



HAL
open science

Etude de modèles magnétiques frustrés sous champ en basses dimensions

Xavier Plat

► **To cite this version:**

Xavier Plat. Etude de modèles magnétiques frustrés sous champ en basses dimensions. Electrons fortement corrélés [cond-mat.str-el]. Université Paul Sabatier Toulouse 3, 2014. Français. NNT : . tel-01091204

HAL Id: tel-01091204

<https://theses.hal.science/tel-01091204>

Submitted on 4 Dec 2014

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.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - NoDerivatives 4.0 International License



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par : *l'Université Toulouse 3 Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)*

Présentée et soutenue le 16/10/2014 par :

XAVIER PLAT

Etude de modèles magnétiques frustrés sous champ en basses dimensions

JURY

Monsieur Philippe LECHEMINANT
Monsieur Tommaso ROSCILDE
Monsieur Benjamin CANALS
Madame Nathalie GUIHÉRY
Monsieur Dominique MOUHANNA
Monsieur Sylvain CAPPONI
Monsieur Pierre PUJOL

Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examinatrice
Examineur
Directeur de thèse
Co-Directeur de thèse

École doctorale et spécialité :

SDM : Physique de la matière - CO090

Unité de Recherche :

Laboratoire de Physique Théorique de Toulouse

Directeur(s) de Thèse :

Sylvain CAPPONI et Pierre PUJOL

Rapporteurs :

Philippe LECHEMINANT et Tommaso ROSCILDE

Remerciements

Puisqu'il s'agit d'un manuscrit de thèse, mes premiers remerciements et toute ma gratitude vont bien évidemment aux deux personnes qui ont encadré cette thèse, à savoir Sylvain Capponi et Pierre Pujol. Si après ces trois années (et demi en fait) je regarde derrière moi en me disant que si c'était à refaire, je re-signerais sans aucun doute, je le leur dois en grande partie. Ce fut très enrichissant et, en trois mots, merci pour tout.

Je suis reconnaissant à Philippe Lecheminant et Tommaso Roscilde d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ma thèse ainsi que de l'attention qu'ils ont consacrée à lire ce manuscrit. Je remercie également, en commençant par la présidente, Nathalie Guihéry, Benjamin Canals et Dominique Mouhanna d'avoir participé au jury de thèse.

J'ai beaucoup apprécié de travailler au sein du groupe Fermions Fortement Corrélés, et je salue ainsi Didier Poilblanc, Nicolas Lafflorencie, Fabien Alet, Matthieu Mambrini, Revaz Ramazashvili, et une nouvelle fois Sylvain et Pierre, pour avoir largement contribué à rendre ces trois dernières années agréables, et pas seulement sur le plan scientifique. Merci en particulier à Fabien pour s'être laissé embêter par mes intrusions dans son bureau de nombreuses fois.

J'espère bien assister d'ici peu à la soutenance de Juan-Pablo, avec qui j'ai été content de partager un bureau pendant trois ans. J'ai aussi côtoyé avec beaucoup de plaisir Frédéric au cours de ces deux dernières années, même s'il me donne parfois l'impression de chercher à me contredire à tout prix (ou est-ce l'inverse?). Je fais un coucou au voisin suisse Vivek, que j'ai été ravi de rencontrer durant cette thèse. Salutations à tous les collègues thésards ou postdocs croisés pendant cette thèse, Anil, Helder (pouce), Sumiran, Yasir, Carlos, David L., Daniel, Luca, Thibaut, David S., Medha, Fabricio, Vincent, Michael, François, et, beaucoup plus loin à Tokyo, à Yohei, avec qui j'ai eu la possibilité de collaborer. J'en profite pour remercier également Keisuke Totsuka pour son accueil chaleureux à Kyoto.

Moins loin cette fois, bon courage à Etienne, Antoine, David, Mickaël et Jean-Baptiste pour la fin de thèse ou l'année d'agrégation.

Les autres remerciements se sont déjà fait, ou se feront, de vive voix, notamment pour le soutien que j'ai pu recevoir dans les toutes dernières semaines de rédaction.

Table des matières

Introduction	9
I Cadre théorique et revue expérimentale	11
1 Magnétisme	11
1.1 Modèles pour les systèmes magnétiques	11
1.2 Frustration	13
1.3 Modèles sous champ : processus d'aimantation	14
1.4 Des résultats utiles	17
2 Plateaux d'aimantation : exemples théoriques et expérimentaux	20
2.1 Systèmes unidimensionnels	20
2.2 Systèmes bidimensionnels	26
3 Conclusion	32
II Tubes de spin triangulaires	33
1 Présentation des modèles	34
1.1 Tube triangulaire simple	34
1.2 Tube triangulaire déformé	36
1.3 Symétries et observables utiles	36
1.4 Triangles découplés	37
2 Petite revue expérimentale	38
3 Tube triangulaire simple	41
3.1 Approche par intégrale de chemin	41
3.2 Limite de couplage fort : modèles effectifs et chiralité	56
3.3 Résultats numériques pour $S = 3/2$	62
4 Tube triangulaire déformé	70
4.1 Approche par intégrale de chemin	70
4.2 Limite de couplage fort	73
4.3 Composé $[(\text{CuCl}_2\text{tachH})_3\text{Cl}]\text{Cl}_2$	74
4.4 Résultats numériques pour $S = 3/2$	75
5 Conclusion et perspectives	77
III Tube de spin carré	79
1 Ordre par le désordre	80
2 Présentation du modèle	82
2.1 Symétries	82
2.2 Configuration classique	83

3	Approche par intégrale de chemin	85
3.1	Action de basse énergie	85
3.2	Energie libre et sélection	87
3.3	Délocalisation et <i>spin imbalance</i>	88
4	Approche de couplage fort	91
4.1	Cas $S = 1/2$	91
4.2	Cas d'un spin S : dernier plateau d'aimantation	102
5	Résultats numériques	105
5.1	Cas $S = 1/2$	105
5.2	Cas d'un spin- S	108
6	Comparaison avec l'intégrale de chemin	113
7	Conclusion	114
 IV Modèle étendu de spin-1/2 sur le réseau Kagomé dans la limite Ising		 117
1	Motivations	118
1.1	Quelques concepts	118
1.2	A la recherche des phases topologiques	122
2	Présentation du modèle BFG	124
2.1	Des spins aux dimères : modèle effectif	126
2.2	Modèle en champ nul, liquide de spin \mathbb{Z}_2 et entropie topologique	130
2.3	Modèle avec champ et plateaux d'aimantation	132
3	Plateau $m = 1/6$: modèle de boucles	133
3.1	Phase solide	135
3.2	Entropie de Rényi	137
4	Discussion et perspectives	141
4.1	Plateau $m = 1/6$	141
4.2	Plateau $m = 1/3$	142
4.3	Modification du modèle BFG	143
 Conclusion		 145
 A Etats cohérents de spin		 147
 B Hamiltonien effectif au deuxième ordre au point symétrique		 149
 C Transformation non locale de Kennedy		 151
 D Monte-Carlo quantique et entropies de Rényi		 153
1	Principe	153
2	Mouvements Monte-Carlo	156
3	Observables	157
4	Algorithme de plaquettes	158
5	Entropies de Renyi et SSE	159
5.1	<i>Replica trick</i>	159
5.2	Observables SSE	160
5.3	<i>Ratio trick</i>	161
5.4	Méthode dynamique : variante	163

Table des matières

5.5 Exemples	164
Bibliographie	167
Publications	185

Introduction

Le travail de thèse présenté dans ce manuscrit concerne l'étude théorique de systèmes de matière condensée, et traite plus précisément de la problématique des comportements que peuvent afficher les systèmes magnétiques quantiques en présence d'un champ magnétique. Les systèmes de spins en basses dimensions sont depuis ces vingt-cinq dernières années un champ d'étude particulièrement actif. Si le magnétisme a bien sûr toujours été un domaine particulièrement riche de la physique (pensons au modèle d'Ising, dont l'étude a permis la compréhension de nombreux phénomènes comme la transition entre état ferromagnétique et état paramagnétique), un nouvel élan a eu lieu avec la découverte de la supraconductivité à haute température critique. Les études expérimentales ont montré que la plupart de ces nouveaux supraconducteurs sont des isolants de Mott, la supraconductivité apparaissant avec le dopage. Du point de vue théorique, cela permet de faire émerger, à partir des modèles électroniques fortement corrélés décrivant ces matériaux, des modèles où ne reste que le degré de liberté de spin, la charge étant gelée.

Plus généralement, il existe aujourd'hui un nombre toujours croissant de composés pouvant être représentés par des modèles magnétiques à une ou deux dimensions. Ils constituent ainsi, à la fois expérimentalement et théoriquement, un vaste champ d'étude. Dans le même temps, les progrès effectués dans la génération de champs magnétiques plus intenses permettent de tester les prédictions faites sur les comportements particuliers dus à un champ magnétique externe, et notamment les plateaux d'aimantation, thème au cœur de cette thèse. Existant à la fois classiquement et quantiquement, les plateaux d'aimantation posent très souvent de nombreuses questions quant à leur nature. De plus, nous donnerons des exemples montrant que faire le lien entre expérience et théorie peut s'avérer délicat, tant les processus d'aimantation peuvent être complexes et difficiles à comprendre à partir de modèles simplifiés.

Le plan que nous allons suivre dans ce mémoire est le suivant. Pour commencer, le Chapitre I est consacré à une mise en contexte du travail effectué. Nous présenterons d'un point de vue général le magnétisme quantique à partir du modèle de Heisenberg. Nous nous attacherons à décrire le rôle crucial que peuvent avoir les fluctuations quantiques sur la formation d'états échappant complètement à une image classique. Dans cette même optique, nous parlerons du concept de frustration, qui rend l'approche de ces systèmes bien souvent très complexe. Nous présenterons également les concepts généraux associés au processus d'aimantation sous champ, et plus particulièrement la notion de plateau d'aimantation, ainsi que des résultats exacts bien utiles. Dans un second temps, nous effectuerons une revue, à la fois théorique et expérimentale, des plateaux d'aimantation dans les systèmes en basse dimension. Les trois chapitres suivants seront chacun dédiés à l'étude d'un modèle particulier. Le Chapitre II traite d'un tube de spins triangulaire. En utilisant diverses approches analytiques et théoriques, nous obtiendrons un diagramme de phases sous champ. Au-delà de la présence de plateaux, où les excitations magnétiques sont gappées, nous verrons que des degrés de liberté non magnétiques peuvent jouer un rôle important. Une variable de chiralité apparaîtra dans la description effective de certains plateaux et pourra subir plusieurs transitions de phase, donnant ainsi lieu à un riche diagramme de

phases. Dans le Chapitre III suivant, nous aborderons le cas d'un autre système unidimensionnel, un tube de spins carré. La présence d'une dégénérescence continue au niveau classique et du phénomène d'ordre par le désordre sera utilisée pour comprendre le diagramme de phases quantique. Si les deux tubes de spins, triangulaires et carrés, ont des phases de même nature, nous justifierons qu'elles ont des origines bien différentes, justement à cause de cette dégénérescence classique qui n'est pas présente dans le cas triangulaire. Finalement, dans le Chapitre IV nous quitterons le monde unidimensionnel et nous intéresserons à un modèle de spin-1/2 sur le réseau bidimensionnel Kagomé. Ce réseau est depuis plusieurs années au centre de l'attention dans la recherche de phases exotiques. Nous considérerons un modèle de Heisenberg étendu, introduit il y a quelques années pour réaliser une phase topologique en champ nul. L'ajout d'un champ magnétique fait apparaître plusieurs plateaux aux aimantations par spin $m = 1/6$ et $m = 1/3$, et nous étudierons le premier. Cette démarche s'inscrit dans un esprit d'« ingénierie » de modèles microscopiques possédant des états non conventionnels, avec ici l'émergence de modèles effectifs contraints dans une certaine limite perturbative. Pour le plateau considéré, nous trouvons un état cristallin, contrairement au cas sans champ. Cela nous donnera l'occasion de commenter le comportement de l'entropie de Rényi dans cette phase, qui pose des questions intéressantes dans le contexte du développement de nouvelles observables pour ces phases exotiques. Finalement, nous essaierons de dégager des perspectives intéressantes avec, par exemple, des pistes sur quelle serait la physique du plateau $m = 1/3$ ainsi que comment modifier le Hamiltonien pour induire l'apparition de phases topologiques sur les deux plateaux, ce qui permettrait d'aborder l'étude de nouvelles transitions de phases.

Chapitre I

Cadre théorique et revue expérimentale

Ce premier chapitre a pour objectif d'introduire les problématiques qui se posent dans les études de systèmes magnétiques sous champ, et l'accent est mis sur des systèmes de basse dimensionalité. Pour commencer, nous introduirons les principaux concepts qui fondent le domaine du magnétisme quantique, à partir du modèle de Heisenberg. Nous discuterons comment les fluctuations quantiques peuvent rendre le monde quantique très différent du monde classique, et nous discuterons le concept crucial de frustration. Nous poursuivrons en examinant les possibles effets d'un champ magnétique externe, et notamment la formation de plateaux d'aimantation, un concept central au cours de cette thèse. Cette brève introduction au magnétisme quantique sera terminée par la présentation de théorèmes importants pour les systèmes en basses dimensions. Dans un second temps, nous procéderons à une revue, théorique et expérimentale à la fois, de systèmes présentant des plateaux d'aimantation. Cela permettra de mettre en lumière la grande variété des comportements pouvant être observés, tant théoriquement qu'expérimentalement.

1 Magnétisme

1.1 Modèles pour les systèmes magnétiques

Au cours de ce manuscrit, nous allons traiter la physique de systèmes magnétiques, c'est-à-dire d'un ensemble de N spins \vec{S}_i de longueur S qui sont disposés sur un certain réseau. Afin d'aller plus loin dans l'étude, il faut spécifier le modèle décrivant les interactions entre les spins. Le Hamiltonien utilisé pour cela est le fameux modèle de Heisenberg

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (\text{I.1})$$

où la somme se fait sur les paires de sites i, j , J_{ij} est appelée l'intégrale d'échange et $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ est l'opérateur de spin- S au site i . Les opérateurs de spins obéissent aux relations de commutation $[S_k^\alpha, S_l^\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_k^\gamma \delta_{kl}$. Il est important de remarquer l'invariance de rotation SU(2) de ce modèle, et donc à la fois le spin total ainsi que sa composante suivant l'axe z sont des quantités conservées. Les états propres du Hamiltonien seront donc labélisés par les nombres quantiques S_{tot} et S_{tot}^z , et dégénérés $2S_{tot} + 1$ fois. Nous sommes intéressés par déterminer l'état fondamental de ce type de modèle à température nulle. Généralement, deux cas sont à distinguer. Des termes d'échanges J_{ij} négatifs favorisent des corrélations ferromagnétiques où l'énergie est minimisée en alignant parallèlement les

spins, ce qui résulte en un moment magnétique total fini. D'un autre côté, si le terme d'interaction J_{ij} est positif les spins vont préférer une configuration antiferromagnétique en s'alignant antiparallèlement.

Il est instructif d'introduire les opérateurs d'échelle $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$, qui permettent de réécrire le Hamiltonien comme

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \left[\frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right]. \quad (\text{I.2})$$

De cette façon, nous pouvons voir que si l'état ferromagnétique $|\uparrow\uparrow\uparrow \dots\rangle$ est bien un état propre du modèle de Heisenberg, ce n'est pas le cas pour un état antiferromagnétique $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots\rangle$, dit état de Néel. Cet état reste bien inchangé après application des termes diagonaux Ising $S_i^z S_j^z$, mais est modifié par les termes de saut $S_i^+ S_j^-$, que nous interprétons donc comme les fluctuations quantiques. Cela permet de comprendre que pour un modèle antiferromagnétique, ou du moins possédant une partie de ses couplages qui sont antiferromagnétiques, l'état fondamental n'est pas trivial, contrairement à un modèle purement ferromagnétique. De fait, la résolution du modèle de Heisenberg, ou de ses variantes avec par exemple une anisotropie de spin comme le modèle XXZ de symétrie $U(1)$

$$H = \sum_{i,j} \left[\frac{1}{2} J_{ij}^{xy} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + J_{ij}^z S_i^z S_j^z \right] \quad (\text{I.3})$$

est, malgré sa simplicité apparente, un problème qui n'admet pas de solution générale. A part dans certains cas particuliers, par exemple la chaîne de Heisenberg, où une solution exacte est connue [1], trouver l'état fondamental d'un modèle antiferromagnétique donné, sur un réseau donné et avec des valeurs de couplages données, est une question qui nécessite généralement l'emploi d'approximations et/ou de méthodes numériques adaptées. Quelques résultats généraux sont néanmoins disponibles. Pour les modèles antiferromagnétiques sur un réseau bipartite (*i.e.* qui peut être séparé en deux sous-réseaux A et B tels que les spins sur un sous-réseau n'interagissent qu'avec ceux de l'autre sous-réseau), le théorème de Marshall [2] nous dit que l'état fondamental est un singulet $S_{tot} = 0$ unique.

Malgré tout, l'état de Néel, « habillé » par les fluctuations quantiques, reste une bonne approximation de l'état fondamental pour un certain nombre de modèles antiferromagnétiques. Il est identifié par la présence d'un ordre à longue portée dans les corrélations alternées $(-1)^r \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+r}$, ou, de manière équivalente, par la mise en évidence de la présence de deux sous-réseaux dans lesquels les spins sont, en bonne approximation, alignés antiparallèlement. Par rapport au cas classique, l'aimantation $\langle \vec{S}_i \rangle$ sur chaque sous-réseau (aimantation alternée) est réduite par les fluctuations quantiques mais reste finie. D'une certaine manière, nous pouvons dire que les fluctuations quantiques sont au final négligeables, puisqu'elles n'influent pas directement sur la nature de l'état par rapport au cas classique (comme pour un état ferromagnétique, où le fondamental est le même que classiquement). C'est le cas par exemple dans des systèmes 2D comme pour le modèle de Heisenberg sur le réseau carré avec $S = 1/2$ [3, 4] (résultats numériques) et $S \geq 1$ [5] (résultat exact), ou sur le réseau hexagonal avec $S = 1/2$ [6, 7] (résultats numériques) et $S \geq 3/2$ [5] (résultat exact). En 3D, des résultats rigoureux existent pour différents modèles dont Heisenberg pour $S = 1/2$, sur le réseau cubique [8, 9]. Tous ces modèles entrent dans le cadre du théorème de Marshall. Remarquons que nous n'avons pas donné d'exemples 1D, puisque le théorème de Mermin-Wagner et sa version quantique interdisent de briser une symétrie continue en une dimension, ou à température finie à deux dimensions, ce qui est le cas de l'état de Néel [10, 11]. Mais même pour la chaîne de Heisenberg de spin-1/2, les corrélations antiferromagnétiques décroissent lentement (loi de puissance) et demeurent les corrélations dominantes [1]. Il faut cependant remarquer le cas particulier des chaînes de spins entiers, pour lesquelles la phase dite de HALDANE, gappée et avec des corrélations à courte portée, est très différente de l'état classique [12].

Dans tous ces cas d'ordre antiferromagnétique, au-delà des résultats exacts ou de l'utilisation de méthodes numériques sophistiquées, ces états sont très bien décrits par des méthodes plus simples. L'approche de *spin-waves* [13, 14], qui est un développement en $1/S$ où les corrections à l'état classique par les fluctuations quantiques sont vues comme la création de quasi-particules bosoniques, s'est ainsi révélée relativement précise dans l'estimation de l'aimantation alternée pour le réseau carré [15, 16] ou hexagonal [7]. Une autre méthode est les *series expansions* [17, 18], qui est un développement en J_{xy}/J_z autour de la limite Ising, où l'état de Néel existe puisque c'est l'état classique.

1.2 Frustration

D'autres états magnétiquement ordonnés, mais cependant légèrement différents de l'état de Néel, existent. Un exemple typique est celui du modèle de Heisenberg sur le réseau triangulaire, qui a pendant longtemps fait débat quant à la nature magnétique ou non de son état fondamental [19, 20, 21]. Il est maintenant bien établi que le système possède un ordre non colinéaire à 120° , avec donc la formation de trois sous-réseaux. Un tel état peut-être vu comme un état de Néel non colinéaire, et il est évident que les interactions entre spins ne sont alors pas complètement satisfaites. Cette différence entre les réseaux carré et hexagonal d'un côté et le réseau triangulaire de l'autre nous permet d'introduire le concept de *frustration*. Intuitivement, nous pouvons définir la frustration comme étant l'impossibilité pour le système, au niveau classique, de satisfaire complètement tous les couplages. C'est donc le cas sur le réseau triangulaire, avec l'image habituelle d'un unique triangle pour lequel il est impossible d'arranger les spins pour que les trois liens soient satisfaits : il y a forcément un lien où les deux spins sont parallèles. Plus formellement, nous dirons que le modèle est frustré si le paramètre défini comme le produit des couplages $-J_{ij}$ le long des liens formant un chemin fermé \mathcal{C}

$$\mathcal{P} = \prod_{(i,j) \in \mathcal{C}} (-J_{ij}) \quad (\text{I.4})$$

est négatif [22]. Ce paramètre nous dit bien que de la frustration est présente pour le réseau triangulaire, mais pas pour le réseau carré (avec termes entre plus proches voisins). La frustration peut provenir soit des propriétés géométriques du réseau, comme le réseau triangulaire ou le réseau Kagomé, qui fera l'objet du Chapitre IV et qui constitue sûrement le meilleur exemple des conséquences de la frustration. Une autre possibilité est la présence d'interactions en compétition. En effet, si nous rajoutons un couplage antiferromagnétique entre seconds voisins sur les réseaux carré ou hexagonal (modèle dit $J_1 - J_2$), ces nouveaux liens sont frustrés dans l'état de Néel.

