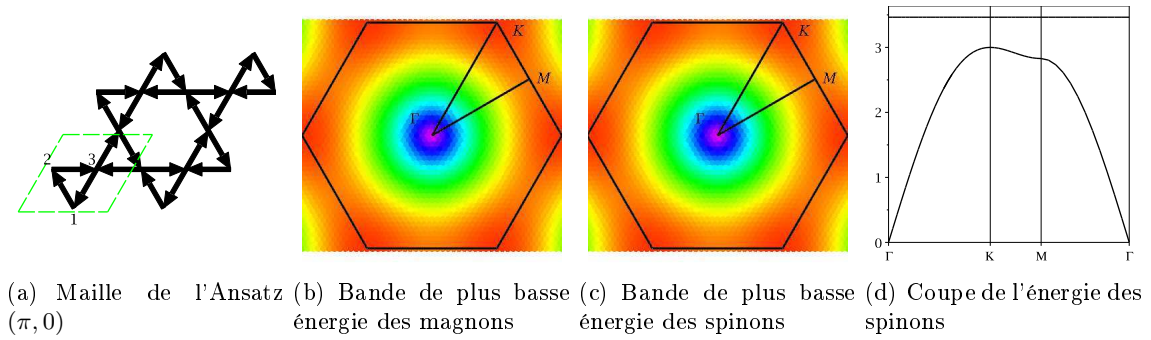
L'Ansatz $(\pi, 0)$ La maille de l'Ansatz possède trois sites. La maille, l'énergie des spinons et des magnons est représentée Fig.C.7. Il y a deux nappes différentes de spinons, la nappe supérieure étant deux fois dégénérée, la nappe inférieure 4 fois. En $\kappa_c = 0.5$, quatre spinons gapless à la limite thermodynamique apparaissent au centre de la zone de Brillouin Γ . Le λ critique est $\lambda_c = -2\sqrt{3}A$.

La matrice du Hamiltonien en Γ est

$$M_{\Gamma} = 2 \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & \sqrt{3} & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad (\text{C.30})$$

où l'on a pris $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$. Cette matrice possède deux vecteurs propres de valeurs propres nulles, de coordonnées

$$u_{\Gamma} = \begin{pmatrix} -i \\ e^{5i\pi/6} \\ e^{i\pi/6} \\ 1 \\ e^{-2i\pi/3} \\ e^{2i\pi/3} \end{pmatrix} \quad v_{\Gamma} = u_{\Gamma}^* = \begin{pmatrix} i \\ e^{-5i\pi/6} \\ e^{-i\pi/6} \\ 1 \\ e^{2i\pi/3} \\ e^{-2i\pi/3} \end{pmatrix} \quad (\text{C.31})$$


 FIG. C.6 – Ansatz (0,0) sur le réseau kagome pour $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$.

 FIG. C.7 – Ansatz (pi,0) sur le réseau kagome pour $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$.

Pour obtenir les $\langle a_{i\mathbf{x}} \rangle$ et $\langle b_{i\mathbf{x}} \rangle$ d'un état condensé, on utilise l'égalité suivante

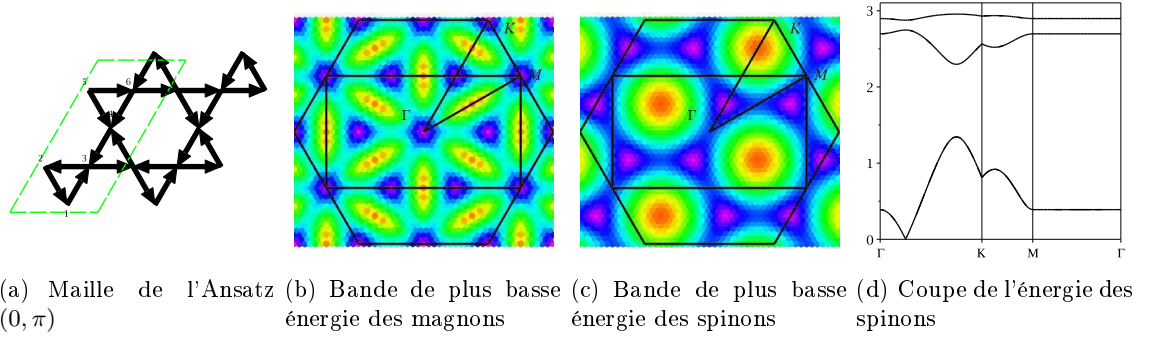
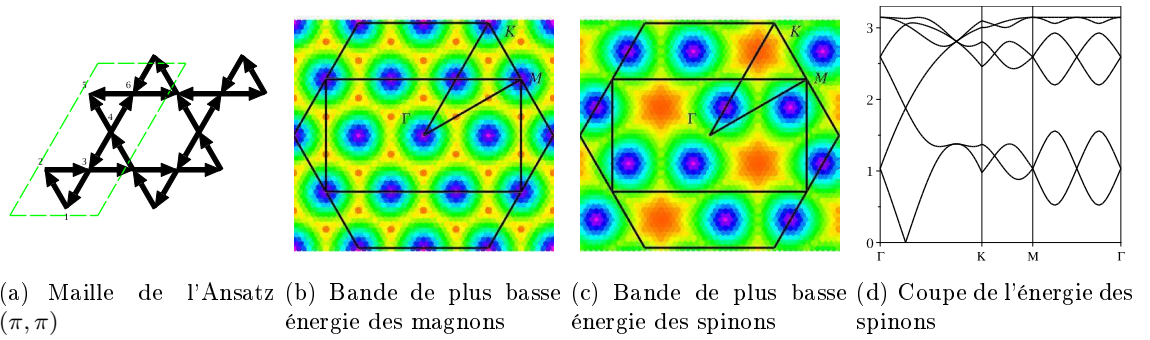
$$(\langle a_{1\mathbf{x}} \rangle, \langle a_{2\mathbf{x}} \rangle, \langle a_{3\mathbf{x}} \rangle, \langle b_{1\mathbf{x}} \rangle^*, \langle b_{2\mathbf{x}} \rangle^*, \langle b_{3\mathbf{x}} \rangle^*)^t = c_1 u_\Gamma + c_2 v_\Gamma, \quad (\text{C.32})$$

où c_i est un nombre complexe.