Sur l'exemple du réseau triangulaire, la présence de frustration ne semble au final pas être si dramatique que cela, puisque l'état fondamental reste quand même magnétiquement ordonné. Cela n'est cependant pas vrai en général, et la frustration a souvent des conséquences très importantes sur l'état du système. Déjà au niveau classique, son effet se manifeste (souvent) par une dégénérescence macroscopique de l'état fondamental, comme pour le modèle de Heisenberg sur le réseau Kagomé [23, 24, 25]. Cela peut se comprendre par le fait que pour un système frustré, il n'est pas possible de satisfaire toutes les contraintes locales, et l'état fondamental résulte donc d'une sélection énergétique globale. De cette façon, nous pouvons imaginer que des modifications locales vont pouvoir être effectuées sans changer l'énergie totale [23]. Nous présenterons au Chapitre III le mécanisme par lequel les fluctuations thermiques peuvent lever, au moins partiellement, cette dégénérescence accidentelle puisque non reliée à des symétries du modèle. Quantiquement, la frustration va favoriser les fluctuations quantiques, et ainsi contribuer à la possible destruction de l'ordre magnétique, c'est-à-dire que l'aimantation locale $\langle \vec{S}_i \rangle$ est nulle, dans de nombreux systèmes. Ce n'est pas le seul ingrédient, d'autres, comme une

dimensionalité réduite ou une petite coordonnance du réseau, jouent également. Si pour certaines de ces phases non magnétiques, par exemple les nématiques [26, 27] (avec des termes supplémentaires par rapport au modèle de Heisenberg), il est quand même possible de trouver un ordre brisant la symétrie SU(2), la frustration va également conduire à des phases où cette symétrie est complètement restaurée. Parmi ces phases non magnétiques se trouvent des phases plus traditionnelles comme des cristaux (de singulets) [7], mais également des états beaucoup plus exotiques, les *liquides de spin*, qui nécessitent l'introduction de nouveaux concepts et constituent actuellement un champ d'étude très actif. Le modèle de Heisenberg de spin-1/2 sur le Kagomé est un très bon exemple des conséquences importantes que peut avoir la frustration. Son état est bien non magnétique (singulet), et on trouve dans le gap vers le premier état magnétique (un triplet) un nombre exponentiel $\sim 1,15^N$ d'excitations de singulets [28, 29], à mettre en lien avec ce que nous avons dit juste avant sur la dégénérescence au niveau classique. Dans ces modèles frustrés, de nombreux états de basse énergie sont ainsi souvent en compétition. Nous reviendrons plus longuement dans l'introduction du Chapitre IV sur les idées principales concernant les liquides de spins. Pour résumer, nous pouvons dire que la frustration constitue en fait l'élément clé de l'étude des systèmes magnétiques et participe largement à leur donner toute leur richesse [30].

1.3 Modèles sous champ : processus d'aimantation

Jusqu'à présent, nous n'avons discuté que des systèmes de spins en l'absence d'un champ magnétique externe. Les états que nous avons décrits ont tous une aimantation totale nulle, que ce soient les états magnétiques (Néel) ou les états non magnétiques. Lorsqu'un champ magnétique, que nous prenons parallèle à l'axe z , est présent, il se couple aux spins et le Hamiltonien (I.1) devient

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - h \sum_i S_i^z. \quad (\text{I.5})$$

Pour minimiser l'énergie, les spins doivent donc s'aligner parallèlement au champ. Lorsque le champ dépasse une valeur critique h_{sat} , ils vont être complètement polarisés le long du champ. D'un autre côté, ce dernier va permettre des comportements intéressants pour les aimantations intermédiaires, et en particulier la présence de plateaux lorsque nous regardons comment évolue l'aimantation en fonction du champ. Pour certaines valeurs particulières de l'aimantation, il est ainsi possible qu'elle reste constante pour une plage de valeurs du champ magnétique, donnant ainsi naissance à un *plateau d'aimantation*. Nous allons maintenant discuter plusieurs aspects des processus d'aimantation. La présentation que nous allons donner ici s'inspire largement de celle faite par LHULLIER et MISGUICH [31].

1.3.1 De l'énergie à la courbe d'aimantation

Pour commencer, il est instructif de faire le lien entre énergie du système et courbe d'aimantation. Nous prenons comme point de départ le Hamiltonien (I.5). Par rapport au modèle sans champ, la symétrie de spin SU(2) a été abaissée à U(1), et les états sont spécifiés uniquement par leur nombre quantique S_{tot}^z . Que le système soit classique ou quantique, supposons que nous connaissons $e(m) = E(m)/N$ l'énergie par spin pour un réseau de N sites, où nous avons défini $m = M/N$ l'aimantation par site et

$$M = \left\langle \sum_{i=1}^N S_i^z \right\rangle = \langle S_{tot}^z \rangle. \quad (\text{I.6})$$

La connaissance de l'énergie en champ nul est la seule information requise pour tracer la courbe d'aimantation, il n'est pas nécessaire de calculer l'énergie pour chaque valeur du champ. En effet, pour

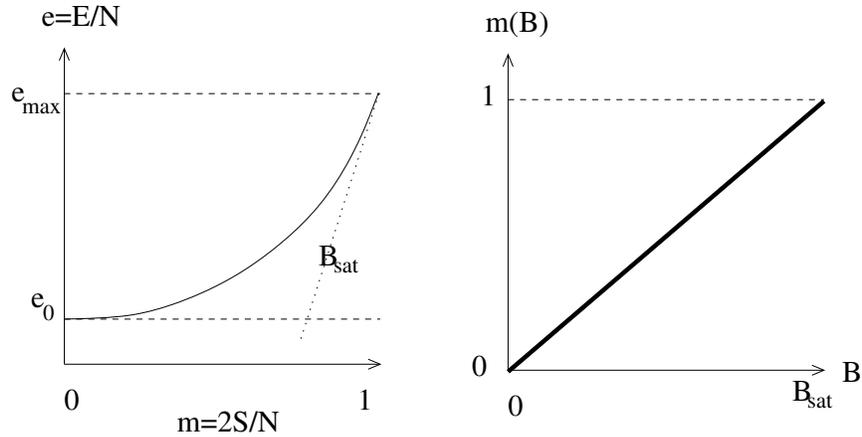


FIGURE I.1 – A gauche, l'énergie varie quadratiquement avec l'aimantation. A droite, aimantation (normalisée par m_{sat} , *i.e.* m/S dans nos notations) en fonction du champ magnétique B (h) calculée d'après (I.7). Une telle situation se retrouve pour l'ordre de Néel du modèle de Heisenberg sur le réseau carré. Figure tirée de la référence [31].

une valeur de h finie, la courbe $m(h)$ est obtenue en minimisant l'énergie $e(m) - hm$ par rapport à m . Cela donne la relation

$$h = \frac{\partial e(m)}{\partial m}. \quad (\text{I.7})$$

A partir de cette équation nous pouvons déjà distinguer plusieurs cas possibles. Supposons par exemple que l'énergie soit quadratique en fonction du champ, $e(m) \propto m^2$, et que donc la relation entre h et m soit linéaire. Cela donne une courbe d'aimantation continue jusqu'à la saturation, comme celle présentée sur la Figure I.1. En particulier, l'aimantation est finie dès qu'un champ infinitésimal est appliqué. Les états avec un ordre antiferromagnétique colinéaire, comme le modèle de Heisenberg sur le réseau carré [32, 33], suivent ce comportement. Lorsque le champ augmente, l'état de Néel s'aligne progressivement sur le champ de long de l'axe z , tout en gardant un ordre antiferromagnétique dans le plan transverse xy . Le fait que ce processus soit continu et régulier se retrouve ainsi dans la forme de la courbe d'aimantation.

Un autre scénario est représenté sur la Figure I.2. Dans ce cas, la dérivée de l'énergie vérifie $\partial e/\partial m > 0$ en $m = 0$, et conduit à la présence d'un plateau à aimantation nulle, encore appelé *gap de spin*. Nous avons déjà évoqué ce cas plus haut, lorsque la première excitation magnétique est séparée de l'état fondamental singulet par un gap. Il faut alors appliquer un champ critique fini h_1 supérieur au gap pour induire une aimantation finie. Cette situation se retrouve donc dans de nombreux systèmes frustrés, puisque nous avons dit qu'il y a souvent disparition de l'ordre magnétique, ce qui s'accompagne dans de nombreux cas d'un gap de spin. En ce qui concerne la nature de la transition au champ h_1 , il n'y a pas de règle générale et elle peut être tout aussi bien du premier ordre que continue. En une dimension, des résultats exacts pour les chaînes de spins entiers montrent que génériquement la transition est continue, et que proche de h_1 l'aimantation varie comme $\sqrt{h - h_1}$ [34], et qui caractéristique de la transition commensurable-incommensurable. Le même comportement en racine carré se retrouve pour les systèmes de spins demi-entiers [1].

Finalement, un plateau à une aimantation finie est également possible, et apparaît lorsqu'une discontinuité est présente pour la dérivée $\partial e/\partial m$ à cette même aimantation (voir Figure I.3). Les valeurs h_1 et h_2 calculées de chaque côté de la discontinuité nous donnent alors l'étendue du plateau,

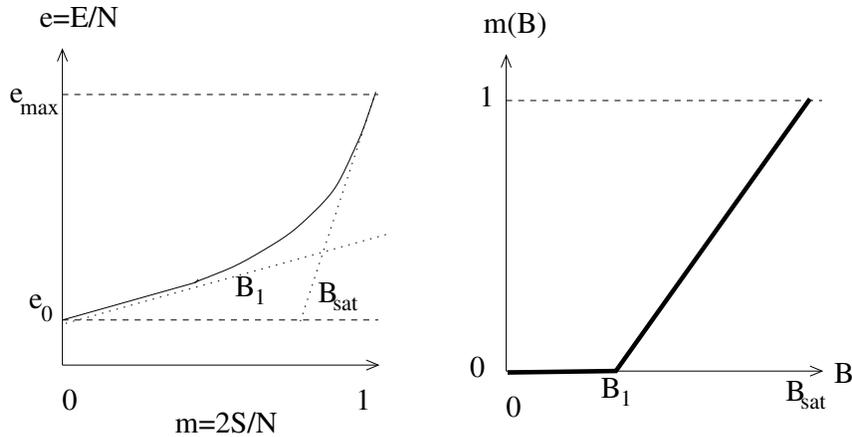


FIGURE I.2 – A gauche, l'énergie $e(m)$ est linéaire en m et sa dérivée est donc finie en $m = 0$. Cela se traduit par la présence d'un plateau d'aimantation de largeur B_1 (h_1 dans nos notations) pour $m = 0$, comme tracé à droite. Une telle situation se retrouve pour tous les états avec un gap de spin. Figure tirée de la référence [31].

qui existera pour $h \in [h_1, h_2]$. Comme pour un plateau en champ nul, cela veut dire que pour ces valeurs du champ les excitations magnétiques sont gappées. De même, là encore les transitions aux champs critiques peuvent être du premier ordre ou continues.

Dans cette thèse, nous allons nous intéresser à quelques systèmes présentant des plateaux d'aimantation, et donnerons des exemples à la fois théoriques et expérimentaux de plateaux d'aimantation dans la Section 2. Nous reviendrons par la suite sur ces idées, mais il est important d'insister dès maintenant sur le fait que la physique des plateaux est particulièrement riche. Si les excitations magnétiques sont gappées, cela ne veut pas dire que l'état est sans propriétés particulières, ni qu'il est unique. Il faut déterminer quel est la nature de l'état, qui peut être plus ou moins exotique, tout comme les excitations. Nous verrons dans la Section 1.4 que certains théorèmes nous renseignent, dans certains cas, sur les phases possibles d'un plateau.

1.3.2 Plateaux classiques, plateaux quantiques

Une question naturelle est de savoir si les plateaux d'aimantation sont un phénomène uniquement quantique ou non. Le fait que l'aimantation est *quantifiée* pour des plages de valeurs du champ pourrait laisser croire que la réponse est oui, sur le modèle de l'effet Hall quantique par exemple. Il se trouve que ce n'est pas le cas, et de nombreux systèmes classiques sont connus pour présenter des plateaux dans leurs courbes d'aimantation. Il est néanmoins possible de faire une distinction entre des plateaux que nous qualifierons de *classiques* et d'autres de *quantiques*.

En effet, il est possible de prouver que si un plateau existe dans un modèle classique, alors dans l'état qui lui correspond tous les spins sont nécessairement colinéaires au champ. Cela veut dire que la configuration classique est du type $u^{n-p}d^p$, où la cellule unité contient n spins, dont $n-p$ sont parallèles au champ (*up*) et p antiparallèles (*down*). L'aimantation par spin correspondante est $m = S(1 - 2p/n)$. La preuve est donnée dans la référence [31] et consiste à démontrer que si une configuration n'est *pas* colinéaire pour une certaine aimantation, alors la dérivée de $e(m)$ est continue pour cette aimantation. Physiquement, cela n'est pas surprenant. Pour un état où certains spins sont seulement partiellement polarisés, il est assez naturel de se dire que changer légèrement le champ fera simplement changer

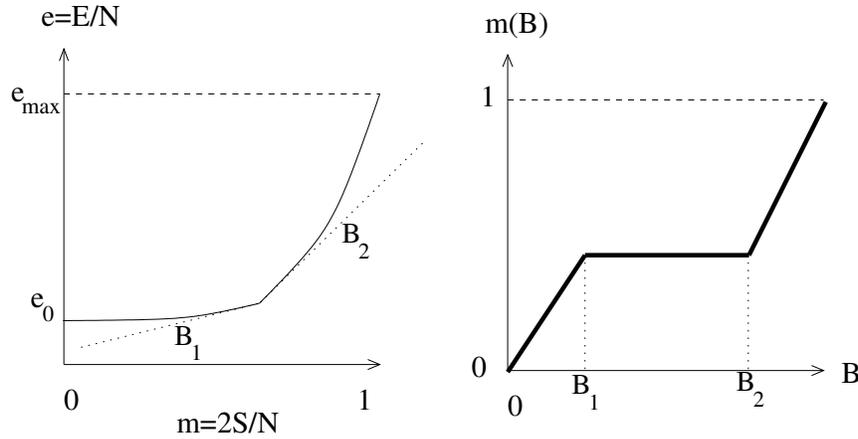


FIGURE I.3 – A gauche, la dérivée de l'énergie $e(m)$ présente une discontinuité pour une certaine valeur de l'aimantation. Cela se traduit à droite par la présence d'un plateau pour cette aimantation, pour des valeurs du champ h comprises entre les deux valeurs h_1 et h_2 données par la dérivée de chaque côté de la discontinuité. A droite, aimantation (normalisée par m_{sat} , *i.e.* m/S dans nos notations) en fonction du champ magnétique B (h) calculée d'après (I.7). Une telle situation se retrouve pour l'ordre de Néel du modèle de Heisenberg sur le réseau carré. Figure tirée de la référence [31].

l'état de manière continue, *i.e.* les spins seront légèrement plus polarisés, et que l'énergie variera de manière « lisse ». Au contraire, si tous les spins sont parallèles ou antiparallèles au champ, il est plus naturel de s'attendre à un comportement moins régulier de l'énergie, puisque la forme de l'état devra forcément changer de façon discontinue pour continuer le processus d'aimantation quand le champ augmente (voir dans la Section 2.2.2 l'exemple du réseau triangulaire). Cette condition de colinéarité est de plus assez générale puisque ne nécessitant que très peu d'hypothèses [31].

Il s'en suit que dans certains systèmes, un plateau sera présent pour une aimantation donnée à la fois dans le modèle classique et dans le modèle quantique. Dans ce second cas, l'état pourra normalement se comprendre à partir de l'état classique, l'effet des fluctuations quantiques étant mineur. Dans d'autres situations par contre, le plateau ne sera présent que pour le modèle quantique et ne pourra donc pas se comprendre en termes de phase classique survivant aux fluctuations quantiques, d'où le terme de plateau quantique. Nous avons jusque là seulement parlé de la physique à température nulle. Généralement, l'effet d'une température finie sera de réduire la taille du plateau, jusqu'à ce qu'il disparaisse au dessus d'une certaine température critique. Nous donnerons cependant plus loin un exemple où la température est *nécessaire* pour qu'un plateau (classique) apparaisse. Nous allons maintenant donner plusieurs théorèmes, dont l'un va se révéler très utile puisqu'il donne une condition sur les plateaux quantiques.

1.4 Des résultats utiles

1.4.1 Théorème de Lieb-Schultz-Mattis

Le théorème de LIEB, SCHULTZ et MATTIS (LSM) [35] nous renseigne sur la nature de l'état fondamental des chaînes de spins demi-entiers. Plus précisément, ce théorème concerne les Hamiltoniens qui sont invariants par translation, ont une symétrie de spin $SU(2)$ et des interactions à suffisamment courte portée, ce qui reste raisonnable comme hypothèses. Prenons comme modèle la chaîne de

Heisenberg de spin- S avec interactions entre plus proches voisins

$$H = J \sum_{j=1}^L \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1}, \quad (\text{I.8})$$

avec les conditions périodiques $\vec{S}_{L+1} = \vec{S}_1$ et L pair. Pour les spins demi-entiers $S = 1/2, 3/2, \dots$, le théorème nous dit qu'il n'y a que deux possibilités pour l'état fondamental : soit il est unique et il existe une excitation d'énergie arbitrairement basse, *i.e.* le spectre n'a pas de gap, soit le fondamental est dégénéré et un gap s'ouvre. Dans ce second cas, la dégénérescence provient d'une brisure spontanée de la parité, avec par exemple la formation de singulets sur les sites voisins.

La démonstration du théorème repose sur la construction d'un état $|\Psi_1\rangle$ d'énergie E_1 orthogonal au fondamental $|\Psi_0\rangle$, supposé invariant par rotation et selon la parité, d'énergie E_0 et de montrer que leur différence d'énergie tend vers 0 dans la limite thermodynamique. L'état proposé par LSM est donné par l'application sur $|\Psi_0\rangle$ d'une transformation unitaire U

$$|\Psi_1\rangle = U|\Psi_0\rangle, \quad U = \exp\left(i\frac{\pi}{k} \sum_{j=-k}^k (j+k)S_j^z\right). \quad (\text{I.9})$$

Autrement dit, nous sommes en train d'appliquer une torsion de $\pi(j+k)/k$ autour de l'axe z du spin au site j . Cette torsion est donc de 2π entre le site en $-k$ et le site en k . Si k est pris comme étant de l'ordre de L la longueur de la chaîne, il s'en suit que l'énergie additonnelle est petite puisque la torsion relative entre deux spins consécutifs est infinitésimale. La différence d'énergie s'annule donc dans la limite thermodynamique comme

$$\Delta E = \langle \Psi_1 | H - E_0 | \Psi_1 \rangle = o(1/L), \quad (\text{I.10})$$

pour tout Hamiltonien local et symétrique. Cela constitue la première étape de la preuve, et il reste à vérifier que cet état est bel et bien distinct de $|\Psi_0\rangle$. Sinon, il se pourrait que $|\Psi_1\rangle$ approche $|\Psi_0\rangle$ pour $k \rightarrow \infty$, ce qui ne donnerait alors aucune information. Cela se fait en montrant que les deux états sont orthogonaux, et c'est ce point qui va faire intervenir la nature demi-entière du spin. En effet, l'opérateur U modifie la parité de l'état $|\Psi_0\rangle$. Effectuant une inversion de parité $j \rightarrow -j$ puis une rotation de π autour de l'axe y , il vient

$$U \rightarrow U \exp\left(-i2\pi \sum_{j=-k}^k S_j^z\right). \quad (\text{I.11})$$

Puisque nous sommes sur un nombre impair de site, le facteur de phase pris par U est $+1$ si S est entier et -1 s'il est demi-entier. Autrement dit, dans le premier cas nous ne pouvons rien dire quant à l'orthogonalité des deux états, tandis que dans le second il sont nécessairement orthogonaux puisqu'ils ont une parité opposée. Il n'y a donc que les deux possibilités annoncées plus haut : soit $|\Psi_1\rangle$ correspond à une excitation *gapless*, soit la parité est brisée et le fondamental est deux fois dégénéré, avec un gap au-dessus. Cela conclut la démonstration du théorème.

1.4.2 Critère de Oshikawa-Yamanaka-Affleck

Le théorème LSM repose sur la construction d'un état variationnel de basse énergie pour des modèles à symétrie $SU(2)$. En fait, OSHIKAWA, YAMANAKA et AFFLECK (OYA) ont montré que la

démonstration pouvait être prolongée aux modèles de symétrie $U(1)$, et donc en présence d'un champ magnétique, tant que $n(S - m)$ n'est pas un entier, où n est le nombre de spins par cellule unité et m l'aimantation par spin, non normalisée comme précédemment [36]. Cela suggère que comme un plateau nécessite un gap, c'est seulement dans ce cas qu'un plateau d'aimantation peut être attendu. En fait, l'application « directe » du théorème LSM nécessite d'être prudent. Si nous revenons à l'état $|\Psi_1\rangle$ donné en (I.9), il a la même aimantation que l'état $|\Psi_0\rangle$. Or, pour avoir un plateau il faut avoir un gap vers les excitations *magnétiques*, et à première vue la construction LSM ne nous donne en fait pas d'information là-dessus. Il n'est donc *a priori* pas impossible d'avoir des excitations magnétiques gappées pour $n(S - m) \notin \mathbb{Z}$, tout en ayant des excitations non magnétiques sans gap. Cependant, des arguments de bosonisation, donnés par OYA et par TOTSUKA, montrent qu'en fait une phase *gapless* aura des excitations de basse énergie dans plusieurs secteurs d'aimantation [36, 37]. La condition OYA

$$n(S - m) \in \mathbb{Z} \tag{I.12}$$

est donc en fait une condition *nécessaire* pour avoir un plateau d'aimantation dans les systèmes unidimensionnels. Elle n'est par contre pas suffisante, puisque les plateaux prédits ne sont pas toujours observés.

Il est nécessaire d'apporter une précision importante sur cette condition. Dans la formule (I.12), n n'est pas contraint à être la cellule unité donnée par le Hamiltonien. En cas de brisure spontanée de la symétrie de translation par exemple, n sera la périodicité spatiale de l'état fondamental. Le critère OYA pourrait se réécrire de manière équivalente $S_u - m_u \in \mathbb{Z}$, où S_u et m_u sont respectivement la somme de S et de m sur une cellule unité de l'état directement, sans considération de celle du Hamiltonien. Suivant OYA, pour la chaîne de spin (et donc une cellule unité du Hamiltonien $n = 1$), avoir $S - m = p/q$ où p, q sont premiers entre eux, signale ainsi un état fondamental dégénéré q fois qui brise la translation, et donc un plateau. Jusqu'à présent, tous les plateaux trouvés dans les modèles 1D satisfont à ce critère (voir les exemples de la Section 2.1). Pour finir, mentionnons qu'il est possible de faire un parallèle entre le critère OYA et celui sur les plateaux classiques [31].

1.4.3 Théorème de Hastings

Les deux résultats précédents sont restreints aux systèmes unidimensionnels, bien que plusieurs arguments [38, 39, 40] suggèrent qu'ils soient également vrais pour les dimensions supérieures. En particulier, les plateaux observés en deux dimensions vérifient systématiquement le critère OYA. Reformulons le théorème LSM de la manière suivante : pour un système avec un spin demi-entier par cellule élémentaire, l'état fondamental ne peut pas être gappé et unique. En 2004, HASTINGS a réussi à l'étendre en dimension $D > 1$ [41], là encore pour un Hamiltonien respectant des conditions assez faibles. Ce résultat est notamment vrai pour une symétrie $SU(2)$ ou $U(1)$. Pour un système 2D respectant ces conditions, il n'est donc pas possible d'avoir un état fondamental unique. Ce résultat est extrêmement important, car pour le cas où il y a une dégénérescence et un gap, il y a maintenant deux possibilités. A la traditionnelle brisure spontanée de symétrie, comme la translation, s'ajoute la possibilité d'avoir une dégénérescence d'origine topologique, que nous avons déjà évoquée plus haut. Nous ne rentrerons pas ici plus dans le détail et renvoyons le lecteur au préambule du Chapitre II. Si le spin est entier, le théorème ne nous donne pas d'information et un état unique gappé reste possible.

Comment cela se traduit-il au niveau de la condition OYA ? Si nous prenons comme avant la quantité $n(S - m)$, où n est cette fois donné par la cellule unité du Hamiltonien, le théorème de Hastings nous dit que si le résultat n'est pas entier, alors l'état fondamental est soit *gapless*, soit gappé et dégénéré. En pratique, lorsque nous savons qu'un plateau d'aimantation est présent pour

une certaine aimantation m , le calcul de $n(S - m)$ nous dira si nous sommes dans le cas d'un plateau dit *fractionnaire*, ou d'un plateau dit *entier*. S'il est entier, le plateau peut tout aussi bien être donné par un état unique. A titre d'exemple, nous pouvons appliquer ce critère au cas du réseau Kagomé, pour lequel $n = 3$. Dans le modèle que nous étudierons au Chapitre IV, trois plateaux sont présents dans la courbe d'aimantation, aux valeurs $m = 0, 1/6, 2/6$. En calculant $n(S - m)$, nous trouvons respectivement $3/2, 1, 1/2$. Nous en concluons donc que pour les deux plateaux $m = 0, 2/6$, il y aura nécessairement un état fondamental dégénéré, tandis que pour le plateau intermédiaire nous ne savons rien *a priori*.

2 Plateaux d'aimantation : exemples théoriques et expérimentaux

Après avoir introduit plusieurs concepts généraux sur les systèmes magnétiques quantiques, nous allons maintenant procéder à une revue, à la fois théorique et expérimentale, de modèles sous champ présentant des plateaux d'aimantation, en incluant les cas des gaps de spin. La littérature, notamment théorique et en une dimension, étant particulièrement abondante, nous essaierons de nous focaliser sur les exemples majeurs, avec des modèles restant assez simples pour avoir une ou plusieurs réalisations expérimentales. Nous considérerons dans un premier temps les systèmes unidimensionnels, puis nous nous tournerons vers les systèmes bidimensionnels.

2.1 Systèmes unidimensionnels

Il est utile de commencer par rappeler quels sont les résultats majeurs qui fondent notre compréhension des systèmes unidimensionnels. Ceux-ci peuvent être divisés en trois groupes : les chaînes, les échelles et les tubes de spins. Nous renvoyons la discussion sur les tubes de spins au chapitre suivant, et discuterons ici les deux premiers groupes. Pour plus d'informations, le lecteur pourra consulter la revue [42] ainsi que les références qu'elle contient.

La chaîne de Heisenberg $S = 1/2$ étant intégrable, il est connu depuis longtemps qu'elle est dans une phase critique. Nous savons maintenant depuis le travail de HALDANE qu'il en va de même pour tout spin demi-entier, tandis que les chaînes de spin entier sont dans une phase massive et non dégénéré [12] (ce qui est bien permis par le théorème LSM). Ces résultats, dérivés grâce à une approche semi-classique, ont été vérifiés tant numériquement qu'analytiquement. Une extension évidente des chaînes est les échelles, qui sont constituées de plusieurs chaînes couplées dans la direction transverse. Similairement à la différence entre spin entier et demi-entier, il existe un effet de parité du nombre N de chaîne de spin-1/2 qui sont couplées pour donner une échelle. Il s'avère que pour un nombre pair de chaînes, l'échelle est gappée, tandis que pour un nombre impair le système reste critique [43]. Cet effet, confirmé numériquement [44] et expérimentalement (voir la Section 2.1.4), peut se comprendre de la manière suivante. Si nous prenons une échelle de spin-1/2 dans la limite où le couplage transverse entre les chaînes est dominant, des singulets vont se former dans cette direction. Pour N pair, tous les spins pourront s'apparier, et l'état fondamental sera donc, en bonne approximation, un produit de singulets. La première excitation sera la formation d'un triplet sur un barreau, et le système est donc gappé. Par contre, pour N impair il restera un spin libre, et le système se comportera de manière effective comme une chaîne de spin-1/2. En fait, cette image de couplage fort reste valable dès que les chaînes sont couplées, le gap ne se fermant que pour des chaînes découplées.

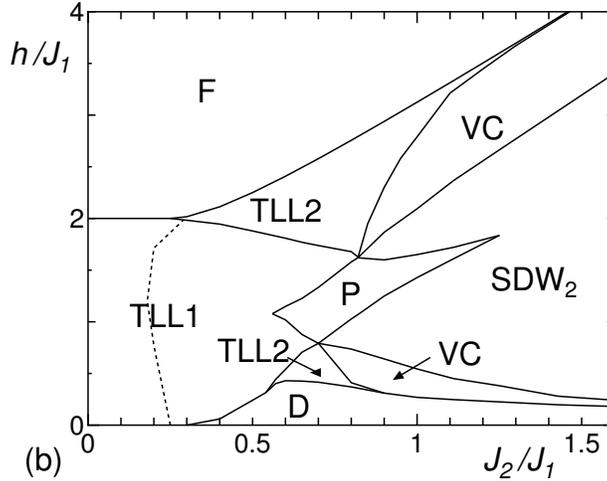


FIGURE I.4 – Diagramme de phases magnétique numérique de la chaîne $J_1 - J_2$. Ce modèle possède une grande diversité de phases, à la fois gappées et *gapless*. En rapport avec la thématique de cette section, nous retiendrons ici la présence d'un plateau d'aimantation (phase P) à $m = 1/6$, de nature classique (voir texte), dans la région $0,6 \lesssim J_2/J_1 \lesssim 1,3$. Figure tirée de la référence [48].

2.1.1 La chaîne $J_1 - J_2$

La chaîne $J_1 - J_2$, ou chaîne zigzag, est l'extension la plus naturelle de la chaîne de Heisenberg. En rajoutant un couplage antiferromagnétique J_2 entre seconds voisins, de la frustration est induite. Historiquement, ce modèle s'est révélé très important puisqu'il possède un état dimérisé exact pour $J_2/J_1 = 1/2$ [45, 46] dans le cas $S = 1/2$. Le diagramme de phases est connu, à la fois pour $h = 0$ [47] et en champ fini [48], et présente un plateau d'aimantation à $m = 1/6$. Le diagramme de phases déterminé numériquement par HIKIHARA *et al.* est présenté sur la Figure I.4. En fait, HEIDRICH-MEISNER *et al.* ont montré [49] que ce plateau apparaît pour les spins $S > 1/2$, ainsi que dans la limite classique. Il brise la symétrie de translation avec la formation d'un état de type *uud* (voir Section 1.3.2), et il s'agit donc d'un plateau de nature classique qui se comprend dans la limite Ising. Outre la présence du plateau, la courbe d'aimantation s'est révélée très riche (sauts d'aimantation, *cusps*, *kinks*...) [49, 50].

Expérimentalement, il existe une grande variété de composés réalisant cette géométrie [51, 52] pour différentes valeurs de spin, avec de plus une grande variété dans les valeurs et les signes des couplages J_1 et J_2 . Une liste, probablement incomplète maintenant, d'une dizaine de matériaux est donnée dans la Table I de la référence [53]. Il se trouve que la plupart des composés ont un rapport J_2/J_1 assez faible, voir négatif, et, en accord avec les prédictions numériques [48], n'ont donc pas de plateau dans leur courbe d'aimantation. En fait, il semble que seul le composé NH_4CuCl_3 en possède. Les résultats obtenus dans la référence [54] sont présentés sur la Figure I.5, et mettent en évidence la présence de plateaux à $m = 1/8$ et $m = 3/8$. Les auteurs de la publication ont noté que pour concilier ces valeurs avec le critère OYA (I.12), il est nécessaire de prendre un état fondamental avec $n = 8$ spins dans la cellule unité. Ils ont également remarqué qu'aucune anisotropie n'est présente [54, 55]. Selon eux, cela signale qu'il ne s'agit pas d'un plateau classique qui pourrait se comprendre dans une limite anisotrope, mais bien d'un plateau quantique. De plus, le composé est légèrement différent de la chaîne $J_1 - J_2$, avec la présence de deux types de liens diagonaux J_2 et J_3 . Le composé serait donc une chaîne zigzag avec liens alternés, modèle étudié dans la référence [37], mais qui montre cependant un

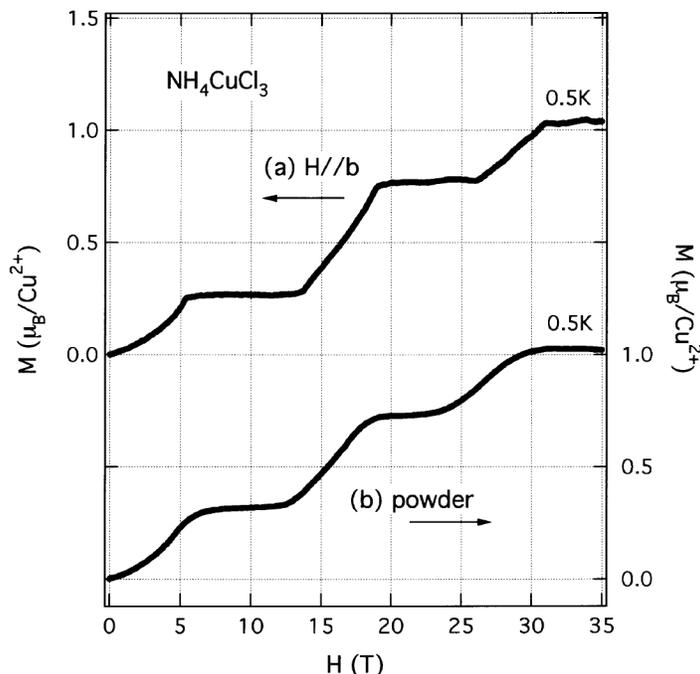


FIGURE I.5 – Mesures de courbes d’aimantation pour le composé zigzag NH_4CuCl_3 . Le fait que les champs critiques soient les mêmes pour un unique cristal (en haut) que pour une poudre indique l’absence d’anisotropie de spin. Figure tirée de la référence [54].

plateau à $m = 1/4$. Motivé par des résultats expérimentaux sur des composés proches de NH_4CuCl_3 , MATSUMOTO a proposé un modèle avec trois sous-réseaux faiblement couplés, pour lequel les deux plateaux émergent naturellement [56]. Il a également prédit une forte dépendance des plateaux avec la pression externe.

2.1.2 Chaînes avec liens alternés

Si la chaîne de Heisenberg $S = 1$ ne possède pas de plateau à aimantation finie (il y en a, bien sûr, un à $m = 0$ puisque la phase de Haldane est gappée), une possibilité pour en induire un est de briser explicitement la symétrie de translation en introduisant une modulation sur les liens. Il y a alors deux types de liens entre premiers voisins, d’amplitudes $J \pm \delta$. Le modèle est gappé¹ pour tout δ : pour des petites valeurs il y a la phase de Haldane, tandis que si δ dépasse une certaine valeur critique (évaluée numériquement à 0,25 [57]) il y a une dimérisation et un état fondamental deux fois dégénéré [58]. En présence d’un champ magnétique, il a été montré qu’un plateau à $m = 1/4$ apparaît tant que la modulation est dans la gamme $0 \lesssim \delta \lesssim 1$ [59], ce qui vérifie bien le critère OYA pour $n = 2$ (modèle explicitement dimérisé). Ce modèle est très bien réalisé par le composé $[\text{Ni}_2(\text{Medpt})_2(\mu - \text{ox})(\mu - \text{N}_3)]\text{ClO}_4$, pour lequel les mesures en champ de NARUMI *et al.* ont mis en évidence le plateau $m = 1/4$ (voir Figure I.6) [60]. Ils ont de plus déterminé la valeur de δ , de l’ordre de 0,5, ce qui place le composé dans la phase dimérisée en champ nul.

Une extension de la chaîne zigzag est d’introduire une modulation dans les liens entre premiers voisins, de manière à briser explicitement la translation (structure qui peut être alternativement vue

1. à l’exception de deux points critiques pour un spin 1, ou $2S$ points dans le cas général d’un spin- S .

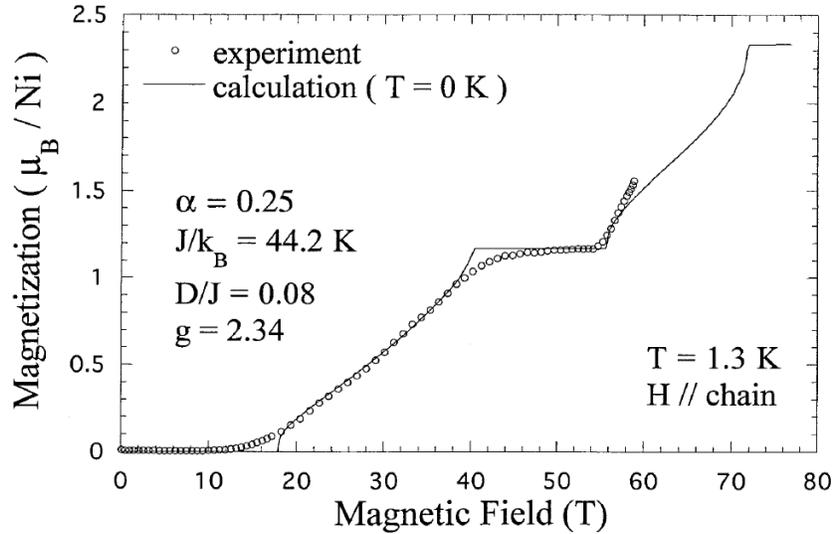


FIGURE I.6 – Mesures de la courbe d’aimantation pour le composé de chaîne avec liens alternés $[\text{Ni}_2(\text{Medpt})_2(\mu - \text{ox})(\mu - \text{N}_3)]\text{ClO}_4$. Un plateau est visible pour $m = 1/4$, ou $1/2$ de la saturation, en bon accord avec la théorie. En champ nul, le composé est dans la phase dimérisée. Figure tirée de la référence [60].

comme celle d’une échelle). Ce modèle a été étudié notamment en lien avec sa réalisation dans le composé de spin-1/2 CuGeO_3 [61]. Plusieurs mesures expérimentales (susceptibilité magnétique, diffusion et diffraction de neutrons) ont montré que ce dernier possède un gap de spin, dû à une transition spin-Peierls lorsque la température est abaissée [62, 63]. Les résultats théoriques se sont révélés en bon accord avec les expériences [61]. Mentionnons également le composé $\text{Cu}_2(1,4 - \text{diazacycloheptane})_2\text{Cl}_4$, qui, lui aussi, présente un plateau à $m = 0$ (uniquement) et a la même structure [64, 65].

2.1.3 La chaîne diamant déformée

Un autre exemple théoriquement intéressant est celui de la chaîne diamant, pour laquelle existent des résultats exacts en champ nul [66]. Il ne semble cependant pas y avoir de composé pouvant être décrit par cette chaîne, à part peut-être $\text{Cu}_3(\text{TeO}_3)_2\text{Br}_2$ [67]. Nous allons ici plutôt nous intéresser au cas de la chaîne diamant *déformée*, dont la structure trimérisée et les trois interactions différentes sont représentées sur la Figure I.7. Cette chaîne possède une réalisation expérimentale très intéressante avec l’azurite $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$. De très nombreux travaux ont ainsi été consacrés à la chaîne diamant déformée au cours des 15 dernières années, avec pour objectif de déterminer précisément les valeurs des couplages dans ce matériau et de comprendre ses propriétés magnétiques. Historiquement, l’intérêt pour la chaîne diamant déformée est venue du composé $\text{Cu}_3\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 2\text{H}_8\text{C}_4\text{SO}_2$, qui a été identifié au début, à tort, comme ayant cette géométrie. Cela a créé un intérêt pour le processus d’aimantation de ce modèle [68, 69].

Par la suite, les travaux initiaux sur l’azurite $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ ont de nouveau suscité un grand intérêt pour ce composé et sa modélisation théorique, avec de nombreux travaux expérimentaux [71, 70, 72, 73] et théoriques (voir par exemple la publication la plus récente [74] et les références qu’elle contient). De nombreux types de mesures ont été réalisés : chaleur spécifique, susceptibilité magnétique, aimantation, résonance magnétique nucléaire, diffusion inélastique de neutron... En particulier, le

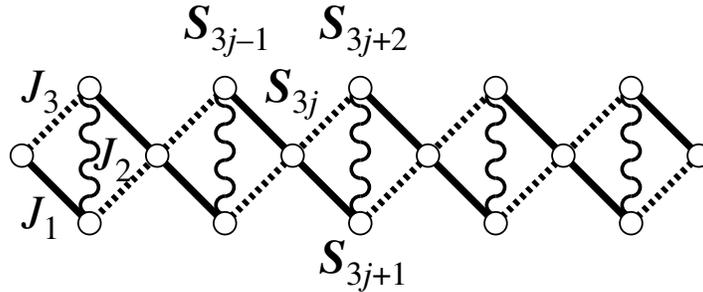


FIGURE I.7 – Structure géométrique de la chaîne diamant déformée. Pour la chaîne de diamant régulière, $J_1 = J_3$. Figure tirée de la référence [69].

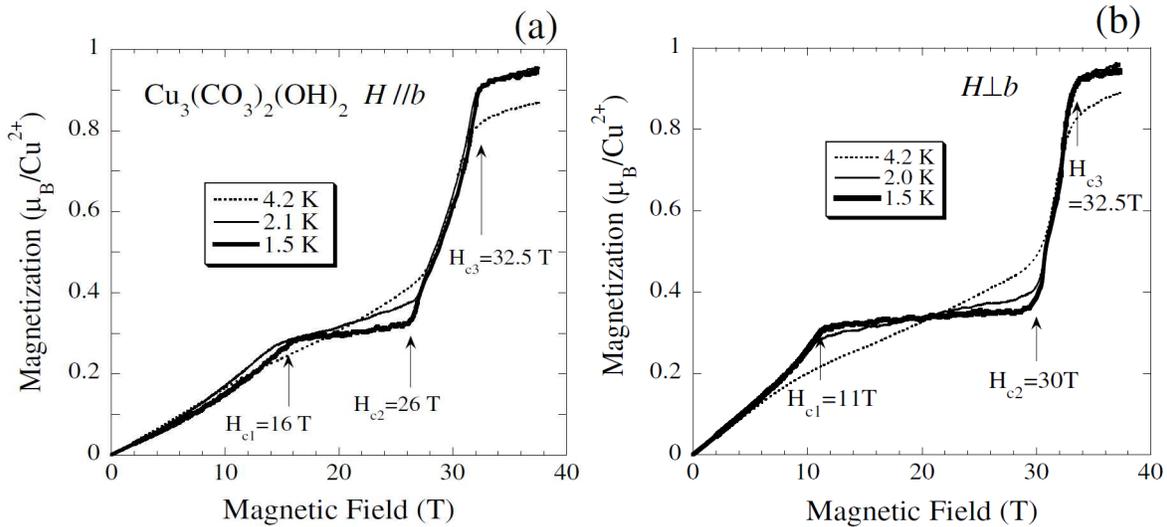


FIGURE I.8 – Courbe d'aimantation à basse température du composé azurite $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$. A gauche a), le champ magnétique est appliqué le long de l'axe cristallographique b , qui correspond à la direction de la chaîne. A droite b), le champ magnétique est perpendiculaire à l'axe b . Le changement de taille du plateau selon l'orientation du champ suggère la présence d'une interaction de Dzyaloshinsky-Moriya. Le plateau d'aimantation à un tiers de la saturation est clairement visible dans les deux cas. Figure tirée de la référence [70].

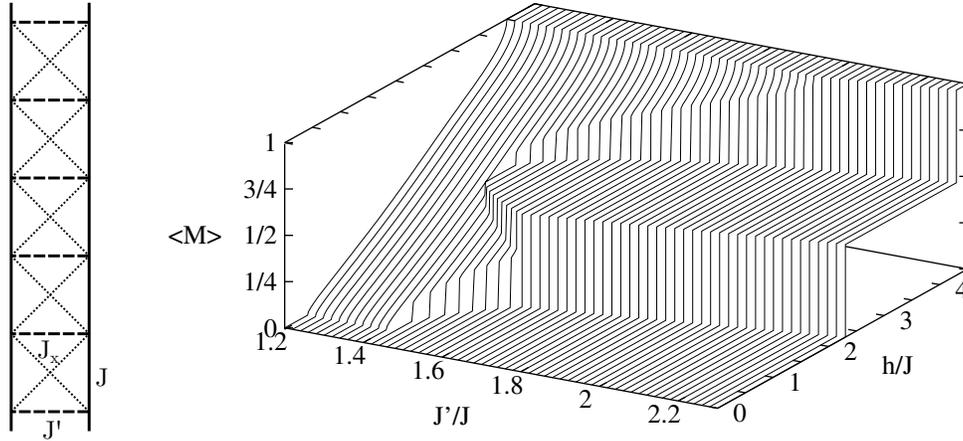


FIGURE I.9 – À gauche, représentation de l'échelle frustrée à deux montants. À droite, profils d'aimantation en fonction de J'/J , et une frustration fixée à $J_x = J$. Nous pouvons remarquer la présence du gap de spin, dû à la formation de singulets sur les barreaux, dans toute la gamme de paramètres, ainsi que d'un plateau à $m = 1/4$ (ou $m/m_{sat} = 1/2$) lorsque J'/J est assez grand. Ce plateau est absent si l'échelle n'est pas frustrée. Figure tirée de la référence [75].

composé présente un large plateau d'aimantation à un tiers de la saturation (voir Figure I.8), dont l'état est supposé être constitué de monomères $S = 1/2$ séparés par des dimères [71, 72]. Cependant, des mesures récentes de dynamique suggèrent que le simple modèle de la chaîne diamant déformée n'est en réalité pas suffisant pour comprendre les résultats [73], et un modèle de chaîne généralisé a été proposé [74]. De plus, la forte anisotropie révélée par les courbes d'aimantation pourrait nécessiter de prendre en compte une interaction de Dzyaloshinsky-Moriya [70].