Les nombres de bosons sur les différents sites sont identiques quels que soient les c_i . Une homothétie des c_i modifie ce nombre. Les 3 libertés restantes correspondent à une rotation globale des spins. On peut fixer $c_2 = 0$ et $c_1 = 1$. L'orientation obtenue est l'ordre $\mathbf{q} = 0$ avec 3 sous-réseaux de spins à 120 degrés les uns des autres (Fig.1.7(b)).

L'Ansatz (0, pi) La maille de l'Ansatz possède six sites. La maille, l'énergie des spinons et des magnons est représentée Fig.C.8. Il y a trois nappes différentes de spinons, chacune étant quatre fois dégénérée. En $\kappa_c = 2.0$, des spinons gapless à la limite thermodynamique apparaissent en quatre points de la zone de Brillouin rectangulaire : $q_1 = (\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{3})$, $-q_1$, $q_2 = (\frac{5\pi}{6}, \frac{2\pi}{3})$ et $-q_2$. Le λ critique est $\lambda_c = -\left(\frac{\sqrt{19}-\sqrt{3}}{2}\right)A$.

L'Ansatz (pi, pi) La maille de l'Ansatz possède six sites. La maille, l'énergie des spinons et des magnons est représentée Fig.C.9. Il y a six nappes différentes de spinons, chacune étant deux fois dégénérée. En $\kappa_c = 0.93$, des spinons gapless à la limite thermodynamique apparaissent en quatre points de la zone de Brillouin : $q_1 = (\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{3})$, $-q_1$, $q_2 = (\frac{5\pi}{6}, \frac{2\pi}{3})$ et $-q_2$. Le λ critique est $\lambda_c = (-\sqrt{3} - \sqrt{2})A$.


 FIG. C.8 – Ansatz $(0, \pi)$ sur le réseau kagome pour $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$.

 FIG. C.9 – Ansatz (π, π) sur le réseau kagome pour $A = 1$ et $\lambda = \lambda_c$.

6 L'approche large N

L'approximation de champ moyen des bosons de Schwinger peut être vue comme un développement à l'ordre 0 en $1/N$ des quantités d'un système à N saveurs de spin en chaque site, les cas physiques correspondant à un N fini. Cette approche a été proposée initialement par Arovas et Auerbach [3] sur les systèmes F ou bipartites et étendu par Read et Sachdev [87] à tous les systèmes.

Grâce aux états cohérents, on peut exprimer la fonction de partition comme une intégrale de chemin. Dans le cadre des bosons de Schwinger, le Lagrangien est biquadratique en opérateurs bosoniques. Une transformation de Hubbard-Stratonovich permet de nous ramener à un Lagrangien quadratique, mais en ajoutant des intégrales sur des variables complexes de lien. La théorie large N permet de négliger les fluctuations de ces variables complexes de lien en utilisant l'approximation du point selle. On peut ensuite intégrer les effets d'un N fini en incluant les fluctuations.

6.1 Etats cohérents

On définit les états cohérents associés au vecteur d'opérateurs bosoniques $\mathbf{a}$ par

$$|\mathbf{z}\rangle = e^{\mathbf{a}^\dagger \mathbf{z}} |0\rangle, \quad (\text{C.33})$$

où $\mathbf{z}$ est un vecteur complexe (pour des fermions, ce serait un vecteur de variables de Grassmann). Ces états cohérents sont très intéressants car ils permettent de formuler la fonction

de partition comme une intégrale de chemin, grâce notamment aux relations suivantes

$$a_i |\mathbf{z}\rangle = z_i |\mathbf{z}\rangle \quad (\text{C.34})$$

$$\langle \mathbf{z} | \mathbf{z}' \rangle = e^{\mathbf{z}^* \mathbf{z}'} \quad (\text{C.35})$$

$$\mathbf{1} = \int d\mathbf{z} e^{-\mathbf{z}^* \mathbf{z}} |\mathbf{z}\rangle \langle \mathbf{z}| \quad (\text{C.36})$$

$$\langle \mathbf{z} | \hat{A} | \mathbf{z}' \rangle = A(\mathbf{z}^*, \mathbf{z}') e^{\mathbf{z}^* \mathbf{z}'} \quad (\text{C.37})$$

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \int d\mathbf{z} e^{-\mathbf{z}^* \mathbf{z}} \langle \mathbf{z} | \hat{A} | \mathbf{z} \rangle \quad (\text{C.38})$$

où $\hat{A}$ est un opérateur normal ($\hat{A} =: \hat{A} :$, tous les opérateurs de création sont à gauche des opérateurs d'annihilation) et $A(\mathbf{z}^*, \mathbf{z}')$ est le nombre complexe obtenu en remplaçant les opérateurs de création et d'annihilation par les nombres complexes appropriés. L'équation C.35 nous montre que les états cohérents ne sont pas orthogonaux, mais d'après l'équation suivante (C.36), qui est une relation de fermeture, ils forment une base surcomplète de l'espace de Hilbert.

Les intégrales de ces relations sur $\mathbf{z}$ nombre complexe sont définies par

$$\int d\mathbf{z} = \int \prod_i \frac{dx_i dy_i}{\pi}, \quad (\text{C.39})$$

6.2 Fonction de partition : intégrale de chemin

On recherche la fonction de partition Z . Elle est par définition égale à la trace de $e^{-\beta H}$.

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}}) \quad (\text{C.40})$$

$$= \int d\mathbf{z}_0 e^{-\mathbf{z}_0^* \mathbf{z}_0} \langle \mathbf{z}_0 | \lim_{N_\tau \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{\beta \hat{H}}{N_\tau} \right)^{N_\tau} | \mathbf{z}_0 \rangle \quad (\text{C.41})$$

$$= \oint \mathcal{D}[\mathbf{z}(\tau)] e^{-\int_0^\beta L(\tau) d\tau}, \quad (\text{C.42})$$

où $L(\tau)$ est le Lagrangien

$$L(\tau) = \mathbf{z}^*(\tau) \partial_\tau \mathbf{z}(\tau) + H(\mathbf{z}^*(\tau), \mathbf{z}(\tau)). \quad (\text{C.43})$$

Voici les étapes du calcul : on remplace l'exponentielle par la limite d'un nombre N_τ de produits lorsque ce nombre tend vers l'infini. On insère un nombre $N_\tau - 1$ de relations de fermeture entre chacun de ces produits. On pose $\mathbf{z}_{N_\tau+1} = \mathbf{z}_1$ et on utilise la formule C.37 pour arriver à la dernière ligne, en supposant que le Hamiltonien est ordonné normalement ($\hat{H} =: \hat{H} :$). Reste la dernière étape, non juste mathématiquement... où l'on remplace la limite sur N_τ par une intégrale de chemin sur $\mathbf{z}$. Pour les bosons, $\mathbf{z}(\beta) = \mathbf{z}(0)$, d'où le symbole $\oint$.