2.1.4 Echelles de spins

À titre d'exemple théorique, nous rapportons les résultats pour le cas de l'échelle à deux montants. Comme nous l'avons déjà dit, cette échelle est non frustrée et, à part pour le gap de spins, cela se traduit par l'absence de plateau d'aimantation. Cependant, en rajoutant une interaction diagonale frustrante J_x (Figure I.9, à gauche), il est possible d'ouvrir un plateau à $m = 1/4$ [75, 76] (Figure I.9, à droite). L'état correspondant est donné par une alternance entre triplets polarisés et singulets sur les barreaux, et brise ainsi la symétrie de translation. Le diagramme de phases se comprend en perturbation avec un modèle effectif de chaîne XXZ sous champ [76]. La valeur du plateau est compatible avec le critère OYA.

Pour les échelles, de très nombreux composés sont disponibles, et le lecteur pourra par exemple consulter la (plutôt vieille) référence [78]. Ici nous rapporterons l'exemple que nous considérons être le plus instructif, à savoir celui de la famille d'échelles de spin-1/2 à montants donnés par les composés $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$, avec $n = 3, 5, 7$ correspondant respectivement à 2, 3 et 4 chaînes. En étudiant expérimentalement les susceptibilités magnétiques des cas $n = 3, 5$, AZUMA *et al.* ont pu mettre en évidence l'effet de parité du nombre de chaînes, le premier cas étant gappé tandis que le second non [77, 79], en accord avec ce que nous avons dit au début de cette section.

Pour conclure ce panorama forcément incomplet et illustrer la richesse de la physique sous champ dans les systèmes unidimensionnels, de nombreux effets plus exotiques ont été étudiés théoriquement. Par exemple, l'influence de l'interaction entre phonons et la frustration, possiblement pertinente ex-

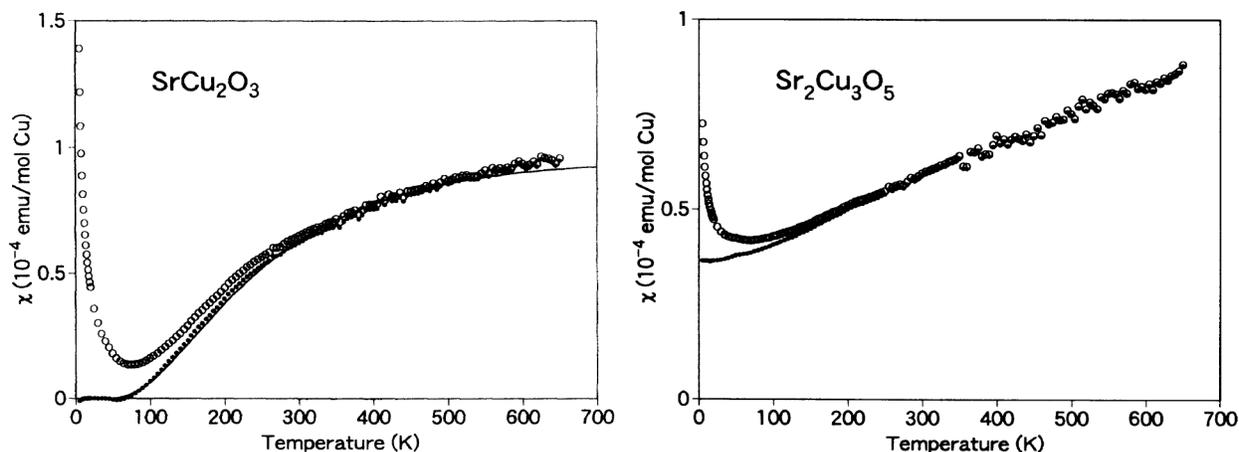


FIGURE I.10 – Mesures de la dépendance en température de la susceptibilité magnétique des composés SrCu_2O_3 (échelle à deux montants, à gauche) et $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ (échelle à trois montants, à droite). Les cercles vides représentent les résultats bruts, tandis que pour les cercles pleins la composante de Curie a été soustraite. La large susceptibilité survivant à gauche mais pas à droite permet de déduire la présence d'un gap, et ainsi de vérifier l'effet de la parité du nombre de chaînes dans les échelles. Figure tirée de la référence [77].

périmentalement, sur la chaîne zigzag, qui stabilise le plateau pour de plus petites valeurs de J_2/J_1 et peut induire de nouveaux plateaux à des aimantations non triviales [80]. Ou encore, l'étude sur un modèle étendu de chaîne zigzag de la compétition entre le plateau classique uud bien connu et un plateau quantique où se forment des dimères [81]. Expérimentalement, l'échelle $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ a un diagramme de phases complexe, où des couplages 3D pourraient jouer un rôle [82].

2.2 Systèmes bidimensionnels

2.2.1 Réseau carré

De la même manière que la chaîne de Heisenberg, quelle que soit la valeur de S , ne présente pas de plateau d'aimantation, le modèle de Heisenberg sur le réseau carré non plus [32, 33]. Lorsque le couplage antiferromagnétique J_2 est ajouté, un plateau $m = 1/4$ apparaît dans une certaine gamme de J_2/J_1 [83], illustrant encore une fois le lien entre frustration et occurrence d'un plateau. Ce dernier s'explique classiquement par la formation d'un état $uuud$. Au niveau expérimental, il existe plusieurs composés pouvant être représentés par le modèle $J_1 - J_2$. Un exemple, où les deux couplages sont antiferromagnétiques, est $\text{Li}_2\text{VOSiO}_4$ [84]. Les valeurs des couplages ont cependant été évaluées à $J_1 \simeq J_2$, et, en accord avec la théorie, aucun plateau n'est présent et le composé se trouve dans une phase colinéaire [85]. Plusieurs autres composés ayant un couplage J_1 ferromagnétique, et donc toujours frustrés, ont été identifiés, sans toutefois avoir des plateaux d'aimantation. Une liste de ces composés ainsi que des valeurs de leurs couplages est donnée dans la Table I de la référence [86].

Pour trouver un plateau d'aimantation, il faut étudier le composé $(\text{CuBr})\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$. Des mesures sous champ ont en effet révélé qu'il possède un plateau à la surprenante valeur $m = 1/6$ [87] (voir Figure I.11), différent du $m = 1/4$ attendu théoriquement. D'après le critère OYA pris pour un système $2D$, il est donc nécessaire d'avoir une brisure de la symétrie de translation afin d'obtenir la valeur $n = 3$ requise. En fait, toute une famille de composés similaires se comporte de la même

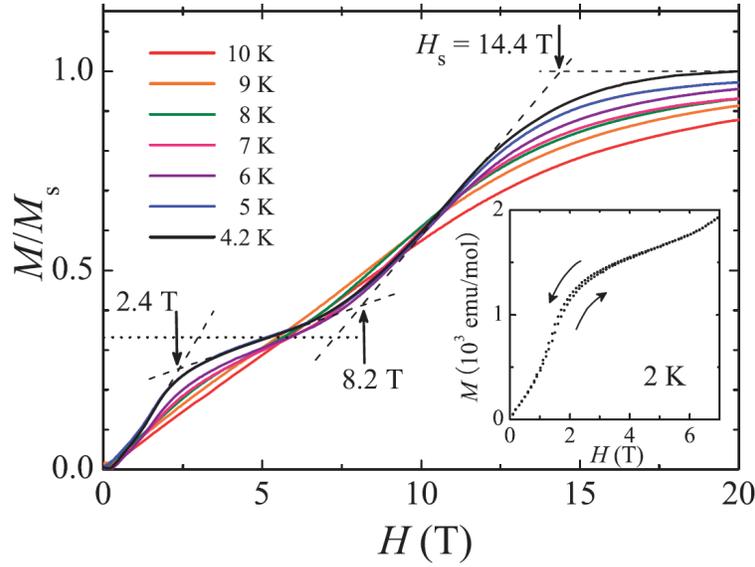


FIGURE I.11 – Courbes d’aimantation pour plusieurs températures mesurées en champ pulsé pour le composé de spin-1/2 $(\text{CuBr})\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$. Pour les plus basses températures, un plateau est visible pour $m/m_{\text{sat}} = 1/3$. Le fait que le plateau soit oblique est expliqué par le fait que le composé est une poudre, ainsi que par le possible rôle d’une interaction Dzyaloshinsky-Moriya. Figure tirée de la référence [87].

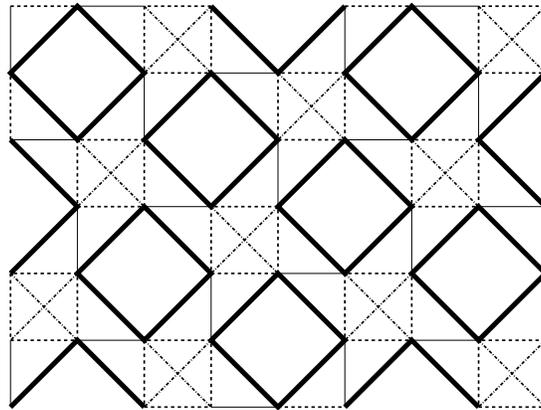


FIGURE I.12 – Structure géométrique du réseau carré dépeuplé, où un site sur cinq est manquant par rapport au réseau carré. Pour le composé CaV_4O_9 , les couplages en traits pleins dominent ceux en pointillés (il y a environ un facteur deux [88]). L’état fondamental en champ nul se comprend alors par la formation d’un singulet sur les plaquettes carrées en traits pleins, ce qui explique la présence d’un gap de spin. Figure tirée de la référence [89].

façon [90]. Plusieurs explications à cette intrigante valeur ont été proposées, comme par exemple la possibilité d'une transition structurelle [90], ou encore l'effet d'un couplage additionnel J_3 , qui peut théoriquement ouvrir un plateau [91]. Finalement, de très récents résultats proposent que la valeur $m = 1/6$ est en fait *accidentelle*, et résulte d'une compétition entre une phase ferromagnétique et une phase antiferromagnétique [92].

Historiquement, le composé CaV_4O_9 a joué un rôle marquant puisqu'il s'agit du premier exemple expérimental de système bidimensionnel gappé en champ nul. Grâce à des mesures de susceptibilité magnétique, il est apparu que l'état fondamental est invariant par rotation, un singulet, avec un gap de l'ordre de 100 K [93]. Ce comportement peut cependant s'expliquer de manière simple, puisque le réseau sous-jacent n'est pas exactement le réseau carré mais plutôt le réseau carré *dépeuplé*, où un site sur cinq est manquant. Il y a deux types de couplages, entre premiers et encore seconds voisins. Ce dernier étant largement dominant, le composé peut se modéliser par un ensemble de plaquettes à quatre sites qui sont faiblement couplées [88]. L'état fondamental est alors donné par un unique état singulet $S = 0$ sur chaque plaquette. Un tel état trivial n'est au final pas très intéressant puisque de cette façon, un gap s'ouvre mais l'état ne brise aucune symétrie du réseau, et est adiabatiquement connecté aux plaquettes découplées. Le processus d'aimantation se comprend en étudiant une seule plaquette. Théoriquement, il a été prédit que pour le composé un plateau à $m = 1/4$ devrait également être présent [88], mais les champs magnétiques prédits, de l'ordre de 300 T, sont malheureusement beaucoup trop élevés et il n'y a donc pas d'expérience le confirmant.

2.2.2 Réseau triangulaire

Le réseau triangulaire est un exemple très intéressant déjà classiquement car il permet de mettre en évidence la stabilisation d'un plateau par la température. En effet, pour un modèle de Heisenberg la courbe d'aimantation est complètement linéaire depuis $h = 0$ jusqu'au champ de saturation. Le processus d'aimantation est représenté sur la Figure I.13. A $T = 0$, la configuration colinéaire pouvant donner lieu à un plateau n'est la configuration de basse énergie que au point $h = h_{sat}/3$. Une température finie va alors stabiliser cette configuration pour un intervalle fini de champ magnétique, ouvrant ainsi un plateau² $m = 1/6$ [94]. La raison de cette sélection est la plus grande symétrie de l'état colinéaire par rapport aux autres configurations. Les fluctuations quantiques vont jouer le même rôle de sélection de l'état *uud* trois fois dégénéré, et le plateau se retrouve dans le modèle de spin-1/2, comme cela a été montré avec des calculs de *spin waves* [95]. Il faut noter qu'un diagramme de phases numérique complet, prenant en compte une anisotropie de spin, a été obtenu récemment [96].

Ce plateau a été observé expérimentalement dans le composé de spin-1/2 Cs_2CuBr_4 [97, 98], comme le montre la Figure I.14. Les mesures de diffusion de neutrons ont confirmé la structure *uud* de l'état. D'autres mesures, ainsi que des analyses théoriques [99], ont également démontré que la stabilisation du plateau est faite par les fluctuations quantiques et non pas thermiques, utilisant notamment le fait que le plateau survit bien en dessous de la température à laquelle l'ordre magnétique apparaît [97, 100]. En accord avec la nature *uud* de l'état, le processus d'aimantation est le même pour un champ appliqué dans deux directions différentes, indiquant que les configurations de spin dans ces deux directions doivent être les mêmes. La transition vers le plateau est clairement identifiée comme étant du premier ordre grâce à la mesure du vecteur d'onde de l'ordre magnétique, qui subit une discontinuité à l'entrée dans le plateau [100].

Récemment, la courbe d'aimantation a été obtenue pour le composé de spin-1/2 $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ [101].

2. Pour le modèle isotrope, il s'agit en fait d'un pseudoplateau, la susceptibilité magnétique ne s'annulant pas complètement. Lorsqu'une anisotropie Ising est présente cela donne par contre un vrai plateau.

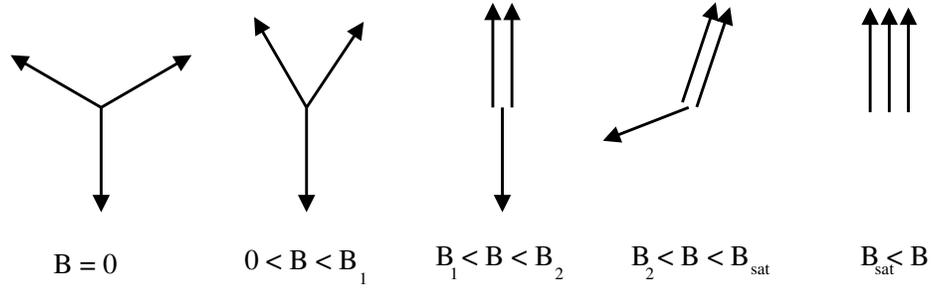


FIGURE I.13 – Processus d’aimantation d’un unique triangle de champ nul jusqu’à la saturation. La configuration colinéaire *uud* entre B_1 et B_2 est responsable du plateau existant dans le modèle classique comme dans le modèle quantique. A température nulle ou sans fluctuations quantiques cependant, cette configuration n’existe que pour une seule valeur du champ $B = B_{\text{sat}}/3$ et le plateau disparaît. Figure tirée de la référence [31].

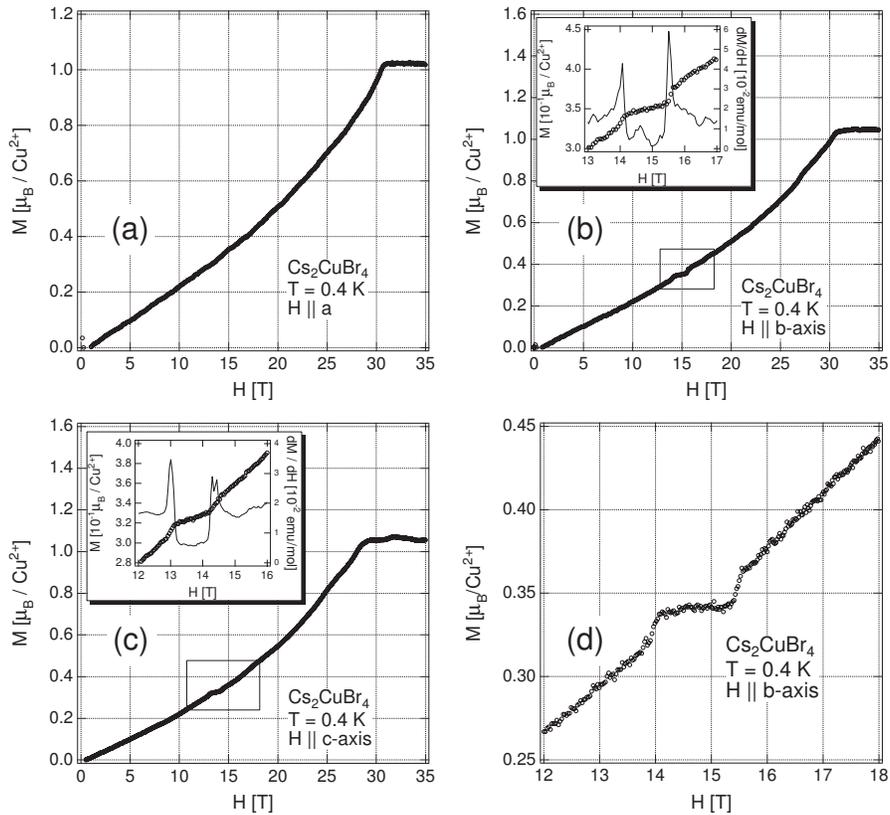


FIGURE I.14 – Courbes d’aimantation obtenues pour le composé Cs_2CuBr_4 à basse température, bien en dessous de la température d’ordonnement magnétique $T_N = 1,4 \text{ K}$. Les panneaux a), b) et c) correspondent chacun à un champ magnétique aligné le long d’un des axes cristallographiques. Les fenêtres secondaires montrent la dérivée dm/dh . Le panneau d) donne des mesures plus finement résolues en champ pour le cas $h \parallel b$. Figure tirée de la référence [97].

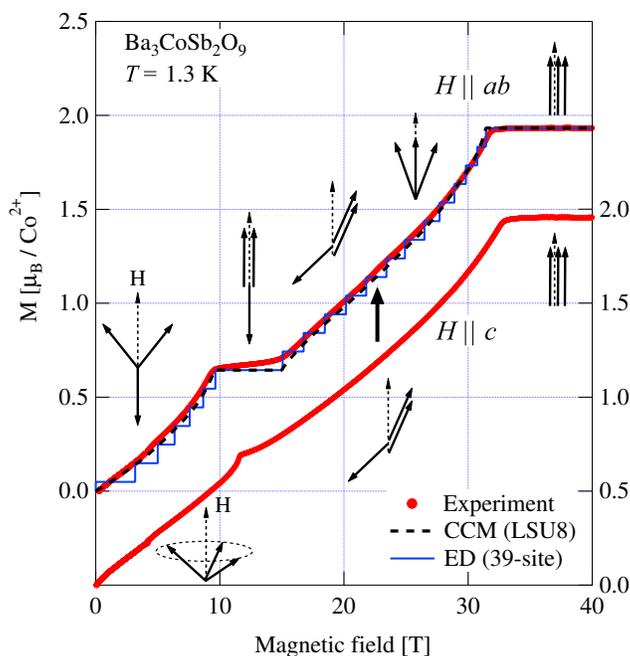


FIGURE I.15 – Courbes d'aimantation obtenues pour le composé $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$ pour des champs magnétiques parallèle au plan ab (en haut) et parallèle à l'axe cristallographique c (en bas). Un plateau d'aimantation à $m = 1/6$ est visible dans le premier cas, tandis que pour le second il reste seulement une inflexion dans la courbe. Les structures des différents états le long du processus d'aimantation sont illustrées. Les courbes en pointillés bleus et en trait noir continu sont des résultats numériques. Figure tirée de la référence [101].

Pour un champ magnétique appliqué parallèlement à deux des axes cristallographiques, un plateau est visible sur la Figure I.15 pour $m = 1/6$. Là encore, la configuration des spins est identifiée comme étant de type uud . Dans la troisième direction, seule une petite discontinuité survit, qui a été expliquée en termes d'une anisotropie planaire, ainsi que par un effet des fluctuations quantiques [101]. La courbe d'aimantation pourrait se révéler plus riche car une petite anomalie dans la dérivée dm/dh pour $m = 3/10$ est interprétée comme une transition de phase quantique. Plus précisément, cela suggérerait que la quatrième configuration de la Figure I.13 ne serait en fait pas stable jusqu'à saturation, et une solution coplanaire plus symétrique est envisagée. Des mesures de résonance magnétique devraient permettre de confirmer ou infirmer ce scénario.

2.2.3 Réseau Shastry-Sutherland

Pour terminer ce tour d'horizon des systèmes bidimensionnels, nous allons brièvement évoquer le composé $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. Depuis la découverte en 1999 de plateaux à $m = 1/8$ et $m = 1/16$ par KAGEYAMA *et al.* [104], ce composé a généré un intérêt considérable et une vaste littérature, à la fois théorique et expérimentale, existe aujourd'hui (voir par exemple [105, 106] et les références qu'elles contiennent). Après ces mesures initiales, les progrès dans la génération de champs magnétiques plus intenses ont permis de mettre en évidence des plateaux supplémentaires à $m = 1/6$ [102]. Nous montrons sur la Figure I.16 une courbe d'aimantation contenant ces trois plateaux. Il faut ajouter que très récemment, des mesures allant jusqu'à 118 T ont dévoilé la totalité du plateau $m = 1/2$, prédit

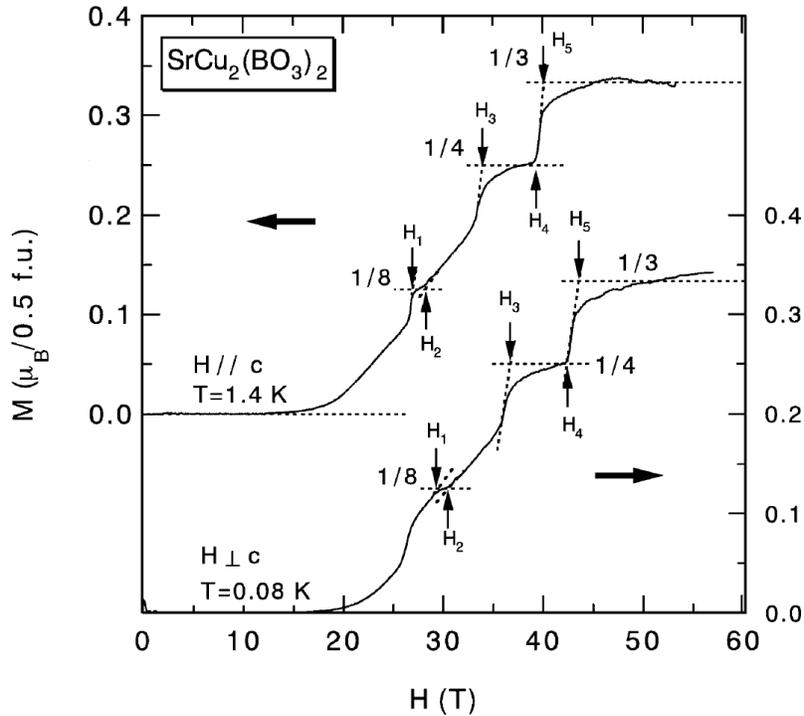


FIGURE I.16 – Courbes d’aimantation mesurées pour le composé $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ pour un champ magnétique parallèle (en haut) et perpendiculaire (en bas) à l’axe c , qui est transverse au plan formant le réseau de Shastry-Sutherland. Trois plateaux sont visibles, respectivement à $m/m_{\text{sat}} = 1/8, 1/4, 1/3$. Un large gap de spin est également présent. Figure tirée de la référence [102].