On parle parfois d'intégrale en temps imaginaire car elle est obtenue de la trace de l'opérateur d'évolution dans le temps $e^{-i/\hbar \hat{H} t}$ par la transformation

$$t \rightarrow i\hbar\beta, \quad (\text{C.44})$$

L'intégrale de 0 à t est remplacée par une intégrale de 0 à β .

6.3 Prise en compte des contraintes

Sur chaque site i , le nombre de bosons n_i doit être égal à κ . On doit donc réduire l'espace de Hilbert engendré par les états cohérents $|\mathbf{z}\rangle$ au sous-espace des états vérifiant la contrainte. Pour cela, on projette les états de l'espace de départ sur ce sous-espace en faisant agir l'opérateur auto-adjoint $\prod_i \delta(n_i - \kappa)$ (qui donne un poids 0 ou 1 à un état de la base de Fock). On ne fait donc plus la trace d'un opérateur A que sur les états vérifiant la contrainte en donnant un poids nul aux autres, ce qui donne :

$$\text{Tr}(\hat{A}) = \int d\mathbf{z} e^{-\mathbf{z}^* \mathbf{z}} \langle \mathbf{z} | \hat{A} \prod_i \delta(\hat{n}_i - \kappa) | \mathbf{z} \rangle. \quad (\text{C.45})$$

On utilise maintenant l'égalité

$$\delta(p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{-i\lambda p} \quad (\text{C.46})$$

pour réécrire l'équation précédente ainsi que la relation de fermeture.

Si l'on redérive la fonction de partition à partir de ces nouvelles formules, on obtient :

$$Z = \oint^{\eta} \mathcal{D}[\mathbf{z}(\tau), \lambda(\tau)] e^{-\int_0^{\beta} L(\tau) d\tau}, \quad (\text{C.47})$$

avec

$$L(\tau) = \mathbf{z}^*(\tau) \partial_{\tau} \mathbf{z}(\tau) + H(\mathbf{z}^*(\tau), \mathbf{z}(\tau)) + i \sum_i \lambda_i(\tau) (n_i(\tau) - \kappa). \quad (\text{C.48})$$

6.4 Transformation de Hubbard-Stratonovich

L'identité de Hubbard-Stratonovich est

$$e^{\frac{\alpha F^* F}{N}} = \frac{\alpha N}{\pi} \int dQ^2 e^{-\alpha(NQ^*Q - F^*Q - Q^*F)}. \quad (\text{C.49})$$

où α et N sont des réels positifs, F peut être un terme quadratique de variables de Grassmann ou de nombres complexes. Cette identité permet de transformer un terme biquadratique en un terme quadratique dans une exponentielle, beaucoup plus sympathique car on connaît les intégrales gaussiennes. Le prix à payer est une intégration sur une variable supplémentaire Q .

Voyons l'utilisation de cette formule tout d'abord dans le cas des bosons pour des interactions toutes AF (ceci exclusivement pour des raisons de compacité des formules, mais la généralisation au cas général est triviale).

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \left(S^2 - 2\hat{A}_{ij}^{\dagger} \hat{A}_{ij} \right) \quad (\text{C.50})$$

Le Hamiltonien est normal. On peut lui soustraire la constante en S^2 . Après avoir utilisé l'Eq.C.49 sur chacun des liens et en chaque instant τ , avec $F(\tau) = A_{ij}(\mathbf{z}^*(\tau), \mathbf{z}(\tau))$ (que l'on note par la suite $A_{ij}(\tau)$), on obtient

$$Z_b = \int \mathcal{D}[\mathbf{z}(\tau), \mathbf{Q}(\tau), \lambda(\tau)] e^{-\int_0^{\beta} L_b(\tau) d\tau} \quad (\text{C.51})$$

$$L_b = \mathbf{z}^* \partial_{\tau} \mathbf{z} + \sum_{i,j} J_{ij} \left(-A_{ij}^{\dagger} Q_{ij} - A_{ij} Q_{ij}^* + |Q_{ij}|^2 \right) + i \sum_i \lambda_i (n_i - \kappa), \quad (\text{C.52})$$

où $\mathbf{Q}(\tau)$ est un vecteur complexe de dimension le nombre de liens du réseau ($Q_{ij}(\tau) = -Q_{ji}(\tau)$). On peut maintenant intégrer formellement selon les variables $\mathbf{z}$, ce qui sera fait dans la sous-section suivante après avoir effectué le passage au modèle $Sp(2N)$.

6.5 Approximation large N , méthode du point selle

Maintenant que l'on a notre fonction de partition sous la forme d'une intégrale de chemin, on voudrait la calculer. Malheureusement, on ne sait pas le faire pour le modèle développé jusqu'ici. Cela ne sera possible qu'après avoir étendu notre modèle de spins SU_2 à un modèle Sp_{2N} , de façon à devoir calculer l'intégrale d'une exponentielle dont l'argument est proportionnel à N pour obtenir la fonction de partition. On pourra alors utiliser l'approximation du point selle, puis les méthodes perturbatives pour obtenir un développement en puissances de $1/N$.