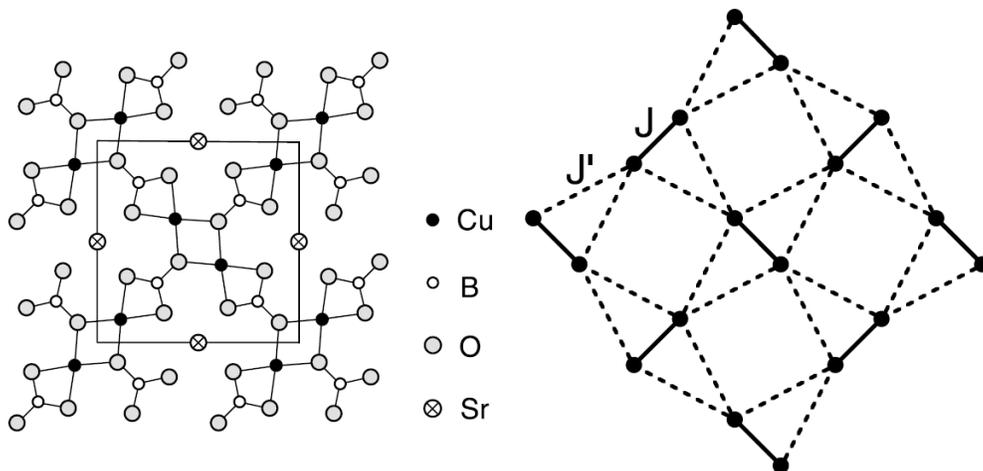


FIGURE I.17 – A gauche, structure schématique de $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ le long de l’axe cristallographique c . Le carré indique la projection d’une cellule unité sur le plan ab . A droite, la modélisation du réseau formé par les ions Cu^{2+} en réseau de Shastry-Sutherland, avec le couplage intra-dimère J et le couplage inter-dimère J' . Figure tirée de la référence [103].

théoriquement mais non observé complètement jusqu'à présent [106]. D'autres plateaux ont aussi été trouvés à des aimantations plus exotiques, bien que leur existence soit parfois sujette à controverse. A ces nombreuses mesures d'aimantation il faut ajouter d'autres types de mesures comme celles de résonance magnétique, avec pour objectif de comprendre plus en détail la structure des états sur les plateaux. Par exemple, pour le plateau $m = 1/16$ la maille élémentaire contient 16 spins [103] (ce qui est compatible avec le critère OYA).

Sur le plan théorique, les ions Cu^{2+} forment un réseau de Shastry-Sutherland, comme représenté sur la Figure I.17, qui peut se visualiser comme un réseau de dimères couplés. Le rapport J'/J des couplages a été évalué expérimentalement à environ 0,65, ce qui place le composé dans une phase où l'état fondamental est exact et donné par un produit de singulets sur les liens J [107]. Cela explique le gap de spin visible sur la Figure I.16. En ce qui concerne les plateaux, de très nombreux travaux théoriques ont été poursuivis pour comprendre les résultats expérimentaux. Le lecteur pourra par exemple consulter la revue [107] ainsi que les références à l'intérieur. Nous ne rentrerons pas ici dans les détails, mais allons essayer de poser la problématique de l'approche théorique du composé. En champ nul, le système est un produit de singulets principalement décorrélés. L'effet du champ magnétique va bien sûr être de polariser ces singulets en des triplets, qui sont alors vus comme des bosons (avec répulsion infinie sur un même site). Toute la question va ensuite être de savoir si ces bosons vont pouvoir être délocalisés (phase superfluide), auquel cas le système est *gapless* et il n'y a pas de plateau. Dans le cas inverse, ils vont former un isolant de Mott, et cela donnera lieu à un plateau d'aimantation à une valeur correspondant au remplissage de cet isolant [105]. Cette image physique, qui pourrait avoir l'air simple, est en fait fortement compliquée par la présence de frustration, qui joue un rôle important de réduction des paramètres de saut des bosons (triplets) (en plus d'autres complications résultant par exemple de la présence d'un terme de Dzyaloshinsky-Moriya). De très nombreuses approches numériques et analytiques ont été effectuées, prédisant parfois certains plateaux mais pas d'autres. Pour conclure, de récents résultats numériques montrent que le composé serait en fait toujours dans une phase brisant la symétrie de translation, avec des solides (dans l'image des bosons) sur les plateaux et des phases supersolides entre eux [106].

3 Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons présenté les idées et concepts qui constituent le cœur de l'étude des systèmes magnétiques quantiques, en mettant l'accent sur les cas de basse dimension. Les fluctuations quantiques peuvent modifier drastiquement le comportement d'un modèle bien compris classiquement. Nous avons donné des éléments spécifiques au monde quantique, tandis que d'autres, comme les plateaux d'aimantation, se retrouvent également classiquement. Pour ces derniers, nous avons passé en revue un certain nombre de systèmes expérimentaux dans lesquels ils apparaissent. Si la physique des plateaux est déjà un vaste sujet, nous avons essayé d'attirer ponctuellement l'attention sur des points différents, mais tout aussi intéressants, qui peuvent survenir expérimentalement dans les processus d'aimantation. Il est apparu que si les expériences peuvent souvent être comprises dans leur ensemble grâce à des modèles bien connus, expliquer dans le détail les différents résultats peut nécessiter d'aller au-delà des modèles théoriques les plus simples.

Chapitre II

Tubes de spin triangulaires

Dans le Chapitre I précédent nous avons présenté les différents systèmes de spins quantiques unidimensionnels ou quasi unidimensionnels, à savoir les chaînes et échelles de spins. À côté de ces modèles, qui présentent une grande variété de phases très intéressantes, un troisième type de modèles que nous n'avons pas mentionné jusqu'à présent est celui des tubes de spins. La physique des échelles de spins, déjà très riche, est en fait changée lorsque des conditions périodiques sont appliquées dans la direction transverse, formant ainsi un « tube de spins ». Deux familles sont alors à distinguer, avec là encore un effet de parité sur le nombre N de chaînes couplées. Bien qu'un gap de spin s'ouvre dans les deux cas, la physique de ces deux familles est en fait différente. Lorsque N est pair, il est facile de voir que pour les modèles les plus simples de type Heisenberg, sans couplages en compétition, il n'y a pas de frustration et l'état de Néel est attendu comme étant l'état fondamental classique. L'ordre de Néel est bien sûr détruit par les fluctuations quantiques. Mais même dans ce cas, la présence d'un gap se comprend aisément, en partant de la limite où le couplage inter-chaînes domine, par la formation de $N/2$ singulets dans la direction transverse. Dans le cas où N est impair, classiquement l'état de Néel n'est plus l'état fondamental à cause de la frustration, et constitue déjà un problème intéressant. Lorsque nous travaillons avec des spins quantiques, cela ouvre la voie à l'apparition de phases exotiques visant à réduire la frustration. Pour les modèles les plus simples, le gap de spin s'explique là aussi par la formation de singulets, mais dans les deux directions transverse *et* longitudinale à la fois à cause de la frustration. Bien entendu, pour N pair l'ajout d'interactions frustrantes ou de couplages plus compliqués (à quatre spins par exemple) présente également un grand intérêt. La présence d'un champ magnétique externe va aussi participer à l'émergence de phases nouvelles, en particulier lorsque des plateaux d'aimantation sont présents.

Dans ce chapitre, nous allons étudier successivement deux modèles de tubes de spins avec $N = 3$, c'est-à-dire des tubes de spins triangulaires. Bien que nous travaillerons uniquement avec des couplages de Heisenberg et un champ magnétique, afin d'étudier les plateaux d'aimantation qui apparaissent, nous verrons que ces modèles « simples » présentent déjà un grand intérêt. En effet, si, comme dit au-dessus, un gap de spin existe en champ nul et que plus généralement les excitations de spins sont par définition gappées sur les plateaux d'aimantation, nous verrons que d'autres types d'excitations non magnétiques existent. Etant dans une certaine mesure découplées l'une de l'autre, ces dernières peuvent alors subir des transitions de phases quantiques tandis que l'aimantation reste fixée. Pour nos deux modèles de tubes triangulaires, nous verrons qu'un degré de liberté dit de chiralité émerge à basse énergie sur certains plateaux (et en dehors aussi, mais nous n'aborderons pas ce point de manière détaillée). Nous montrerons que, lorsque les paramètres des Hamiltoniens sont changés, jusqu'à trois phases différentes peuvent se succéder sur un plateau, certaines étant gappées et d'autres non.

Pour cela, nous suivrons pour chaque modèle le plan suivant. Dans un premier temps, nous appliquerons une méthode d'intégrale de chemin, valide dans la limite des grands S , qui prend en compte avec soin les effets de la phase de Berry qui apparaît dans la fonction de partition. Cela permettra de retrouver une condition sur les aimantations pour lesquelles des plateaux sont attendus, et qui coïncide avec le critère OYA que nous avons présenté dans le Chapitre I. Nous verrons également comment les modes non magnétiques émergent dans cette description en proposant une action phénoménologique. Par la suite, nous utiliserons une autre approche, purement quantique cette fois, pour étudier le modèle dans la limite de couplage fort où le couplage entre les chaînes domine par rapport au terme de couplage le long des chaînes. Nous nous restreindrons alors au cas des spins demi-entiers, et retrouverons l'importance des excitations non magnétiques de chiralité, que nous décrirons par des modèles effectifs de spin-1/2 sur certains plateaux d'aimantation. Des calculs très simples permettront d'obtenir des prédictions quantitatives qui s'avéreront particulièrement précises. Grâce à ces deux méthodes complémentaires, nous pourrons ainsi mettre en évidence le riche comportement de ce mode de chiralité. Puis pour terminer nous donnerons des résultats numériques, à chaque fois pour $S = 3/2$, et proposerons un diagramme de phases à partir de mesures d'aimantations locales et d'entropies d'intrication.

1 Présentation des modèles

Nous allons maintenant introduire les deux modèles étudiés au cours de ce chapitre, qui sont similaires mais auront cependant des diagrammes de phase quelque peu différents. Le second modèle s'avère de plus être pertinent d'un point de vue expérimental.

1.1 Tube triangulaire simple

Nous nous intéresserons dans un premier temps au modèle le plus simple de tube de spins triangulaires. Nous prenons trois chaînes de spins quantiques et chaque spin à la position j est couplé aux spins à la même position j des deux autres chaînes (voir la Figure II.1). Les interactions sont toutes de type Heisenberg. Par la suite nous appellerons ce modèle le tube de spin « simple » et son Hamiltonien s'écrit

$$\begin{aligned} H &= J_{\perp} \sum_j \sum_{\alpha=1,2,3} \vec{S}_{\alpha,j} \cdot \vec{S}_{\alpha+1,j} + J_{\parallel} \sum_j \sum_{\alpha=1,2,3} \vec{S}_{\alpha,j} \cdot \vec{S}_{\alpha,j+1} - h \sum_j \sum_{\alpha=1,2,3} S_{\alpha,j}^z \\ &= H_{\perp} + H_{\parallel} + H_h, \end{aligned} \quad (\text{II.1})$$

où $\vec{S}_{\alpha,j}$ est l'opérateur de spin- S , $J_{\parallel} > 0$ le couplage antiferromagnétique le long des chaînes (couplage longitudinal), $J_{\perp} > 0$ le couplage antiferromagnétique le long des triangles (couplage transverse) et h le champ magnétique le long de l'axe z . L'indice $\alpha = 1, 2, 3, 4 \equiv 1$ numérote la chaîne et $j = 1, \dots, L$ la position du spin le long d'une chaîne. Comme dit précédemment, le fait d'appliquer des conditions périodiques crée de la frustration géométrique, l'échelle à trois chaînes n'étant bien sûr pas frustrée. Ce modèle constitue le prototype du tube de spins frustré.

Ce modèle a été étudié dans plusieurs publications, notamment en champ nul. En utilisant une approche par la bosonisation pour le cas $S = 1/2$, Schulz a montré que la frustration, contrairement au cas de l'échelle, ouvre un gap de spin [108]. Cela a été confirmé très rapidement par des simulations numériques de *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG), et l'image physique proposée est la brisure de la symétrie de translation à cause de la dimérisation de l'état fondamental, qui est alors deux fois dégénéré. En particulier, une modification du modèle (II.1) a permis d'obtenir un état fondamental

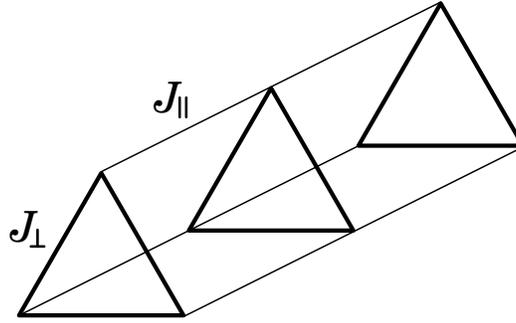


FIGURE II.1 – Structure géométrique du tube de spin simple. Les couplages J_{\perp} et J_{\parallel} sont antiferromagnétiques.

dimérisé exact, l'extension de cette phase incluant le cas du tube simple [109]. Physiquement, cette dimérisation est nécessaire pour réduire la frustration et est présente pour toutes les couplages J_{\parallel}/J_{\perp} . Comme nous l'avons dit précédemment, pour des tubes pairs l'état fondamental est dimérisé, mais il est important de noter que la dimérisation se fait alors le long des couplages transverses, tandis qu'ici la frustration conduit à la formation des dimères aussi le long des couplages longitudinaux [109]. Cette différence se manifeste par dépendance du gap en J_{\parallel} pour les tubes impairs et en J_{\perp} pour les tubes pairs. Un problème intéressant est celui du cas où un des couplages J_{\perp} est modifié à une valeur λJ_{\perp} , rendant ainsi le tube asymétrique. La limite $\lambda = 0$ correspond à l'échelle ouverte, et la limite opposée $\lambda = \infty$ à la division du système entre une échelle à deux chaînes et une chaîne découplée. Ces deux limites n'ayant bien sûr pas de gap de spin (dans le second cas, si l'échelle à deux montants est gappée, la chaîne de spin-1/2 est critique, comme vu dans le Chapitre I), deux transitions de phases où le gap s'annule sont attendues pour des valeurs critiques $\lambda_{c,\pm}$ de l'asymétrie. Si des premières simulations numériques avaient suggéré que le gap disparaissait dès que $\lambda \neq 1$ [110], d'autres travaux ont ensuite clairement montré que la phase gappée avait en fait une extension faible mais non nulle [111, 112, 113], en accord avec l'image habituelle des phases gappées. L'extension de cette phase semble de plus être la même de chaque côté du point symétrique $\lambda = 1$ [113]. L'effet d'un champ magnétique externe a été aussi étudié dans les références [114, 115, 116, 117, 118], le rôle des excitations non magnétiques s'avérant particulièrement intéressant avec le développement d'un ordre associé dans certains régimes de paramètres [117, 118] (voir plus bas). Pour des spins plus élevés, moins de résultats sont disponibles. Pour $S = 3/2$, l'existence d'un gap de spin en champ nul a été démontrée numériquement [119], l'état fondamental ayant la même image physique de dimérisation que pour $S = 1/2$, avec un gap cependant bien plus petit.

Dans le cas de spins entiers, Sato a montré que pour des chaînes faiblement couplées (le point de départ de son étude est de prendre des chaînes de spin S entier gappées dont la physique est exactement connue) un effet de parité de N émerge [120, 121, 122]. Utilisant le modèle sigma non-linéaire (NLSM), il apparaît que pour N impair la bande de magnons la plus basse en énergie est six fois dégénérée, contre trois fois pour des systèmes équivalents non frustrés, c'est-à-dire avec N pair ou pour des échelles. Il a aussi pris en compte l'effet d'un champ magnétique, uniforme ou alterné, et prédit une succession de transitions de phases entre des phases critiques lorsque le champ varie, avec là encore un effet de la parité de N [120]. Finalement, pour des spins entiers une analyse du tube asymétrique par NLSM a révélé la présence de $2S$ transitions de phases quantiques entre des phases gappées lorsque l'asymétrie est variée [123].

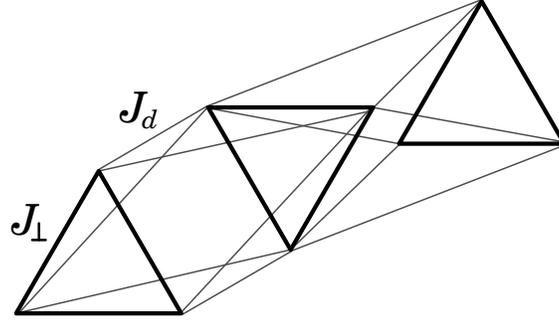


FIGURE II.2 – Structure géométrique du tube de spin déformé. Les couplages J_{\perp} et J_d sont antiferromagnétiques.

1.2 Tube triangulaire déformé

Dans un second temps, nous allons nous intéresser à un autre tube de spins avec une géométrie légèrement différente. Cette fois-ci, le spin au site j d'une chaîne donnée sera couplé par un terme de Heisenberg aux spins des sites $j \pm 1$ des deux autres chaînes. Ce tube, que nous appellerons tube de spin « déformé » de par sa géométrie, est dessiné sur la Figure II.2. Au niveau du Hamiltonien, cela correspond à ajouter des couplages diagonaux le long des chaînes tandis que le couplage longitudinal J_{\parallel} est pris nul. Il n'y a donc pas de nouvelle échelle d'énergie au problème, et le Hamiltonien décrivant ce tube s'écrit

$$\begin{aligned} H_{\perp} &= J_{\perp} \sum_j \sum_{\alpha=1}^3 \vec{S}_{\alpha,j} \cdot \vec{S}_{\alpha+1,j} + J_d \sum_j \sum_{\alpha=1}^3 \vec{S}_{\alpha,j} \cdot (\vec{S}_{\alpha+1,j+1} + \vec{S}_{\alpha-1,j+1}) - h \sum_j \sum_{\alpha=1}^3 S_{\alpha,j}^z \\ &= H_{\perp} + H_d + H_h, \end{aligned} \quad (\text{II.2})$$

où $J_{\perp} > 0$ et $J_d > 0$ sont les couplages antiferromagnétiques respectivement intra- et inter-triangles, et les notations sont les mêmes que pour le tube simple. Ce modèle a été étudié pour $S = 1/2$ dans la référence [124], qui a révélé que, comme pour le tube simple, une phase gappée dimérisée existe à champ nul, ainsi qu'une phase critique qui est décrite par un modèle effectif de chaîne antiferromagnétique de spins-3/2. Les simulations numériques ont aussi montré la présence d'un plateau d'aimantation à une aimantation par spin $m = 1/6$, qui n'a cependant pas été étudié plus en détail.

1.3 Symétries et observables utiles

Comme dans tout problème de physique, il est important de bien lister les symétries du modèle à étudier, et de proposer des observables pertinentes pour caractériser des phases où une ou plusieurs symétries peuvent être spontanément brisées. Bien entendu, dans un modèle unidimensionnel la symétrie continue $U(1)$ des spins ne peut pas être brisée et nous allons donc considérer uniquement les symétries spatiales du modèle. De manière évidente, les deux tubes de spins sont invariants par translation le long des chaînes. D'autre part, les deux tubes de spins sont construits à partir de triangles équilatéraux de Hamiltoniens H_{\perp} et ont donc pour groupe ponctuel de symétrie le groupe $C_{3v} = \{(), (123), (132), (12), (13), (23)\}$, où nous représentons les opérations de symétries par des permutations cycliques $(jkl \cdots m) : \vec{S}_j \rightarrow \vec{S}_k, \vec{S}_k \rightarrow \vec{S}_l, \dots, \vec{S}_m \rightarrow \vec{S}_j$ et l'opération identité est notée $()$. Les deux premières opérations correspondent aux rotations dans les sens gauche et droite, et les

trois suivantes aux réflexions suivant les trois différents plans de symétrie. Un état ordonné peut donc briser soit la permutation cyclique, soit la parité associée aux réflexions (symétrie \mathbb{Z}_2), ou soit les deux en même temps. Il est utile d'introduire dès maintenant deux opérateurs pouvant détecter de telles brisures de ces symétries et qui se révéleront très utiles par la suite.

Le premier de ces opérateurs est la composante suivant z de la chiralité vectorielle du triangle j

$$\chi_j = \frac{1}{3} \sum_{\alpha=1}^3 (\vec{S}_{\alpha,j} \times \vec{S}_{\alpha+1,j})^z, \quad (\text{II.3})$$

qui est invariant par permutation cyclique des indices des trois chaînes mais change de signe par permutation de deux chaînes. Il permet donc de détecter une éventuelle brisure de la parité. Le second opérateur est défini par

$$\mu_j = S_{1,j}^z - \frac{S_{2,j}^z + S_{3,j}^z}{2}. \quad (\text{II.4})$$

Puisque la forme de μ_j est invariante selon la réflexion (23) mais change lors d'une permutation cyclique, il nous servira à détecter une brisure de cette dernière. Physiquement, une valeur moyenne non nulle pour cet opérateur caractérisera une phase que nous nommerons *spin imbalance*, l'aimantation du spin 1 étant alors différente de celle des spins 2 et 3 sur chaque triangle.

1.4 Triangles découplés

Nous considérons ici les limites $J_{\parallel} = 0$ et $J_d = 0$ où les triangles sont découplés. Il reste le Hamiltonien d'un triangle

$$H_{\Delta} = H_{\perp} + H_h = \frac{1}{2} J_{\perp} \vec{S}_{\Delta}^2 - \frac{3}{2} J_{\perp} S(S+1) - h S_{\Delta}^z, \quad (\text{II.5})$$

où $\vec{S}_{\Delta} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3$ est le spin total du triangle. Les états propres de cet Hamiltonien sont donc uniquement déterminés par le spin total et sa composante selon l'axe z : $|S_{\Delta}, S_{\Delta}^z\rangle$. En champ nul, seul le spin total compte et l'état fondamental est simplement l'état de spin total le plus petit que nous pouvons obtenir. Au fur et à mesure que le champ magnétique va augmenter, des croisements de niveaux vont successivement avoir lieu avec des états de spin total plus élevé, jusqu'à finalement obtenir l'état complètement polarisé $|3S, 3S\rangle$.

Dans le cas $S = 1/2$, l'état fondamental obtenu en champ nul est quatre fois dégénéré, avec deux doublets chiraux de spin total $\vec{S}_{\Delta} = 1/2$. Ces états sont

$$\begin{aligned} |\uparrow L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + \omega |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + \omega^{-1} |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \right), \\ |\downarrow L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + \omega |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + \omega^{-1} |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \right), \\ |\uparrow R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + \omega^{-1} |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + \omega |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \right), \\ |\downarrow R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + \omega^{-1} |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + \omega |\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \right), \end{aligned} \quad (\text{II.6})$$

où $\omega = e^{i\frac{2\pi}{3}}$. Ces états sont en fait également états propres de l'opérateur de rotation (permutation circulaire) autour du triangle, et donc états propres de l'opérateur de chiralité (II.3) avec valeurs

propres ± 1 . Nous pouvons « tourner » dans deux sens différents, ce qui correspond aux deux chiralités L et R (pour *left* et *right*). Les symboles \uparrow, \downarrow représentent eux la projection du spin total du triangle sur l'axe z .

Nous utiliserons par la suite ces états lors de l'étude des deux modèles dans le régime de couplage fort, où J_{\perp} est le couplage dominant. Nous verrons en particulier que la chiralité, qui est un degré de liberté non magnétique, joue un rôle très important dans les propriétés des deux modèles.

2 Petite revue expérimentale

Nous allons ici résumer brièvement les différentes réalisations expérimentales disponibles actuellement. Comme le nombre de composés pouvant être représentés de manière satisfaisante par des modèles de tubes de spins triangulaire est très limité, nous allons élargir notre revue aux tubes de spins en général.

Des mesures magnétiques par résonance de spin électronique ainsi que des mesures en champ magnétique pulsé ont montré que le composé $[(\text{CuCl}_2\text{tachH})_3\text{Cl}]\text{Cl}_2$ peut être correctement décrit par le modèle (II.2) [125]. Les spins-1/2, provenant des ions cuivre, forment un réseau unidimensionnel de triangles équilatéraux, et chaque spin d'une des chaînes formant le triangle est couplé aux spins des deux autres chaînes sur les triangles voisins. Plus précisément, une comparaison des mesures de susceptibilité magnétique en champ faible avec la valeur calculée par diagonalisation exacte (Cf. Figure II.3) montre que le composé correspond au modèle pour les valeurs de couplages $J_{\perp} = 0.9$ K et $J_d = 1.95$ K [125], et n'appartient donc ni au régime de couplage fort, ni à celui de chaînes faiblement couplées. Par la suite, des mesures de capacité calorifique $C(T)$ à basse température ont confirmé les prédictions théoriques en montrant que le composé se comporte essentiellement comme une chaîne antiferromagnétique de spin-3/2, d'après une comparaison à des résultats de simulations de Monte-Carlo Quantique (Cf. Figure II.4). Cela se comprend dans la limite de triangles fortement couplés où les corrélations entre les spins d'un triangle sont ferromagnétiques. Une phase critique est donc attendue. En particulier, pour les très basses températures le comportement universel de la capacité calorifique en fonction de la température pour un liquide de Luttinger, selon la formule

$$\frac{C(T)}{Nk_b} = \frac{\pi T}{9v_s}, \quad (\text{II.7})$$

où v_s est la vitesse des excitations de spin [1], a été retrouvé expérimentalement avec un très bon accord [126].

Deux autres composés pouvant être représentés par des tubes de spins avec un nombre impair de chaînes existent. L'un d'entre eux est un oxide de Vanadium $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$, qui peut être vu comme un tube de spins à neuf chaînes dont les spin-1/2 sont fournis par les ions V^{4+} [127]. Des mesures de résonance magnétique nucléaire et de susceptibilité magnétique ont montré l'existence de deux régimes ne présentant pas d'ordre magnétique [128]. Nous montrons sur la Figure II.5 la dépendance en température de l'inverse de la susceptibilité magnétique molaire entre 1.9 K et 315 K, où deux régimes suivant la loi de Curie-Weiss

$$\chi(T) = \frac{C}{T - \Theta}, \quad (\text{II.8})$$

où Θ est la température de Curie et C la constante de Curie, apparaissent. Pour des températures supérieures à 100 K le système est simplement considéré comme paramagnétique avec tous les ions V^{4+} contribuant, tandis que pour des températures plus basses les valeurs des paramètres Θ et C sont très

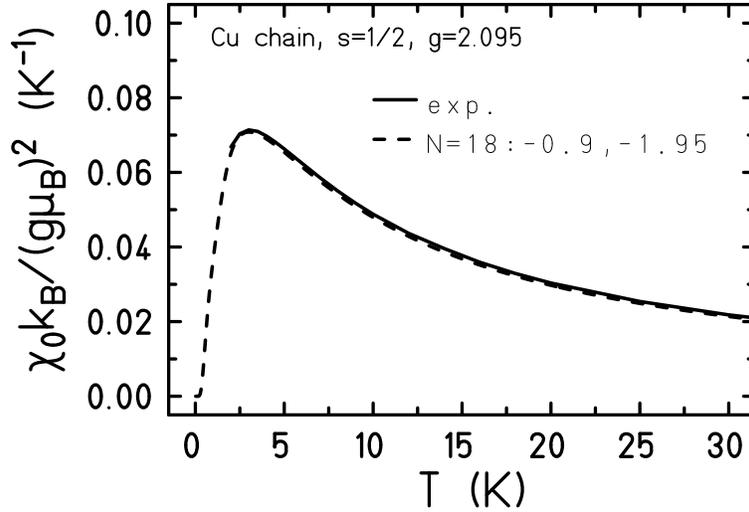


FIGURE II.3 – Susceptibilité magnétique en champ faible par triangle χ_0 mesurée pour le composé $[(\text{CuCl}_2\text{tachH})_3\text{Cl}]\text{Cl}_2$. La courbe solide montre les résultats expérimentaux obtenus à une température de 2 K. La courbe en pointillés provient d’une simulation du modèle (II.2) par diagonalisation exacte pour une taille de système $L = 6$ et des valeurs de couplages $J_\perp = 0,9$ K et $J_\parallel = 1,95$ K. Le bon accord entre les deux confirme la pertinence du modèle (II.2) pour décrire le composé. Figure tirée de la référence [125].

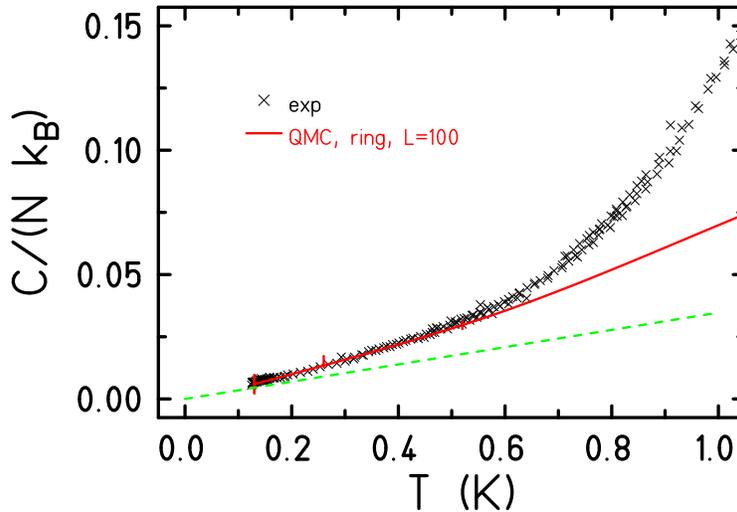


FIGURE II.4 – Mesure de la capacité calorifique par atome de cuivre $C(T)/(Nk_b)$ pour le composé $[(\text{CuCl}_2\text{tachH})_3\text{Cl}]\text{Cl}_2$ en fonction de la température. Les symboles noirs montrent les résultats expérimentaux tandis que la courbe rouge a été obtenue numériquement pour une chaîne antiferromagnétique de spin-3/2 de longueur $L = 100$. Les deux courbes coïncident bien à basse température, en accord avec les prédictions de la référence [124]. La courbe verte en pointillés correspond à la capacité calorifique pour un liquide de Luttinger (II.7) en prenant la valeur $v_s = 10,06$ K déterminée numériquement. Là encore les résultats expérimentaux sont en bon accord avec la théorie. Figure tirée de la référence [126].

fortement réduites. Cette diminution du moment magnétique effectif est expliquée par la formation de singulets sur les plaquettes, qui fait que moins de spins contribuent à la susceptibilité magnétique. Le nombre de chaînes étant impair, tous les spins ne peuvent pas participer à un singulet et à $T < 20$ K l'état fondamental proposé consiste en un état de spin total $1/2$, correspondant à un des neuf spin- $1/2$ délocalisé parmi quatre singulets. A des températures plus basses $T \lesssim 2$ K, une transition de phase vers un état ordonné se produit à une température dépendant du champ magnétique externe, mais ce comportement est difficile à expliquer à cause de la présence d'états triplets, dont la distribution des gaps semble être assez large [129]. De plus, le modèle permettant de décrire ce composé n'est pas clairement fixé, car ni la nature ferromagnétique ou antiferromagnétique des couplages longitudinaux, ni leurs magnitudes, n'ont été tranchées [130, 131]. Une nouvelle structure géométrique a également été suggérée plus récemment [132].

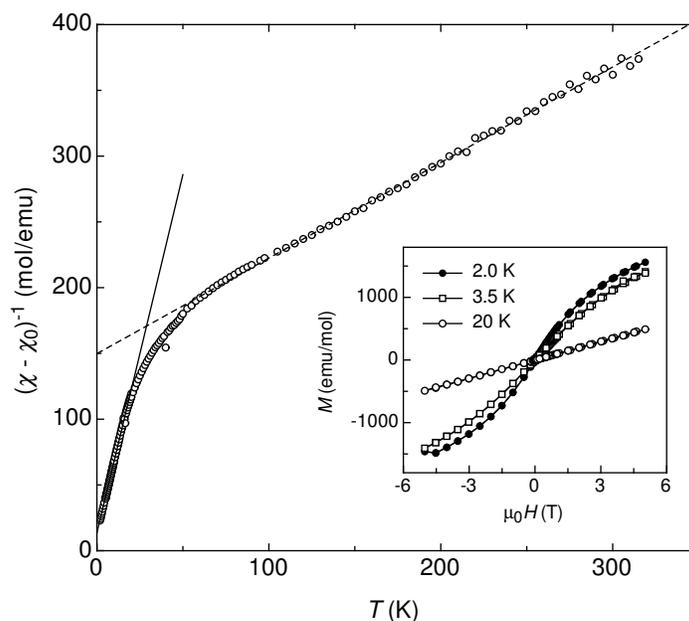


FIGURE II.5 – Mesure de la susceptibilité magnétique molaire inverse en fonction de la température pour le composé $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$. Les résultats expérimentaux (cercles) montrent clairement la présence de deux régimes pour lesquels la susceptibilité est bien représentée par une loi de Curie-Weiss (II.8) (lignes pleine et en pointillés). Les paramètres obtenus sont fortement réduits dans le régime de basse température, et cela est expliqué par une réduction du nombre d'ions V^{4+} participant au moment magnétique effectif total. La fenêtre secondaire montre des courbes d'aimantation à différentes températures. Figure tirée de la référence [128].

Récemment, le composé CsCrF_4 , qui est très bien représenté par le modèle de tube triangulaire simple (II.1), a été étudié du point de vue magnétique et n'a montré aucun gap pour des températures supérieures à 1,3 K, en contradiction avec ce qui est attendu pour un tube à nombre impair de chaînes [133, 134]. La dépendance linéaire en température de la capacité calorifique indique plutôt un comportement de liquide de Luttinger (voir Eq. II.7). La spécificité de ce composé vient du fait que, les moments magnétiques étant issus des ions Cr^{3+} , nous avons affaire à des spins- $3/2$. Une étude numérique a expliqué ce comportement inhabituel en montrant que le gap devrait être très faible et donc difficile à détecter expérimentalement [119].

Finale­ment, dans la famille des tubes de spin pairs le composé $\text{Cu}_2\text{Cl}_4 \cdot \text{D}_8\text{C}_4\text{SO}_2$ a été identifié par des mesures de diffusion inélastique de neutrons comme un système constitué de quatre chaînes de spins-1/2 (venant des ions Cu^{2+}) couplées, et dont l'interaction dominante est un couplage antiferromagnétique entre seconds plus proches voisins [135]. La structure géométrique unidimensionnelle du composé est de plus presque parfaite. Les résultats expérimentaux ont aussi montré que l'état fondamental est un liquide de spin et que le spectre de basse énergie consiste en des excitations de triplets avec un petit gap [135, 136]. D'un point de vue théorique, le composé n'est pas représenté par un tube carré simple car des interactions diagonales ne sont pas négligeables, et la frustration en résultant est responsable de l'apparition d'un état ordonné hélimagnétique au-dessus d'une température critique $T_c(H)$ dépendant du champ magnétique externe. Un diagramme de phases, que nous montrons sur la Figure II.6, a été obtenu dans la référence [137] en combinant les mesures des neutrons avec celles de chaleurs spécifiques [138]. La nature de la transition de phase est à ce jour une question ouverte.

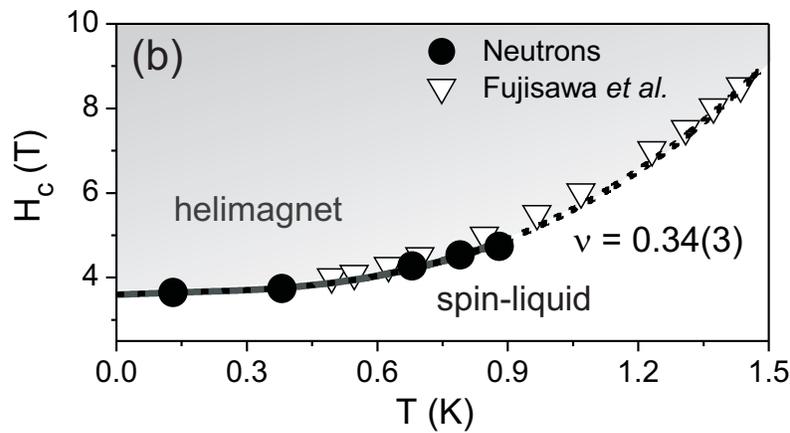


FIGURE II.6 – Diagramme de phases expérimental dans le plan $H(T)$ du composé $\text{Cu}_2\text{Cl}_4 \cdot \text{D}_8\text{C}_4\text{SO}_2$. En dessous d'un champ magnétique critique $H_c(T)$, l'état fondamental est un liquide de spin gappé, tandis que pour des champs plus forts un ordre hélimagnétique se développe comme conséquence de la frustration. Les cercles pleins représentent des résultats obtenus par diffraction inélastique de neutrons [137] et les points triangulaires des mesures de chaleurs spécifiques [138]. Les exposants caractérisant la transition de phase se sont révélés inhabituels et la nature de cette transition reste un problème ouvert. Figure tirée de la référence [137].

3 Tube triangulaire simple

3.1 Approche par intégrale de chemin

Nous allons maintenant étudier analytiquement le modèle de tube triangulaire simple sous champ magnétique par une approche utilisant une formulation d'intégrale de chemin. Il s'agit d'une méthode semi-classique valide dans la limite des grands spins $S \rightarrow \infty$ et donc l'aspect quantique est pris en compte par l'apparition d'un terme de phase dans l'action. Nous présenterons dans un premier temps la méthode sur un cas simple, puis passerons au cas du tube. Nous montrerons en particulier que cette méthode permet de retrouver la fameuse condition d'Oshikawa-Yamanaka-Affleck [36] sur les valeurs

d'aimantation admettant des plateaux. Nous discuterons également le riche comportement des degrés de liberté non magnétiques, c'est-à-dire ne concernant pas l'aimantation totale.

3.1.1 Intégrale de chemin pour les systèmes de spins et phase de Berry

Avant de traiter le cas pédagogique de la chaîne de spins puis du tube de spin, nous décrivons ici le formalisme permettant de traiter par l'intégrale de chemin les systèmes de spins. Nous mettrons en particulier l'accent sur le terme important de phase de Berry qui apparaît au cours de la dérivation de l'action. La présentation faite ici est basée sur celle du livre de FRADKIN [139].

Nous considérons un système sur réseau contenant un ensemble $\{S_j\}$ de spins S , indexés par leur indice de site j , et décrits par un Hamiltonien $H(\{S_j\})$ que nous ne spécifions pas pour l'instant. La suite de la présentation ne nécessite pas plus d'hypothèses, que ce soit sur la géométrie du réseau, sa dimensionnalité ou la forme des interactions présentes dans le Hamiltonien. D'autre part, il est habituel, dans les problèmes de spins quantiques, de travailler dans la base S^z , c'est-à-dire les états $|S, S^z\rangle$, états propres respectivement des opérateurs \vec{S}^2 et S^z , avec valeurs propres $S(S+1)$ et S^z . Cependant, ici nous allons plutôt nous placer dans la base des états cohérents de spins [140], qui sont les analogues des états cohérents bosoniques. Ils sont définis par

$$|\vec{n}\rangle = e^{i\theta(\frac{\hat{z}\times\vec{n}}{|\hat{z}\times\vec{n}|})\cdot\vec{S}}|S, S\rangle, \quad (\text{II.9})$$

où \vec{n} est un vecteur unité formant un angle θ avec l'axe de quantification z et $|S, S\rangle$ l'état de plus haut poids de l'espace de Hilbert de taille $2S+1$ d'un spin S . Physiquement, cela correspond à appliquer une rotation d'angle θ à l'état complètement polarisé. Les propriétés de ces états cohérents sont résumées dans l'Annexe A.

Nous allons commencer par considérer tout d'abord le cas d'un unique spin S . Nous souhaitons calculer sa fonction de partition, vue comme l'opérateur d'évolution en temps imaginaire $t = -i\tau$, pour $\tau = \beta$ et des conditions aux bords périodiques $|\vec{n}(0)\rangle = |\vec{n}(\beta)\rangle$, étant donné que la fonction de partition s'écrit comme une trace. Nous avons ainsi

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}\{e^{-\beta H}\}, \quad (\text{II.10})$$

où le Hamiltonien H ne concerne donc qu'un seul spin. Suivant la procédure habituelle au formalisme d'intégrale de chemin, nous décomposons l'évolution en temps imaginaire en N intervalles infinitésimaux de longueur $\delta\tau$, pour $N \rightarrow \infty$, $\delta\tau \rightarrow 0$ tel que $N\delta\tau = \beta$ est fixé [141]. La formule de Trotter [142] nous permet d'écrire

$$\mathcal{Z} = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr}\{(e^{-\delta\tau H})^N\}. \quad (\text{II.11})$$

En insérant l'opérateur identité des états cohérents de spin à chaque étape de temps, nous obtenons

$$\mathcal{Z} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{2S+1}{4\pi} \right)^N \left(\prod_{j=1}^N \int d^3\vec{n}_j \delta(\vec{n}_j^2 - 1) \langle \vec{n}(\tau_{j+1}) | e^{-\delta\tau H} | \vec{n}(\tau_j) \rangle \right), \quad (\text{II.12})$$

où l'intégrale contrainte par le δ de Dirac correspond simplement à intégrer sur les composantes d'un vecteur unitaire à trois dimensions. Puisque $\delta\tau$ est pris petit, nous pouvons alors faire un développement de Taylor de l'exponentielle et conserver uniquement les termes d'ordre $\delta\tau$ dans l'expression de la valeur moyenne du Hamiltonien. Cela nous donne la formule

$$\langle \vec{n}(\tau_{j+1}) | e^{-\delta\tau H} | \vec{n}(\tau_j) \rangle = \langle \vec{n}(\tau_{j+1}) | \vec{n}(\tau_j) \rangle - \delta\tau \langle \vec{n}(\tau_j) | H | \vec{n}(\tau_j) \rangle + \mathcal{O}(\delta\tau^2). \quad (\text{II.13})$$

Définissant la mesure d'intégration

$$\int \mathcal{D}\vec{n} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{2S+1}{4\pi} \right)^N \left(\prod_{j=1}^N \int d^3\vec{n}_j \delta(\vec{n}_j^2 - 1) \right), \quad (\text{II.14})$$

nous arrivons pour la fonction de partition à l'expression

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\vec{n} e^{-S[\vec{n}]}. \quad (\text{II.15})$$

L'interprétation de cette formule est transparente : calculer la fonction de partition consiste à intégrer l'action sur toutes les trajectoires périodiques en temps imaginaire du vecteur unitaire $\vec{n}(\tau)$. En utilisant les propriétés des états cohérents, l'action s'écrit

$$S[\vec{n}] = -iS \sum_{j=1}^N \Phi(\vec{n}(\tau_j), \vec{n}(\tau_{j+1}), \hat{z}) - S \sum_{j=1}^N \ln \left(\frac{1 + \vec{n}(\tau_j) \cdot \vec{n}(\tau_{j+1})}{2} \right) + \delta\tau \sum_{j=1}^N \langle \vec{n}(\tau_j) | H | \vec{n}(\tau_j) \rangle. \quad (\text{II.16})$$

Elle contient trois termes distincts. Le deuxième est en fait d'ordre $\delta\tau^2$ et peut donc être ignoré vu que nous travaillons à l'ordre $\delta\tau$. Le dernier terme représente simplement la valeur moyenne du Hamiltonien à temps imaginaires égaux. Il contient donc les détails du système considéré, comme la forme des interactions, les valeurs des couplages, etc. Le premier terme nécessite une plus grande attention et nous allons voir qu'il contient l'information sur la nature quantique des spins. $\Phi(\vec{n}(\tau_j), \vec{n}(\tau_{j+1}), \hat{z})$ représente l'aire du triangle sphérique de sommets $\vec{n}(\tau_j)$, $\vec{n}(\tau_{j+1})$ et \hat{z} (ou bien l'angle solide vu depuis l'origine), et c'est donc un terme de phase. Cela signifie que dans le calcul de la fonction de partition, lorsque nous intégrons sur l'ensemble des chemins il leur est associé un poids complexe $e^{i\mathcal{A}[\vec{n}]}$, où $\mathcal{A}[\vec{n}]$ est défini par

$$\mathcal{A}[\vec{n}] = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N \Phi(\vec{n}(\tau_j), \vec{n}(\tau_{j+1}), \hat{z}). \quad (\text{II.17})$$

Comme nous travaillons avec des conditions aux bords périodiques en temps imaginaire, cette somme des aires élémentaires décrit en fait l'aire totale (ou l'angle solide) délimitée par le chemin fermé que forme $\vec{n}(\tau)$ au cours de son évolution (voir Figure II.7). Un facteur de phase de ce type, apparaissant lors de l'évolution adiabatique d'un état quantique [143, 144], est appelé Phase de Berry (PB) et nous verrons par la suite qu'il permet de comprendre l'émergence des plateaux d'aimantation. Nous pouvons noter au passage que le fait que l'angle solide soit défini à 4π près n'a pas de conséquence sur la fonction de partition (et donc pas de conséquences physiques) puisqu'il sort alors un facteur $e^{4i\pi S} = 1$, S étant entier ou demi-entier. Nous pouvons finalement écrire l'action dans la limite continue en temps imaginaire comme la somme de deux termes

$$S[\vec{n}] = -iS\mathcal{A}[\vec{n}(\tau)] + \int_0^\beta d\tau \langle \vec{n}(\tau) | H | \vec{n}(\tau) \rangle = S_{PB}[\vec{n}] + S_H[\vec{n}]. \quad (\text{II.18})$$

L'extension de ce problème à un spin au cas d'un système d'un nombre arbitraire de spins $\{S_j\}$ est immédiat. Les phases de Berry vont se sommer indépendamment pour chaque spin, et l'état du système à un instant τ est alors écrit comme le produit tensoriel des états cohérents de spins en chaque site. Nous devons donc seulement faire les changements

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[\vec{n}(\tau)] &\rightarrow \sum_j \mathcal{A}[\vec{n}_j(\tau)], \\ |\vec{n}(\tau)\rangle &\rightarrow |\{\vec{n}_j(\tau)\}\rangle = \bigotimes_j |\vec{n}_j(\tau)\rangle. \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

L'équation (II.18) avec les modifications (II.19) constitue le point de départ de l'étude par l'intégrale de chemin d'un système de spins.