Pour avoir un facteur N que l'on peut faire tendre vers l'infini dans l'exponentielle de la fonction de partition, il faut changer de modèle. Nous avons un modèle de spins qui vivent sur SU_2 . Initialement, l'extension à SU_N a été proposée par Arovas et Auerbach [3] sur les systèmes F ou bipartites. Elle remplace les deux saveurs $\uparrow$ et $\downarrow$ par N saveurs. Elle permet de traiter les bosons avec interactions F sur n'importe quel réseau, ou avec interactions AF sur un réseau bipartite. Mais une extension permettant de traiter les bosons dans tous les cas a été proposée par Read et Sachdev [87] : Sp_N (le cas SU_2 correspondant à $N = 1$, alors qu'il correspondait à $N = 2$ pour SU_N). Elle remplace les deux saveurs $\uparrow$ et $\downarrow$ par $2N$ saveurs. Le nombre de particules par site est alors $N\kappa$. Dans le cas des bosons avec uniquement des liens AF (qui sera l'exemple que l'on gardera pour la suite), les nouveaux opérateurs A_{ij} et le nouvel Hamiltonien s'écrivent

$$\hat{A}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^N (a_{im}b_{jm} - a_{jm}b_{im}), \quad (C.53)$$

$$\hat{H} = - \sum_{i,j} \frac{J_{ij}}{N} \hat{A}_{ij}^\dagger \hat{A}_{ij} \quad (C.54)$$

La fonction de partition Z_b^N est maintenant une intégrale sur des vecteurs $\mathbf{z}$ ayant N fois plus de composantes. La transformation de Hubbard Stratonovich est très similaire à précédemment, à l'apparition d'un facteur N près dans l'action.

$$Z_b^N = \int \mathcal{D}[\mathbf{z}(\tau), \mathbf{Q}(\tau), \lambda(\tau)] e^{-\int_0^\beta L_b^N(\tau) d\tau} \quad (C.55)$$

$$\begin{aligned} L_b^N(\tau) &= \mathbf{z}^* \partial_\tau \mathbf{z} + \sum_{i,j} J_{ij} \left(-A_{ij}^\dagger Q_{ij} - A_{ij} Q_{ij}^* + N|Q_{ij}|^2 \right) + i \sum_{im} \lambda_i (n_i - \kappa) \\ &= \mathbf{v}^* G^{-1}(Q_{ij}, \lambda_i) \mathbf{v} + N \sum_{i,j} J_{ij} |Q_{ij}|^2 - iN\kappa \sum_i \lambda_i \end{aligned} \quad (C.56)$$

(des dépendances en τ ont été omises). Les termes quadratiques en $\mathbf{z}$ et $\mathbf{z}^*$ sont regroupés dans $\mathbf{v}^* G^{-1}(Q_{ij}, \lambda_i) \mathbf{v}$. Le vecteur $\mathbf{v}$ est un vecteur dont les coefficients sont des coefficients de $\mathbf{z}$ et $\mathbf{z}^*$ dépendent des termes quadratiques présents dans le Lagrangien. Pour notre exemple, on a :

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} \mathbf{z}_a \\ \mathbf{z}_b^* \end{pmatrix} \quad (C.57)$$

Z_b^N est une intégrale gaussienne en $\mathbf{z}$, on peut donc effectuer cette intégration (formellement seulement : dans la réalité, on ne sait pas la calculer sans donner de valeurs aux Q_{ij} et aux λ_i), ce qui nous donne une action S dépendant des Q_{ij} et des λ_i :

$$Z_b^N = \int \mathcal{D}[\mathbf{Q}(\tau), \lambda(\tau)] e^{-NS(\mathbf{Q}, \lambda)} \quad (C.58)$$

$$S(\mathbf{Q}, \lambda) = \int_0^\beta d\tau \left(\sum_{i,j} J_{ij} |Q_{ij}|^2 - i\kappa \sum_i \lambda_i \right) + \ln \left(\int \mathcal{D}[\mathbf{z}(\tau)] e^{-\frac{1}{N} \int_0^\beta \mathbf{v}^* G^{-1}(Q_{ij}, \lambda_i) \mathbf{v} d\tau} \right).$$

S est d'ordre 1 en N . En effet, on peut séparer les contributions de chaque saveur m dans $\mathbf{v}^* G^{-1}(Q_{ij}, \lambda_i) \mathbf{v}$ et toutes sont équivalentes. On peut donc utiliser la méthode du point selle sur l'Eq.C.58.

Méthode du point selle. Soit $f : z \rightarrow f(z)$ une fonction analytique. La méthode du col (ou du point selle) consiste en l'approximation suivante lorsque $N \rightarrow \infty$:

$$\begin{cases} \int_\gamma e^{Nf(z)} \approx \sqrt{\frac{2\pi}{N\rho}} e^{i\psi} e^{Nf(z_0)} \\ f'(z_0) = 0 \\ f''(z_0) = \rho e^{i\theta} \\ \psi = -\theta/2 \pm \pi/2 \text{ (depending on the path).} \end{cases} \quad (\text{C.59})$$

Elle est obtenue en déformant le chemin d'intégration γ de façon à passer en z_0 (point selle pour la partie réelle de f , ainsi d'ailleurs que pour sa partie imaginaire) selon l'inclinaison telle qu'on traverse le col avec l'angle optimal (d'où l'angle ψ).

Le champ moyen est obtenu en approximant l'Eq.C.58 par l'exponentielle de l'action en un point stationnaire, en supposant qu'en un tel point, les Q_{ij} et λ_i sont indépendants de τ et que les λ_i sont imaginaires purs (ce qui permet d'éliminer le i de l'action).

Annexe D

Liste des abbréviations et définitions

- AF : antiferromagnétique,
- ASL : algebraic spin liquid, liquide de spin algébrique,
- CV : coeur de vortex,
- E_{op} : espace du paramètre d'ordre, espace des états fondamentaux (Sec.2.1),
- F : ferromagnétique,
- flux : définition p.66.
- GS : ground state, état fondamental,
- κ : nombre moyen de bosons par site en SBMFT, ajusté grâce aux potentiels chimiques λ_i ,
- KT : Kosterlitz-Thouless,
- LRO : long range order, ordre à longue portée,
- MF : mean-field, champ moyen,
- O_n : groupe des matrices orthonormales de taille $n \times n$,
- PSG : projective symmetry group, groupe de symétrie projective,
- RVB : resonating valence bond,
- SBMFT : Schwinger boson mean-field theory, théorie des bosons de Schwinger en champ moyen,
- SO_n : groupe des matrices spéciales orthonormales de taille $n \times n$,
- S_e : groupe des symétries d'un état (Sec.1.1), sous-groupe de S_H laissant l'état invariant,
- S_H : groupe des symétries du Hamiltonien, groupe des transformations de l'espace des configurations dans lui-même et ne modifiant pas leur énergie (Sec.1.1),
- S_R : groupe des symétries du réseau, sous-groupe de S_H agissant uniquement sur les positions des spins (Sec.1.1),
- S_S : groupe des symétries du réseau, sous-groupe de S_H agissant uniquement sur l'orientation des spins (Sec.1.1),
- SL : spin liquid, liquide de spin,
- T : température ou symétrie par renversement du temps,
- TSL : topological spin liquid, liquide de spin topologique,
- RVB : resonating valence bond, liens de valence résonnants
- VB : valence bond, lien de valence
- VBC : valence bond crystal, cristal de liens de valence,
- VBS : valence bond solid, solide de liens de valence,
- ZdB : zone de Brillouin,
- ZdB E : zone de Brillouin étendue, zone de Brillouin (ZdB) du réseau auquel on a ajouté des sites de façon à obtenir un réseau de Bravais.

Bibliographie

- [1] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. Phys. Rev. Lett., 59(7) :799–802, Aug 1987.
- [2] I. Affleck and J. B. Marston. Large- n limit of the Heisenberg-Hubbard model : Implications for high- T_c superconductors. Phys. Rev. B, 37(7) :3774–3777, Mar 1988.
- [3] D. P. Arovas and A. Auerbach. Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models. Phys. Rev. B, 38(1) :316–332, Jul 1988.
- [4] A. Auerbach. Interacting Electrons and Quantum Magnetism. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [5] A. Auerbach and D. P. Arovas. Spin dynamics in the square-lattice antiferromagnet. Phys. Rev. Lett., 61(5) :617–620, Aug 1988.
- [6] B. Bernu, P. Lecheminant, C. Lhuillier, and L. Pierre. Exact spectra, spin susceptibilities, and order parameter of the quantum Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice. Phys. Rev. B, 50(14) :10048–10062, Oct 1994.
- [7] J.-P. Blaizot and G. Ripka. Quantum Theory of Finite Systems. MIT Press, 1986.
- [8] M. Caffarel, P. Azaria, B. Delamotte, and D. Mouhanna. Monte carlo calculation of the spin stiffness of the two-dimensional heisenberg model. EPL, 26(7) :493, Jun 1994.
- [9] M. Caffarel, P. Azaria, B. Delamotte, and D. Mouhanna. Spin stiffness and topological defects in two-dimensional frustrated spin systems. Phys. Rev. B, 64(1) :014412, Jun 2001.
- [10] L. Capriotti and S. Sachdev. Low-temperature broken-symmetry phases of spiral antiferromagnets. Phys. Rev. Lett., 93(25) :257206, Dec 2004.
- [11] J. Carlson. Ground-state and low-lying excitations of the Heisenberg antiferromagnet. Phys. Rev. B, 40(1) :846–849, Jul 1989.
- [12] H. A. Ceccatto, C. J. Gazza, and A. E. Trumper. Nonclassical disordered phase in the strong quantum limit of frustrated antiferromagnets. Phys. Rev. B, 47(18) :12329–12332, May 1993.
- [13] O. Cépas, C. M. Fong, P. W. Leung, and C. Lhuillier. Quantum phase transition induced by Dzyaloshinskii-Moriya interactions in the kagome antiferromagnet. Physical Review B, 78(14) :140405, Oct 2008.
- [14] J. T. Chalker, P. C. W. Holdsworth, and E. F. Shender. Hidden order in a frustrated system : Properties of the Heisenberg kagomé antiferromagnet. Phys. Rev. Lett., 68(6) :855–858, Feb 1992.
- [15] P. Chandra, P. Coleman, and A. I. Larkin. Ising transition in frustrated Heisenberg models. Phys. Rev. Lett., 64(1) :88–91, Jan 1990.
- [16] P. Chandra and B. Douçot. Possible spin-liquid state at large S for the frustrated square Heisenberg lattice. Phys. Rev. B, 38(13) :9335–9338, Nov 1988.

- [17] Y.-C. Chen and K. Xiu. Optimized RVB states of the 2-d antiferromagnet : ground state and excitation spectrum. Phys. Lett. A, 181(5) :373, 1993.
- [18] A. Chubukov, E. Gagliano, and C. Balseiro. Phase diagram of the frustrated spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet with cyclic-exchange interaction. Phys. Rev. B, 45(14) :7889–7898, Apr 1992.
- [19] A. V. Chubukov and T. Jolicoeur. Order-from-disorder phenomena in Heisenberg antiferromagnets on a triangular lattice. Phys. Rev. B, 46(17) :11137–11140, Nov 1992.
- [20] C. H. Chung, J. B. Marston, and S. Sachdev. Quantum phases of the Shastry-Sutherland antiferromagnet : Application to $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. Phys. Rev. B, 64(13) :134407, Sep 2001.
- [21] R. H. Colman, C. Ritter, and A. S. Wills. Toward perfection : Kapellasite, $\text{Cu}_3\text{Zn}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$, a new model $s = 1/2$ kagome antiferromagnet. Chem. Mater., 20(22) :6897–6899, 2008.
- [22] J. H. P. Colpa. Diagonalization of the quadratic boson hamiltonian. Physica A Statistical Mechanics and its Applications, 93 :327–353, Sep 1978.
- [23] J. E. R. Costa, B. V. Costa, and D. P. Landau. Dynamic behavior of vortices in the classical two-dimensional anisotropic Heisenberg model. Phys. Rev. B, 57(18) :11510–11516, May 1998.
- [24] J.-C. Domenge. Brisures de symétrie dans les modèles de Heisenberg classiques et quantiques en deux dimensions. PhD thesis, Université Paris VI. France, 2005.
- [25] J.-C. Domenge, C. Lhuillier, L. Messio, L. Pierre, and P. Viot. Chirality and $\mathbb{Z}_2$ vortices in a Heisenberg spin model on the kagome lattice. Phys. Rev. B, 77(17) :172413, May 2008.
- [26] J.-C. Domenge, P. Sindzingre, C. Lhuillier, and L. Pierre. Twelve sublattice ordered phase in the $J_1 - J_2$ model on the kagomé lattice. Phys. Rev. B, 72(2) :024433, Jul 2005.
- [27] I. Dzyaloshinsky. A thermodynamic theory of weak ferromagnetism of antiferromagnetics. J. Phys. Chem. Solids, 4(241) :241–255, 1958.
- [28] M. Elhajal, B. Canals, and C. Lacroix. Symmetry breaking due to Dzyaloshinsky-Moriya interactions in the kagome lattice. Phys. Rev. B, 66(1) :014422, Jul 2002.
- [29] G. Evenbly and G. Vidal. Frustrated antiferromagnets with entanglement renormalization : Ground state of the spin-12 heisenberg model on a kagome lattice. Phys. Rev. Lett., 104(18) :187203, May 2010.
- [30] J.-B. Fouet, M. Mambrini, P. Sindzingre, and C. Lhuillier. Planar pyrochlore : A valence-bond crystal. Phys. Rev. B, 67(5) :054411, Feb 2003.
- [31] J.B. Fouet, P. Sindzingre, and C. Lhuillier. An investigation of the quantum J_1 - J_2 - J_3 model on the honeycomb lattice. Eur. Phys. J. B, 20 :241, 2001.
- [32] G. G. Misguich, B. Bernu, and C. Lhuillier. The multiple-spin exchange phase diagram on the triangular lattice : Schwinger-boson analysis. Journal of Low Temperature Physics, 110(1) :327–332, Jan 1998.
- [33] F. D. M. Haldane. Continuum dynamics of the 1-d Heisenberg antiferromagnet : Identification with the $O(3)$ nonlinear sigma model. Physics Letters A, 93(9) :464 – 468, 1983.
- [34] F. D. M. Haldane and Daniel P. Arovas. Quantized spin currents in two-dimensional chiral magnets. Phys. Rev. B, 52(6) :4223–4225, Aug 1995.