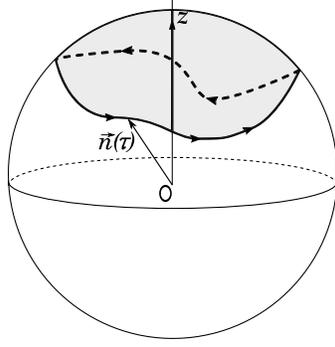


FIGURE II.7 – Trajectoire fermée décrite par le vecteur unitaire \vec{n} au cours de son évolution en temps imaginaire. L'aire qu'elle délimite n'est pas uniquement définie et il est possible de prendre soit l'aire grisée, soit celle laissée blanche, la somme des deux valant 4π .

3.1.2 Un exemple simple : la chaîne de spins sous champ magnétique

Nous allons maintenant appliquer la méthode présentée dans la section précédente au cas le plus simple d'une chaîne de Heisenberg en présence d'un champ magnétique, suivant le modèle de TANAKA, TOTSUKA et HU [145]. Nous allons notamment montrer que cette approche permet de comprendre le processus d'aimantation de la chaîne et de retrouver la condition OYA [36]. Le Hamiltonien du système est donné par

$$H = J \sum_j \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} - h \sum_j S_j^z, \quad (\text{II.20})$$

où les \vec{S}_j sont les opérateurs de spins $\vec{S}_j^2 = S(S+1)$. L'interaction entre spins est antiferromagnétique ($J > 0$) et h est le champ magnétique orienté suivant l'axe z . Utilisant la propriété $\langle \vec{n} | \vec{S} | \vec{n} \rangle = S\vec{n}$ des états cohérents, l'action en temps imaginaire s'écrit

$$S[\{\vec{n}_j\}] = -iS \sum_j \mathcal{A}[\vec{n}_j(\tau)] + \sum_j \int_0^\beta d\tau \{ JS^2 \vec{n}_j(\tau) \cdot \vec{n}_{j+1}(\tau) - hS n_j^z(\tau) \}, \quad (\text{II.21})$$

où nous comprenons que le second terme représente simplement l'intégrale en temps imaginaire du Hamiltonien classique.

L'idée est maintenant obtenir une théorie de basse énergie. Suivant TANAKA *et al.*, la démarche est de déterminer dans un premier temps les \vec{n}_j correspondant à la configuration de plus basse énergie de la chaîne (ou, plus généralement, de tout autre système) dans la limite classique, où les spins sont décrits par des vecteurs et non des opérateurs. Ensuite, l'ajout des fluctuations quantiques permettra de dériver une action décrivant les propriétés de basse énergie du système et qui sera valide dans la limite des grands S .

En l'absence de champ magnétique, la configuration classique de la chaîne de spins correspond à l'ordre de Néel $\vec{S}_j = S(-1)^j \vec{n}$. Le vecteur \vec{n} est bien sûr de direction arbitraire puisque le Hamiltonien (II.20) sans champ a une invariance de rotation $SU(2)$. L'ajout d'un champ magnétique force les spins à s'incliner dans sa direction, tout en conservant un ordre de Néel dans le plan xy perpendiculaire au champ. Les spins sont alors partiellement polarisés et l'état fondamental est donné par $\vec{S}_j = S\vec{n}_j$ avec

$$\vec{n}_j = \begin{pmatrix} (-1)^j \sin(\theta^{(0)}) \cos(\varphi^{(0)}) \\ (-1)^j \sin(\theta^{(0)}) \sin(\varphi^{(0)}) \\ \cos(\theta^{(0)}) \end{pmatrix}, \quad (\text{II.22})$$

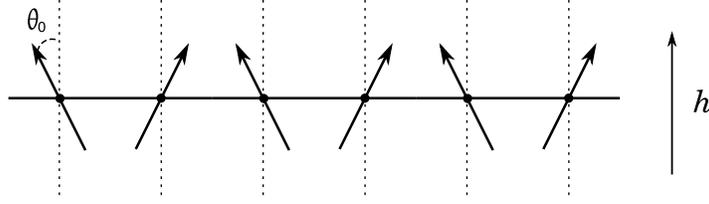


FIGURE II.8 – Configuration classique du modèle de Heisenberg en présence d'un champ magnétique h le long de l'axe z pour la chaîne de spins.

comme montré sur la Figure II.8, où $\cos(\theta^{(0)}) = \frac{h}{4SJ}$ est l'angle qui minimise classiquement l'énergie. Dans le régime où $h > 4SJ$ le système est complètement polarisé. L'angle $\varphi^{(0)}$ est arbitraire et peut donc être pris nul. Cette liberté de choix reflète simplement la symétrie $U(1)$ de rotation autour de l'axe du champ du modèle (II.20) quand $h \neq 0$. Nous définissons l'aimantation classique par spin $m = S\cos(\theta^{(0)})$.

Nous allons alors partir de ce point de départ et rajouter les fluctuations quantiques en permettant aux angles de s'écarter légèrement de leurs valeurs classiques. Cela se traduit par

$$\begin{aligned}\theta^{(0)} &\rightarrow \theta_j = \theta^{(0)} + \delta\theta_j, \\ \varphi^{(0)} = 0 &\rightarrow \varphi_j.\end{aligned}\tag{II.23}$$

Nous pouvons alors écrire en développant à l'ordre deux en $\delta\theta_j$ que

$$\begin{aligned}n_j^\pm &= n_j^x \pm in_j^y \approx (-1)^j e^{\pm i\varphi_j} \left[\sin(\theta^{(0)}) + \cos(\theta^{(0)})\delta\theta_j - \frac{1}{2}\sin(\theta^{(0)})\delta\theta_j^2 \right], \\ n_j^z &\approx \cos(\theta^{(0)}) - \sin(\theta^{(0)})\delta\theta_j - \frac{1}{2}\cos(\theta^{(0)})\delta\theta_j^2.\end{aligned}\tag{II.24}$$

Jusqu'ici, nous n'avons fait qu'introduire des fluctuations qui n'ont pas de caractère quantique. Cependant, si nous calculons les crochets de Poisson et que nous imposons la relation $\{S^z, S^\pm\}_{\varphi, \delta\theta} = \mp iS^\pm$, cela conduit à introduire les variables

$$\Pi_j = -S \left[\sin(\theta^{(0)})\delta\theta_j + \frac{1}{2}\cos(\theta^{(0)})\delta\theta_j^2 \right]\tag{II.25}$$

comme le moment conjugué de φ_j , c'est-à-dire vérifiant $\{\varphi_i, \Pi_j\} = \delta_{ij}$. Nous obtenons de cette manière les bonnes relations de commutation $SU(2)$ pour les opérateurs de spins et les Π_j et φ_j apparaissent donc bien comme des fluctuations quantiques.

En inversant la relation entre Π_j et $\delta\theta_j$ et en ne conservant que les termes jusqu'à l'ordre deux en Π_j , nous arrivons aux expressions suivantes pour les composantes de \vec{n}

$$\begin{aligned}n_j^\pm &\approx (-1)^j e^{\pm i\varphi_j} \left[\sin(\theta^{(0)}) - \frac{m}{S^2\sin(\theta^{(0)})}\Pi_j - \frac{1}{2} \frac{S^2}{S^2 - m^2} \frac{1}{S^2\sin(\theta^{(0)})}\Pi_j^2 \right], \\ n_j^z &\approx \cos(\theta^{(0)}) + \frac{\Pi_j}{S}.\end{aligned}\tag{II.26}$$

La signification de la seconde équation est transparente et nous dit que Π_j décrit les fluctuations de la colatitude autour de l'aimantation classique m . Notons également que ce développement diverge si $m = S$, c'est-à-dire si nous partons d'une solution classique complètement polarisée.

Nous reportons ensuite ces expressions dans le second terme de l'action (II.21). Nous allons également prendre la limite du continu en remplaçant la somme sur les sites par une intégrale, $\sum_j \rightarrow \int \frac{dx}{a}$ où a est la maille du réseau, et nous obtenons l'expression de l'action correspondant au Hamiltonien

$$S_H[\Pi, \varphi] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2} J a (S^2 - m^2) (\partial_x \varphi(\tau, x))^2 + 2 J a \Pi^2(\tau, x) \right\}. \quad (\text{II.27})$$

L'absence de termes d'ordre 1 s'explique par le fait que nous travaillons autour d'une solution d'énergie minimale et que donc les termes linéaires s'annulent au cours du développement. C'est aussi ce qui explique l'absence d'un terme directement proportionnel à h , comme nous pourrions peut-être nous y attendre vu la forme initiale du Hamiltonien, puisque d'après les développements (II.26) la présence du champ n'introduit qu'une constante et un terme linéaire en Π . La présence de h dans cette action se retrouve à travers l'expression de $m = \cos(\theta^{(0)})$.

Pour évaluer le terme de phase de Berry, nous devons exprimer l'angle solide décrit par le vecteur \vec{n} au cours de son évolution en temps imaginaire. Nous pouvons écrire en coordonnées sphériques

$$\begin{aligned} S_{BP}[\{\delta\theta_j\}, \{\varphi_j\}] &= iS \sum_j \int d\tau \int_0^{\theta_j} d\omega_j \sin(\omega_j) \partial_\tau \varphi_j(\tau) \\ &= iS \sum_j \int d\tau [1 - \cos(\theta_0 + \delta\theta_j(\tau))] \partial_\tau \varphi_j(\tau). \end{aligned} \quad (\text{II.28})$$

Nous développons ensuite le cosinus jusqu'au deuxième ordre en $\delta\theta_j$ puis réécrivons cette expression en fonction des variables conjuguées Π_j . Finalement après passage au continu la contribution de la phase de Berry à l'action s'écrit

$$S_{BP}[\Pi, \varphi] = i \int d\tau dx \left\{ \left(\frac{S - m}{a} \right) \partial_\tau \varphi(\tau, x) - \Pi(\tau, x) \partial_\tau \varphi(\tau, x) \right\}. \quad (\text{II.29})$$

Nous ne noterons plus par la suite la dépendance en x et τ des champs pour alléger la notation.

Il est important de faire la remarque suivante sur cette action. Puisque nous travaillons avec des conditions aux limites périodiques en temps imaginaire, nous pourrions penser que l'intégrale sur τ du premier terme dans cette équation, qui est une dérivée, donnera toujours une contribution nulle puisque $\varphi(x, \tau = 0) = \varphi(x, \tau = \beta)$. Mais φ est une variable angulaire, donc définie à 2π près, bien que ce caractère a quelque peu été oublié lorsque nous sommes passés à la théorie de champ dans le continu [145]. Ainsi, lorsque dans le calcul de la fonction de partition nous allons intégrer sur toutes les trajectoires périodiques, certaines vont correspondre à des situations où le vecteur \vec{n} « s'enroule » et l'intégration du $\partial_\tau \varphi$ donnera en réalité non pas zéro mais $2\pi q$. Si $q \neq 0$, nous dirons qu'il y a un *vortex* de charge q à l'intérieur du contour fermé. Nous allons voir par la suite que de telles configurations vont jouer un rôle crucial dans les propriétés physiques du système, et ce terme de dérivée ne peut donc pas être ignoré.

En rassemblant les deux morceaux, l'action décrivant les propriétés de basse énergie de la chaîne de spin s'écrit

$$S[\Pi, \varphi] = \int d\tau dx \left\{ 2 J a \Pi^2 - i \Pi \partial_\tau \varphi + \frac{1}{2} J a (S^2 - m^2) (\partial_x \varphi)^2 + i \left(\frac{S - m}{a} \right) \partial_\tau \varphi \right\}, \quad (\text{II.30})$$

et la fonction de partition correspondante est

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\varphi \mathcal{D}\Pi e^{-S[\Pi, \varphi]}. \quad (\text{II.31})$$

Comme l'action est gaussienne dans le champ Π , nous pouvons l'intégrer dans la fonction de partition, ce qui mène à l'action effective

$$S[\varphi] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2} \lambda_\tau (\partial_\tau \varphi)^2 + \frac{1}{2} \lambda_x (\partial_x \varphi)^2 + i \left(\frac{S-m}{a} \right) \partial_\tau \varphi \right\}, \quad (\text{II.32})$$

où nous avons défini les constantes

$$\lambda_\tau = \frac{1}{4aJ}, \quad \lambda_x = aJ(S^2 - m^2). \quad (\text{II.33})$$

Une simple redéfinition de τ permet de voir que nous avons abouti à une action effective composée d'un terme gaussien $(\vec{\nabla}\varphi)^2$, où $\vec{\nabla} = (\partial_\tau, \partial_x)$, et du terme de dérivée première, qui compte combien le champ φ va faire de tours du cercle sur lequel il est défini au cours de son évolution en temps imaginaire. Comme nous l'avons annoncé précédemment, c'est ce terme topologique qui, une fois correctement pris en compte, va déterminer le comportement à basse énergie du système.

Pour comprendre son rôle, il est utile d'effectuer une transformation de dualité [146] sur l'action effective (II.32). Nous commençons par appliquer une transformation de Hubbard-Stratonovich en introduisant le champ auxiliaire $\vec{J} = (J_\tau, J_x)$. Nous allons également séparer le champ φ en deux parties selon $\varphi = \varphi_v + \varphi_f$, où le champ φ_f ne contient pas de vortex, c'est-à-dire vérifie $(\partial_\mu \partial_\nu - \partial_\nu \partial_\mu) \varphi_{s,f} = 0$ tandis que la partie φ_v contient elle toute la possible vorticit   du champ φ . L'action se r  crit alors

$$S[\varphi_v, \varphi_f, \vec{J}] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2\lambda_\tau} J_\tau^2 + \frac{1}{2\lambda_x} J_x^2 + i \left(J_\tau + \frac{S-m}{a} \right) \partial_\tau \varphi_v + i J_x \partial_x \varphi_v \right. \\ \left. + i \left(J_\tau + \frac{S-m}{a} \right) \partial_\tau \varphi_f + i J_x \partial_x \varphi_f \right\}. \quad (\text{II.34})$$

Les deux derniers termes contenant la composante sans vortex φ_f peuvent   tre int  gr  s par partie, et cela donne

$$S[\varphi_v, \varphi_f, \vec{J}] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2\lambda_\tau} \left(\tilde{J}_\tau - \frac{S-m}{a} \right)^2 + \frac{1}{2\lambda_x} \tilde{J}_x^2 + i(\tilde{J}_\tau \partial_\tau + \tilde{J}_x \partial_x) \varphi_v - i(\partial_\tau \tilde{J}_\tau + \partial_x \tilde{J}_x) \varphi_f \right\}, \quad (\text{II.35})$$

o   nous avons au passage red  fini le champ auxiliaire selon $\vec{\tilde{J}} = (J_\tau + \frac{S-m}{a}, J_x)$. Puisque le terme contenant φ_f est un terme de phase, il est alors clair que lorsque nous l'int  grons dans la fonction de partition le r  sultat sera nul sauf si le coefficient devant φ_f est nul, c'est-  dire si $\partial_\tau \tilde{J}_\tau + \partial_x \tilde{J}_x = \partial_\mu \tilde{J}_\mu = 0$. L'action devient alors

$$S[\varphi_v, \vec{\tilde{J}}] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2\lambda_\tau} \left(\tilde{J}_\tau - \frac{S-m}{a} \right)^2 + \frac{1}{2\lambda_x} \tilde{J}_x^2 + i \tilde{J}_\mu \partial_\mu \varphi_v \right\}, \quad (\text{II.36})$$

o   il est sous-entendu que $\vec{\tilde{J}}$ est soumis    une contrainte de divergence nulle. Rappelons que nous travaillons    une dimension d'espace, et dans ce cas la contrainte peut   tre simplement satisfaite en introduisant le champ dual Φ d  fini par

$$\tilde{J}_\mu = \epsilon_{\mu\nu} \partial_\nu \Phi. \quad (\text{II.37})$$

Nous voyons alors que la contrainte $\partial_\mu \tilde{J}_\mu = 0$ se traduit pour le champ dual par une absence de vortex $(\partial_\mu \partial_\nu - \partial_\nu \partial_\mu) \Phi = 0$. Une fois la substitution faite, nous pouvons int  grer par partie le dernier terme dans (II.36) et nous arrivons    l'action

$$S[\tilde{\Phi}] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2\lambda_x} (\partial_\tau \tilde{\Phi})^2 + \frac{1}{2\lambda_\tau} (\partial_x \tilde{\Phi})^2 + i2\pi\rho_v \left(\tilde{\Phi} + \frac{S-m}{a} x \right) \right\}, \quad (\text{II.38})$$

avec le champ dual qui a été redéfini selon $\tilde{\Phi} = \Phi - \frac{S-m}{a}x$. Dans cette action nous avons introduit un terme ρ_v qui correspond à la densité de vortex définie par

$$(\partial_\tau \partial_x - \partial_x \partial_\tau) \varphi_v = \epsilon_{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \varphi_v = 2\pi \sum_j q_{j,v} \delta(\tau - \tau_{j,v}) \delta(x - x_{j,v}) = 2\pi \rho_v, \quad (\text{II.39})$$

où $(\tau_{j,v}, x_{j,v})$ sont les coordonnées d'espace-temps du j -ième vortex de charge $2\pi q_{j,v}$, avec $q_{j,v} \in \mathbb{Z}$. La séparation du champ φ en une partie contenant des vortex et une sans vortex nous a donc permis de passer, dans l'expression de la fonction de partition, d'une intégrale sur ces deux composantes à une intégrale sur le champ dual sans vortex et une somme sur toutes les configurations possibles de vortex (un vortex de charge 2π au site 1 et rien ailleurs, un vortex de charge -2π , etc). Après avoir effectué cette somme et fait un changement d'échelle du temps imaginaire τ nous arrivons à l'action finale

$$S[\tilde{\Phi}] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2} K (\vec{\nabla} \tilde{\Phi})^2 + g_1 \cos \left(2\pi \left[\tilde{\Phi} + \frac{S-m}{a} x \right] \right) \right\}, \quad (\text{II.40})$$

avec $K = 1/\sqrt{\lambda_\tau \lambda_x}$ et g_1 est une constante dont la valeur n'a pas d'importance puisqu'elle ne joue pas de rôle dans l'analyse de ce terme par le groupe de renormalisation.

Cette forme de l'action va nous permettre de comprendre des propriétés de basse énergie de la chaîne de spins. Avant de l'analyser plus précisément, nous pouvons faire deux remarques. Tout d'abord, cette action est identique à celle obtenue par bosonisation [36, 147]. Cependant, la bosonisation est en principe valable pour les spins $1/2$, tandis qu'ici nous n'avons à aucun moment dû restreindre les valeurs possibles de S . Néanmoins, il ne faut pas oublier que notre point de départ étant classique, cette méthode semi-classique est mieux adaptée aux grands spins. Il reste néanmoins le fait que la phase de Berry, qui est la quantité déterminante sur le comportement du système en ce qui concerne les plateaux d'aimantation, est une quantité topologique. Nous espérons donc que les conclusions obtenues seront aussi valides pour de plus petites valeurs de S . Ce ne sera par contre pas le cas pour les paramètres de la théorie comme λ_τ et λ_x , qui seront eux de moins en moins précis quand nous nous rapprocherons du cas le plus quantique $S = 1/2$. Nous pouvons aussi noter que, malgré le passage au continu et les transformations successives, nous gardons une trace du fait que le modèle de départ est défini sur un réseau avec la présence de la constante a .