- [35] A. B. Harris, C. Kallin, and A.J. Berlinsky. Possible Néel orderings of the kagome antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 45(1992) :2899, Feb 1992.
- [36] M. B. Hastings. Dirac structure, RVB, and Goldstone modes in the kagomé antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 63(1) :014413, Dec 2000.
- [37] M. Hermele, Y. Ran, P. A. Lee, and X.-G. Wen. Properties of an algebraic spin liquid on the kagome lattice. *Physical Review B*, 77(22) :224413, Jun 2008.
- [38] K. Hida. Ground state and elementary excitations of the $S=1$ kagome heisenberg antiferromagnet. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 69(12) :4003, December 2000.
- [39] T. Holstein and H. Primakoff. Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. *Phys. Rev.*, 58(12) :1098–1113, 1940.
- [40] Y. Huh, L. Fritz, and S. Sachdev. Quantum criticality of the kagome antiferromagnet with Dzyaloshinskii-Moriya interactions. *arXiv :1003.0891*, 2010.
- [41] D. A. Huse. Ground-state staggered magnetization of two-dimensional quantum Heisenberg antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 37(4) :2380–2382, Feb 1988.
- [42] D. A. Huse and V. Elser. Simple variational wave functions for two-dimensional Heisenberg spin-1/2 antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 60(24) :2531–2534, Jul 1988.
- [43] O. Janson, J. Richter, and H. Rosner. Modified kagome physics in the natural spin-1/2 kagome lattice systems - Kapellasite $\text{Cu}_3\text{Zn}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ and Haydeeite $\text{Cu}_3\text{Mg}(\text{OH})_6\text{Cl}_2$. *arXiv :0806.1592v1*, 2008.
- [44] O. Janson, J. Richter, and H. Rosner. Intrinsic peculiarities of real material realizations of a spin-1/2 kagome lattice. *J. Phys. : Conf. Ser.*, 145 :012008, 2009.
- [45] O. Janson, J. Richter, P. Sindzingre, and H. Rosner. Coupled frustrated quantum spin-1/2 chains with orbital order in Volborthite $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_7(\text{OH})_2(\text{H}_2\text{O})_2$. *arXiv :1004.2185v1*, Apr 2010.
- [46] H. C. Jiang, Z. Y. Weng, and D. N. Sheng. Density matrix renormalization group numerical study of the kagome antiferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 101(11) :117203, Sep 2008.
- [47] H. Kawamura and M. Kikuchi. Free-vortex formation and topological phase transitions of two-dimensional spin systems. *Phys. Rev. B*, 47(2) :1134–1137, Jan 1993.
- [48] H. Kawamura and S. Miyashita. Phase transition of the two-dimensional Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice. *J. Phys. Soc. Jpn*, 53(12) :4138, 1984.
- [49] R. Kenna. Homotopy in statistical physics. *arXiv :0602459*, 2006.
- [50] S. E. domenge Korshunov. Chiral phase of the Heisenberg antiferromagnet with a triangular lattice. *Phys. Rev. B*, 47(10) :6165–6168, Mar 1993.
- [51] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C : Solid State Physics*, 6 :1181, 1973.
- [52] K. Kubo and T. Momoi. Ground state of a spin system with two- and four-spin exchange interactions on the triangular lattice. *Z. Phys. B*, 103 :485, 1997.
- [53] A Läuchli and C. Lhuillier. Dynamical correlations of the kagome $S=1/2$ Heisenberg quantum antiferromagnet. *arXiv :0901.1065*, 2009.
- [54] A. Läuchli, F. Mila, and K. Penc. Quadrupolar phases of the $S=1$ bilinear-biquadratic Heisenberg model on the triangular lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 97(8) :087205, Aug 2006.
- [55] M. J. Lawler, L. Fritz, Y. B. Kim, and S. Sachdev. Theory of Néel and valence-bond solid phases on the kagome lattice of Zn paratacamite. *Phys. Rev. B*, 100(18) :187201, May 2008.

- [56] P. Lecheminant, B. Bernu, C. Lhuillier, and L. Pierre. j_1 - j_2 quantum Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice : A group-symmetry analysis of order by disorder. Phys. Rev. B, 52(9) :6647–6652, Sep 1995.
- [57] P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen. Doping a Mott insulator : Physics of high-temperature superconductivity. Rev. Mod. Phys., 78(1) :17–85, Jan 2006.
- [58] S. Liang, B. Doucot, and P. W. Anderson. Some new variational resonating-valence-bond-type wave functions for the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a square lattice. Phys. Rev. Lett., 61(3) :365–368, Jul 1988.
- [59] W. LiMing, G. Misguich, P. Sindzingre, and C. Lhuillier. From néel long-range order to spin liquids in the multiple-spin exchange model. Phys. Rev. B, 62(10) :6372–6377, Sep 2000.
- [60] C. K. Majumdar and D. K. Ghosh. On next-nearest-neighbor interaction in linear chain. i. J. Math. Phys., 10(8) :1388–1398, 1969.
- [61] M. Mambrini, A. Läuchli, D. Poilblanc, and F. Mila. Plaquette valence-bond crystal in the frustrated Heisenberg quantum antiferromagnet on the square lattice. Phys. Rev. B, 74(14) :144422, Oct 2006.
- [62] L. O. Manuel, C. J. Gazza, A. E. Trumper, and H. A. Ceccatto. Heisenberg model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction : A mean-field Schwinger-boson study. Phys. Rev. B, 54(18) :12946–12952, Nov 1996.
- [63] A. Mattsson, P. Fröjdh, and T. Einarsson. Frustrated honeycomb Heisenberg antiferromagnet : A Schwinger-boson approach. Phys. Rev. B, 49(6) :3997–4002, Feb 1994.
- [64] N. D. Mermin. The topological theory of defects in ordered media. Rev. Mod. Phys., 51(3) :591–648, Jul 1979.
- [65] N. D. Mermin and H. Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. Phys. Rev. Lett., 17(22) :1133–1136, Nov 1966.
- [66] L. Messio, O. Cépas, and C. Lhuillier. Schwinger-boson approach to the kagome antiferromagnet with Dzyaloshinskii-Moriya interactions : Phase diagram and dynamical structure factors. Phys. Rev. B, 81(6) :064428, Feb 2010.
- [67] L. Messio, J.-C. Domenge, C. Lhuillier, L. Pierre, P. Viot, and G. Misguich. Thermal destruction of chiral order in a two-dimensional model of coupled trihedra. Phys. Rev. B, 78(5) :054435, Aug 2008.
- [68] F. Mila, D. Poilblanc, and C. Bruder. Spin dynamics in a frustrated magnet with short-range order. Phys. Rev. B, 43(10) :7891–7898, Apr 1991.
- [69] G. Misguich, B. Bernu, C. Lhuillier, and C. Waldtmann. Spin liquid in the multiple-spin exchange model on the triangular lattice : ^3He on graphite. Phys. Rev. Lett., 81(5) :1098–1101, Aug 1998.
- [70] G. Misguich, C. Lhuillier, B. Bernu, and C. Waldtmann. Spin-liquid phase of the multiple-spin exchange Hamiltonian on the triangular lattice. Phys. Rev. B, 60(2) :1064–1074, Jul 1999.
- [71] G. Misguich, C. Lhuillier, M. Mambrini, and P. Sindzingre. Degeneracy of the ground-state of antiferromagnetic spin-1/2 Hamiltonians. Eur. Phys. J. B., 26 :167–183, 2002.
- [72] G. Misguich and F. Mila. Quantum dimer model on the triangular lattice : Semiclassical and variational approaches to vison dispersion and condensation. Phys. Rev. B, 77(13) :134421, Apr 2008.

- [73] G. Misguich and P. Sindzingre. Detecting spontaneous symmetry breaking in finite-size spectra of frustrated quantum antiferromagnets. J. Phys. : Condens. Matter, 19(14) :145202, 2007.
- [74] R. Moessner and K. S. Raman. Quantum dimer models. arXiv :0809.3051, 2008.
- [75] R. Moessner and S. L. Sondhi. Resonating valence bond phase in the triangular lattice quantum dimer model. Phys. Rev. Lett., 86(9) :1881–1884, Feb 2001.
- [76] T. Momoi, K. Kubo, and K. Niki. Possible chiral phase transition in two-dimensional solid ^3He . Phys. Rev. Lett., 79(11) :2081–2084, Sep 1997.
- [77] T. Momoi, H. Sakamoto, and K. Kubo. Magnetization plateau in a two-dimensional multiple-spin exchange model. Phys. Rev. B, 59(14) :9491–9499, Apr 1999.
- [78] T. Moriya. Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism. Phys. Rev., 120(1) :91–98, Oct 1960.
- [79] N. F. Mott. Metal-insulator transition. Rev. Mod. Phys., 40(4) :677–683, 1968.
- [80] C. Mudry and E. Fradkin. Separation of spin and charge quantum numbers in strongly correlated systems. Phys. Rev. B, 49(8) :5200–5219, Feb 1994.
- [81] G. J. Nilsen, F. C. Coomer, M. A. de Vries, J. R. Stewart, P. P. Deen, A. Harrison, and H. M. Ronnow. Excitations and short range order in the quasi-kagome antiferromagnet volborthite. arXiv :1001.2462v1, 2011.
- [82] L. Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. Phys. Rev., 65(3-4) :117–149, Feb 1944.
- [83] A. Ralko, M. Ferrero, F. Becca, D. Ivanov, and F. Mila. Crystallization of the resonating valence bond liquid as vortex condensation. Phys. Rev. B, 76(14) :140404, Oct 2007.
- [84] Y. Ran, M. Hermele, P. A. Lee, and X.-G. Wen. Projected-wave-function study of the spin-1/2 Heisenberg model on the kagomé lattice. Physical Review Letters, 98(11) :117205, 2007.
- [85] N. Read and B. Chakraborty. Statistics of the excitations of the resonating-valence-bond state. Phys. Rev. B, 40(10) :7133–7140, Oct 1989.
- [86] N. Read and S. Sachdev. Valence-bond and spin-Peierls ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets. Phys. Rev. Lett., 62(14) :1694–1697, Apr 1989.
- [87] N. Read and S. Sachdev. Large-N expansion for frustrated quantum antiferromagnets. Phys. Rev. Lett., 66(13) :1773–1776, Apr 1991.
- [88] J. N. Reimers, A. J. Berlinsky, and A.-C. Shi. Mean-field approach to magnetic ordering in highly frustrated pyrochlores. Phys. Rev. B, 43(1) :865–878, Jan 1991.
- [89] J.N. Reimers and A.J. Berlinsky. Order by disorder in the classical Heisenberg kagome antiferromagnet. Phys. Rev. B, 48(13) :9539–9554, Oct 1993.
- [90] D. S. Rokhsar. Quadratic quantum antiferromagnets in the fermionic large-N limit. Phys. Rev. B, 42(4) :2526–2531, Aug 1990.
- [91] D. S. Rokhsar and S. A. Kivelson. Superconductivity and the quantum hard-core dimer gas. Phys. Rev. Lett., 61(20) :2376–2379, Nov 1988.
- [92] S. Sachdev. Kagomé- and triangular-lattice Heisenberg antiferromagnets : Ordering from quantum fluctuations and quantum-disordered ground states with unconfined bosonic spinons. Phys. Rev. B, 45(21) :12377–12396, Jun 1992.
- [93] S. Sachdev. Colloquium : Order and quantum phase transitions in the cuprate superconductors. Rev. Mod. Phys., 75(3) :913–932, Jul 2003.

- [94] T. Senthil and Matthew P. A. Fisher. Z_2 gauge theory of electron fractionalization in strongly correlated systems. Phys. Rev. B, 62(12) :7850–7881, Sep 2000.
- [95] L. Shekhtman, O. Entin-Wohlman, and A. Aharony. Moriya’s anisotropic superexchange interaction, frustration, and Dzyaloshinsky’s weak ferromagnetism. Phys. Rev. Lett., 69(5) :836–839, Aug 1992.
- [96] P. Sindzingre and C. Lhuillier. Low energy excitations of the kagome antiferromagnet and the spin gap issue. EPL, 88 :27009, 2009.
- [97] R. R. P. Singh and D. A. Huse. Triplet and singlet excitations in the valence bond crystal phase of the kagome lattice heisenberg model. Phys. Rev. B, 77(14) :144415, Apr 2008.
- [98] O. Tchernyshyov, R. Moessner, and S. L. Sondhi. Spin-Peierls phases in pyrochlore antiferromagnets. Phys. Rev. B, 66 :064403, Aug 2002.
- [99] O. Tchernyshyov, R. Moessner, and S. L. Sondhi. Flux expulsion and greedy bosons : Frustrated magnets at large N. EPL, 73 :278, Jan 2006.
- [100] N. Trivedi and D. M. Ceperley. Ground-state correlations of quantum antiferromagnets : A Green-function Monte Carlo study. Phys. Rev. B, 41(7) :4552–4569, Mar 1990.
- [101] A. E. Trumper, L. O. Manuel, C. J. Gazza, and H. A. Ceccatto. Schwinger-boson approach to quantum spin systems : Gaussian fluctuations in the “natural” gauge. Phys. Rev. Lett., 78(11) :2216–2219, Mar 1997.
- [102] G. Vidal. Class of quantum many-body states that can be efficiently simulated. Phys. Rev. Lett., 101(11) :110501, Sep 2008.
- [103] J. Villain. A magnetic analogue of stereoisomerism : application to helimagnetism in two dimensions. J. Phys. France, 38(4) :385– 391, 1977.
- [104] J. Villain, R. Bidaux, J.-P. Carton, and R. Conte. Order as an effect of disorder. J. Phys. France, 41 :1263, 1980.
- [105] C. Waldtmann, H.-U. Everts, B. Bernu, C. Lhuillier, P. Sindzingre, P. Lecheminant, and L. Pierre. First excitations of the spin 1/2 Heisenberg antiferromagnet on the kagomé lattice. Eur. Phys. J. B, 2(4) :501, May 1998.
- [106] F. Wang and D. P. Landau. Determining the density of states for classical statistical models : A random walk algorithm to produce a flat histogram. Phys. Rev. E, 64(5) :056101, Oct 2001.
- [107] F. Wang and D. P. Landau. An efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states. Phys. Rev. Lett., 86(10) :2050–2053, Mar 2001.
- [108] F. Wang and A. Vishwanath. Spin-liquid states on the triangular and kagomé lattices : A projective-symmetry-group analysis of Schwinger boson states. Phys. Rev. B, 74(17) :174423, Nov 2006.
- [109] C. Weber, L. Capriotti, G. Misguich, F. Becca, M. Elhajal, and F. Mila. Ising transition driven by frustration in a 2D classical model with continuous symmetry. Phys. Rev. Lett., 91(17) :177202, Oct 2003.
- [110] X. G. Wen. Vacuum degeneracy of chiral spin states in compactified space. Phys. Rev. B, 40(10) :7387–7390, Oct 1989.
- [111] X. G. Wen. Mean-field theory of spin-liquid states with finite energy gap and topological orders. Phys. Rev. B, 44(6) :2664–2672, Aug 1991.
- [112] X.-G. Wen. Quantum orders and symmetric spin liquids. Phys. Rev. B, 65(16) :165113, Apr 2002.

-
- [113] X.-G. Wen, F. Wilczek, and A. Zee. Chiral spin states and superconductivity. Phys. Rev. B, 39(16) :11413–11423, Jun 1989.
 - [114] M. Wintel, H. U. Everts, and W. Apel. Monte Carlo simulation of the Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice : Topological excitations. Phys. Rev. B, 52(18) :13480–13486, Nov 1995.
 - [115] F. Y. Wu. The Potts model. Rev. Mod. Phys., 54(1) :235–268, Jan 1982.
 - [116] Y.-S. Wu. General theory for quantum statistics in two dimensions. Phys. Rev. Lett., 52(24) :2103–2106, Jun 1984.
 - [117] C. Zeng and V. Elser. Numerical studies of antiferromagnetism on a kagomé net. Phys. Rev. B, 42(13) :8436–8444, Nov 1990.
 - [118] M. E. Zhitomirsky. Octupolar ordering of classical kagome antiferromagnets in two and three dimensions. Phys. Rev. B, 78(9) :094423, Sep 2008.
 - [119] A. Zorko, S. Nellutla, J. van Tol, L. C. Brunel, F. Bert, F. Duc, J.-C. Trombe, M. A. de Vries, A. Harrison, and P. Mendels. Dzyaloshinsky-Moriya anisotropy in the spin-1/2 kagome compound $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$. Phys. Rev. Lett., 101(2) :026405, Jul 2008.