Nous avons obtenu une action effective constituée d'un terme gaussien et d'une perturbation par un terme en cosinus. Il s'agit en fait de l'action bien connue du modèle de sine-Gordon [148] en (1+1) dimensions, avec le terme de phase de Berry qui se traduit par une modulation spatiale $2\pi(S-m)x/a$ dans le cosinus. Nous voyons que si $(S-m) \notin \mathbb{Z}$, ce cosinus disparaît lors de l'intégration le long de la chaîne par interférences destructives (nous rappelons qu'initialement $x = na$). Il reste alors un simple modèle gaussien sans masse dont les excitations (magnétiques pour nous) sont non-gappées et il n'y aura donc pas de plateau d'aimantation. Par contre, si

$$(S-m) \in \mathbb{Z}, \quad (\text{II.41})$$

nous retrouvons le modèle de sine-Gordon sans la modulation, et nous savons alors qu'un gap peut s'ouvrir [148], conduisant ainsi à l'apparition de plateaux dans la courbe d'aimantation. Par exemple, cette relation nous dit que pour des spins $S = 3/2$ nous pouvons nous attendre à observer un plateau pour une aimantation moyenne $m = 1/2$ par spin, c'est-à-dire à $1/3$ de la valeur de saturation. Pour être plus précis, l'analyse par le groupe de renormalisation de la perturbation en cosinus nous dit que sa simple présence n'est pas suffisante pour créer un gap dans le spectre de basse énergie. Il faut pour cela que la dimension Δ de cet opérateur soit inférieure à 2. Elle est donnée par

$$\Delta = \frac{\pi}{K} = \frac{\pi}{2} \sqrt{(S^2 - m^2)}. \quad (\text{II.42})$$

Il ne faut cependant pas accorder trop d'importance à cette valeur. En effet, les paramètres utilisés ici pour la calculer ne sont pas ceux d'un modèle microscopique défini originellement sur un réseau, mais sont obtenus après passage au continu et intégration de certains degrés de liberté. C'est vrai de manière générale pour les théories des champs. Il faut voir les valeurs calculées comme des indications qualitatives. En particulier, il est bien connu que le modèle (II.20) pour spin-1/2 par exemple ne présente pas de plateau d'aimantation.

Pour conclure, il est important de discuter en termes plus physiques quel est le rôle de la phase de Berry. Pour cela, revenons à l'action (II.32). Si nous oublions dans un premier temps sa présence, il ne reste dans l'action qu'un terme $(\vec{\nabla}\varphi)^2/K$. En considérant la variable de temps imaginaire τ comme la variable d'espace y , il s'agit là de l'action du modèle XY classique à deux dimensions (ou modèle $O(2)$), avec la raideur K qui joue le rôle de la température. Il est bien connu qu'il existe pour ce modèle une température de transition T_{BKT} telle que pour $T < T_{\text{BKT}}$ le système est dans une phase de quasi-ordre à longue portée avec des fonctions de corrélation qui décroissent en loi de puissance, et pour $T > T_{\text{BKT}}$ le système développe une longueur de corrélation finie (et donc un gap s'ouvre) et les corrélations décroissent exponentiellement vers zero. Dans cette transition, dite de Kosterlitz-Thouless (KT) [149], le régime de haute température correspond à une prolifération des vortex, tandis qu'à basse température leur absence est énergétiquement favorisée. Après avoir effectué la transformation de dualité, l'effet de la phase de Berry sur ce scénario devient ainsi clair. Pour des valeurs génériques de $(S - m)$, elle va en fait « protéger » le système contre la prolifération des vortex, puisque le cosinus dans l'action duale disparaît et aucun gap ne peut s'ouvrir. Seul le régime de basse température est alors accessible. Par contre, lorsque la condition (II.41) est satisfaite, nous retrouvons exactement la situation du modèle XY. En accord avec l'expression (II.42) de la dimension de l'opérateur cosinus, pour des petites valeurs de K (basse température) il n'y aura pas de plateau, puis pour K suffisamment large (haute température) un gap s'ouvrira à la transition BKT, permettant ainsi à un plateau d'apparaître.

En utilisant une méthode d'intégrale de chemin, il est donc possible de redériver la condition obtenue par OYA, qui prédit que des plateaux d'aimantation ne peuvent exister qu'à certaines valeurs bien précises, cette condition étant elle-même une extension du théorème LSM [35]. L'interprétation physique est alors transparente.

3.1.3 Application au tube de spin triangulaire

Après avoir mis en application le formalisme d'intégrale de chemin à un cas simple, nous allons maintenant étudier le modèle de Heisenberg sous champ pour le tube de spin triangulaire simple.

Configuration classique

De la même façon que pour la chaîne de spins, la première étape consiste à trouver la configuration classique de basse énergie. Le cas du tube triangulaire n'étant a priori pas aussi trivial que celui de la chaîne, pour comprendre quelle va être cette configuration nous allons partir d'une limite bien connue. Nous avons vu en effet que dans le cas de triangles découplés et sans champ magnétique, le Hamiltonien du système s'exprime comme le carré du spin total (Cf. Equation II.5). En dérivant par rapport à \vec{S} , il vient la condition d'énergie minimale $\vec{S} = \vec{0}$. L'unique manière de remplir cette condition est de mettre les trois spins dans un plan arbitrairement choisi avec des angles de 120° entre eux.

En présence d'un champ magnétique \vec{h} , le Hamiltonien d'une plaquette triangulaire s'exprime toujours en fonction du spin total, et nous arrivons à la condition $\vec{S} = \vec{h}$ pour minimiser l'énergie. Plusieurs configurations dégénérées sont alors possibles (Figure II.9) [150]. Une d'entre elles est la

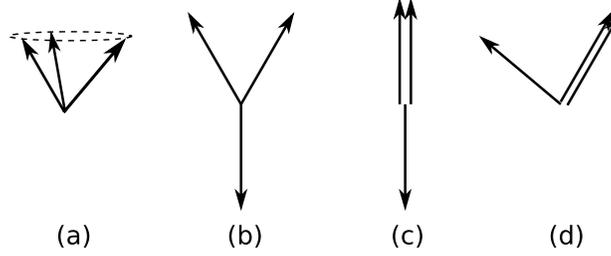


FIGURE II.9 – Configurations classiques dégénérées pour des spins sur un triangle en présence d'un champ magnétique h . La configuration « parapluie » (a) est en compétition avec les configurations (b), (c) et (d) qui se succèdent lorsqu'on augmente la valeur du champ. Lorsque l'on couple les triangles, la configuration de basse énergie va être celle de type « parapluie », avec un ordre à $k_{\parallel} = \pi$ dans le plan.

configuration « parapluie » où les trois spins forment le même angle par rapport à l'axe du champ, et leurs projections dans le plan perpendiculaire au champ sont à 120° les unes des autres. Il s'agit de la même solution qu'à champ nul, mais partiellement polarisée par le champ. Cette solution existe jusqu'à la saturation. Une autre classe de solutions va dépendre plus fortement du champ. A bas champ, nous trouvons une disposition en forme de Y : un spin est anti-colinéaire par rapport au champ et les deux autres partiellement polarisés. Cette solution existe jusqu'au point particulier $h = 3SJ_{\parallel}$ où deux spins sont complètement polarisés et le troisième anti-colinéaire. Pour des champs plus élevés et jusqu'à la saturation, les trois spins sont partiellement polarisés, deux d'entre eux formant le même angle avec l'axe du champ. Ces différentes configurations sont dégénérées dans le cas d'un triangle isolé, mais lorsque nous rajoutons le couplage longitudinal, un simple calcul sur deux triangles permet de montrer que la configuration sélectionnée va être celle du parapluie. La configuration classique montre alors une périodicité de deux triangles, c'est-à-dire un ordre antiferromagnétique à $k_{\parallel} = \pi$, avec une rotation des trois spins de π autour du champ d'un triangle à l'autre pour satisfaire au maximum le couplage J_{\parallel} . Nous pouvons ainsi paramétrer la solution classique comme

$$\vec{S}_{\alpha,j} = S \begin{pmatrix} (-1)^j \sin(\theta^{(0)}) \cos(\varphi_{\alpha}^{(0)}) \\ (-1)^j \sin(\theta^{(0)}) \sin(\varphi_{\alpha}^{(0)}) \\ \cos(\theta^{(0)}) \end{pmatrix}, \quad (\text{II.43})$$

où $\cos(\theta^{(0)}) = \frac{h}{S(3J_{\perp} + 4J_{\parallel})}$ ne dépend pas du site et $\varphi_{\alpha}^{(0)} = (\alpha - 1)2\pi/3$.

Nous allons voir par la suite que le choix de la paramétrisation n'est pas anodin. Il est notamment utile de discuter les symétries de cette configuration classique. Cet état brise la symétrie $U(1)$ de rotation autour de l'axe z (ajout d'une même constante à tous les $\varphi_{\alpha}^{(0)}$), les translations de un site le long des chaînes ainsi que la transformation de parité sur un triangle (permutation des sites 2 et 3). Cette dernière symétrie en particulier va jouer un rôle important dans ce système et est liée au degré de liberté non magnétique de chiralité. Si nous revenons à l'opérateur de chiralité (II.3) introduit précédemment, nous voyons que sa valeur pour la configuration classique (II.43) est non nulle car nous obtenons $\chi_j \propto \sum_{\alpha} \sin((\varphi_{\alpha}^{(0)} - \varphi_{\alpha+1}^{(0)})/2)$. Cela veut dire que l'écriture de la configuration classique force à faire un choix sur la valeur de $\varphi_{\alpha}^{(0)} - \varphi_{\alpha+1}^{(0)} = \pm 2\pi/3$, qui fixe alors le signe du paramètre d'ordre. La configuration classique brise donc la symétrie \mathbb{Z}_2 associée à la parité. De plus, cela veut dire que classiquement la chiralité est ordonnée, et la question se pose alors de savoir si cet ordre va survivre aux

fluctuations quantiques. Ces différents points seront discutés dans l'analyse de l'action ainsi qu'après avoir étudié le tube de spin dans l'approche de couplage fort.

Action de basse énergie

Une fois la configuration classique de basse énergie connue, nous procédons comme précédemment en rajoutant les fluctuations quantiques. Nous autorisons les petites déviations à l'équilibre selon $\delta\theta_{\alpha,j}$ et $\varphi_{\alpha,j}$ en écrivant

$$\begin{cases} \theta^{(0)} \rightarrow \theta_{\alpha,j} = \theta^{(0)} + \delta\theta_{\alpha,j}, \\ \varphi_{\alpha}^{(0)} = (\alpha - 1)\frac{2\pi}{3} \rightarrow (\alpha - 1)\frac{2\pi}{3} + \varphi_{\alpha,j}. \end{cases} \quad (\text{II.44})$$

Le calcul des crochets de Poisson ne présente pas de différence avec celui de la chaîne (nous avons simplement rajouté des constantes aux variables angulaires $\varphi_{\alpha,j}$), et nous écrivons

$$\begin{aligned} n_{\alpha,j}^{\pm} &\approx (-1)^j e^{\pm i[(\alpha-1)\frac{2\pi}{3} + \varphi_{\alpha,j}]} \left[\sin(\theta_0) - \frac{m}{S^2 \sin(\theta_0)} \Pi_{\alpha,j} - \frac{1}{2} \frac{S^2}{S^2 - m^2} \frac{1}{S^2 \sin(\theta_0)} \Pi_{\alpha,j}^2 \right], \\ n_{\alpha,j}^z &\approx \cos(\theta_0) + \frac{\Pi_{\alpha,j}}{S}. \end{aligned} \quad (\text{II.45})$$

Il faut ensuite exprimer le Hamiltonien en fonction de ces nouvelles variables. La partie H_{\parallel} , correspondant simplement à trois chaînes découplées, a déjà été traitée dans l'exemple de la chaîne de Heisenberg. Cela nous donne, après oubli des constantes et des termes de bords,

$$H_{\parallel} = J_{\parallel} \sum_{\alpha=1}^3 \int dx \left\{ \frac{1}{2} a (S^2 - m^2) (\partial_x \varphi_{\alpha})^2 + 2a \Pi_{\alpha}^2 + 4m \Pi_{\alpha} \right\}, \quad (\text{II.46})$$

avec toujours $m = S \cos(\theta^{(0)})$. Puis nous procédons de la même manière pour les autres termes du Hamiltonien H_{\perp} et H_h . Nous conservons les termes jusqu'à l'ordre deux en Π_{α} et φ_{α} puis passons à la limite continue, ce qui conduit à

$$\begin{aligned} H_{\perp} = J_{\perp} \int dx \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \frac{1}{2} a \frac{S^2}{S^2 - m^2} \Pi_{\alpha}^2 + \frac{1}{4} \frac{S^2 - m^2}{a} (\varphi_{\alpha} - \varphi_{\alpha+1})^2 \right. \\ \left. + a \left(1 - \frac{1}{2} \frac{m^2}{S^2 - m^2} \right) \Pi_{\alpha} \Pi_{\alpha+1} - \frac{\sqrt{3}}{2} m \varphi_{\alpha} (\Pi_{\alpha+1} - \Pi_{\alpha-1}) + 3m \Pi_{\alpha} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{II.47})$$

et

$$H_h = -h \sum_{\alpha=1}^3 \int dx \Pi_{\alpha}. \quad (\text{II.48})$$

Nous voyons sur l'équation (II.47) que le Hamiltonien d'interaction entre les chaînes introduit un couplage entre les champs φ_{α} et Π_{α} , c'est-à-dire entre les fluctuations transverses au champ et les fluctuations longitudinales (variation de la colatitude). Ceci est à comparer au cas de la chaîne isolée où elles sont découplées. Ces termes sont en fait caractéristiques d'une configuration classique non coplanaire, comme la configuration parapluie dans ce cas précis. En rassemblant les trois parties, les termes linéaires s'annulent de par la condition d'équilibre et en intégrant sur le temps imaginaire nous

arrivons à l'action du Hamiltonien

$$\begin{aligned}
 S_H[\{\Pi_\alpha\}, \{\varphi_\alpha\}] = \int d\tau dx \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \frac{1}{2} a J_{\parallel} (S^2 - m^2) (\partial_x \varphi_\alpha)^2 + a \left(2J_{\parallel} + \frac{1}{2} J_{\perp} \frac{S^2}{S^2 - m^2} \right) \Pi_\alpha^2 \right. \\
 \left. + \frac{1}{4} J_{\perp} \frac{S^2 - m^2}{a} (\varphi_\alpha - \varphi_{\alpha+1})^2 + a J_{\perp} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{m^2}{S^2 - m^2} \right) \Pi_\alpha \Pi_{\alpha+1} \right. \\
 \left. - \frac{\sqrt{3}}{2} m J_{\perp} \Pi_\alpha (\varphi_{\alpha-1} - \varphi_{\alpha+1}) \right\}. \quad (\text{II.49})
 \end{aligned}$$

Pour la contribution venant de la phase de Berry, le fait d'avoir couplé les 3 chaînes n'apporte évidemment pas de changement, et l'action est simplement la somme des actions pour chaque chaîne

$$S_{BP}[\{\Pi_\alpha\}, \{\varphi_\alpha\}] = i \sum_{\alpha=1}^3 \int d\tau dx \left\{ \left(\frac{S - m}{a} \right) \partial_\tau \varphi_\alpha - \Pi_\alpha \partial_\tau \varphi_\alpha \right\}. \quad (\text{II.50})$$

Dans l'action totale $S = S_H + S_{BP}$, la partie sur les Π_α peut être diagonalisée en effectuant la transformation $\vec{\tilde{\Pi}} = U \vec{\Pi}$, où

$$\vec{\tilde{\Pi}} = \begin{pmatrix} \tilde{\Pi}_1 \\ \tilde{\Pi}_2 \\ \tilde{\Pi}_3 \end{pmatrix}, \quad \vec{\Pi} = \begin{pmatrix} \Pi_1 \\ \Pi_2 \\ \Pi_3 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}. \quad (\text{II.51})$$

Pour comprendre le sens de cette transformation, il suffit de savoir qu'il s'agit en fait de la version orthogonalisée de la transformation où nous aurions

$$U = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.52})$$

c'est-à-dire que nous nous donnons une combinaison symétrique des 3 champs π_α pour donner le champ ϕ_s , puis nous choisissons deux des trois possibilités de définir deux nouveaux champs comme combinaisons antisymétriques de deux champs π_α . Nous allons également appliquer cette transformation aux variables angulaires selon $\vec{\phi} = U \vec{\varphi}$. Avec ces changements de variables et après intégration gaussienne, l'action se réécrit

$$\begin{aligned}
 S[\{\phi_\alpha\}] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2} \lambda_\tau^{(1,2)} [(\partial_\tau \phi_1)^2 + (\partial_\tau \phi_2)^2] + \frac{1}{2} \lambda_x [(\partial_x \phi_1)^2 + (\partial_x \phi_2)^2] \right. \\
 \left. + M^2 (\phi_1^2 + \phi_2^2) - i\mu (\phi_1 \partial_\tau \phi_2 - \phi_2 \partial_\tau \phi_1) \right. \\
 \left. + \frac{1}{2} \lambda_\tau^{(s)} (\partial_\tau \phi_s)^2 + \frac{1}{2} \lambda_x (\partial_x \phi_s)^2 + i \frac{S - m}{a} 3 \partial_\tau \phi_s \right\}, \quad (\text{II.53})
 \end{aligned}$$

avec les constantes suivantes

$$\begin{aligned}
 \lambda_\tau^{(1,2)} &= \frac{1}{a \left(4J_{\parallel} + \frac{3}{2} J_{\perp} \frac{m^2}{S^2 - m^2} \right)}, \quad \lambda_\tau^{(s)} = \frac{3}{a(4J_{\parallel} + 3J_{\perp})}, \\
 \lambda_x^{(1,2)} &= a J_{\parallel} (S^2 - m^2), \quad \lambda_x^{(s)} = 3a J_{\parallel} (S^2 - m^2), \\
 M^2 &= 3J_{\parallel} J_{\perp} \frac{S^2 - m^2}{a \left(4J_{\parallel} + \frac{3}{2} J_{\perp} \frac{m^2}{S^2 - m^2} \right)}, \\
 \mu &= \frac{3}{2} J_{\perp} \frac{m}{a \left(4J_{\parallel} + \frac{3}{2} J_{\perp} \frac{m^2}{S^2 - m^2} \right)}, \quad (\text{II.54})
 \end{aligned}$$

et nous avons redéfini le champ symétrique par $\phi_s \rightarrow \phi_s/\sqrt{3}$. Nous pouvons voir que cette redéfinition change le coefficient du terme de phase de Berry, et sa justification sera discutée plus bas.

Nous voyons que dans cette action, le champ symétrique ϕ_s est découplé des champs ϕ_1 et ϕ_2 et nous pouvons séparer l'action selon $S[\{\phi_\alpha\}] = S_{ch}[\phi_1, \phi_2] + S_s[\phi_s]$. Nous allons maintenant étudier séparément ces deux parties. Nous verrons que la partie contenant les deux champs ϕ_1 et ϕ_2 va nous renseigner sur le comportement du degré de liberté non magnétique de chiralité. L'autre terme concernera lui la condition des plateaux.

Action du champ symétrique et plateaux d'aimantation

Nous remarquons que l'action S_s pour le champ symétrique obtenue dans l'équation (II.53) a la même forme que l'action dérivée précédemment dans le cas de la chaîne de Heisenberg. Nous rappelons que le terme de phase $i\partial_\tau\phi_s$ vient directement de la contribution de la phase de Berry à l'action. Nous pouvons donc répéter l'analyse effectuée précédemment. En suivant les mêmes étapes que dans la Section 3.1.2 sur la chaîne de spins pour la transformation de dualité, nous arrivons au final à l'action

$$S[\tilde{\Phi}_s] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2} K_s (\vec{\nabla} \tilde{\Phi}_s)^2 + g_1 \cos \left(2\pi \left[\tilde{\Phi}_s + 3 \frac{S-m}{a} x \right] \right) \right\}, \quad (\text{II.55})$$

où $\tilde{\Phi}_s$ est le champ dual, $K_s = 1/\sqrt{\lambda_\tau^{(s)}\lambda_x^{(s)}}$ et g_1 est là encore une constante sans importance. La seule différence avec l'action duale de la chaîne (Eq. (II.40)) vient de la présence d'un facteur 3 dans la modulation du cosinus. La discussion faite pour la chaîne reste donc valable, excepté que les valeurs auxquelles peuvent apparaître des plateaux sont maintenant données par

$$3(S-m) \in \mathbb{Z}. \quad (\text{II.56})$$

Par exemple, pour le cas du spin 3/2 que nous allons étudier numériquement par la suite, cette condition prévoit des plateaux pour des aimantations par spin $m = 1/6, 1/2, 5/6, 7/6$. La dimension de l'opérateur cosinus est

$$\Delta = \frac{\pi}{K_s} = \pi \sqrt{\frac{3J_{\parallel}(S^2 - m^2)}{J_{\perp} \left(1 + \frac{4J_{\parallel}}{3J_{\perp}}\right)}}. \quad (\text{II.57})$$

En traçant sur la Figure II.10 cette expression pour le cas du spin 3/2, nous nous attendons à trouver des plateaux pour des valeurs de J_{\parallel}/J_{\perp} de l'ordre de 0,1, c'est-à-dire dans le régime de couplage fort. Ce n'est pas surprenant puisque nous savons que les plateaux existent pour des triangles découplés.

Nous allons maintenant terminer cette discussion par deux remarques. Premièrement, il est utile de remarquer que la condition (II.56) ne prévoit pas l'existence du plateau $m = 0$, ou gap de spin, qui est connue numériquement par DMRG pour $S = 1/2$ [109] et $S = 3/2$ [119]. En fait, le problème du plateau $m = 0$ correspond au tube de spin sans champ magnétique, qui possède alors une symétrie $O(3)$ au lieu de $U(1)$ dans notre cas. Une approche différente est alors nécessaire, et cela se fait grâce au modèle sigma non-linéaire [12, 123]. Le second commentaire concerne lui le facteur 3 que nous avons trouvé pour le terme $(S-m)$. Il serait possible de croire à première vue que ce facteur est arbitraire, venant à la fois du choix de la transformation (II.51) puis de la redéfinition $\phi_s \rightarrow \phi_s/\sqrt{3}$ que nous avons effectuée. Cette dernière est en fait nécessaire pour obtenir un champ ϕ_s qui soit bien 2π -périodique. En effet, les variables originelles φ_α sont des angles et satisfont donc $\varphi_\alpha(\tau = \beta) = \varphi_\alpha(\tau = 0) + 2\pi n_\alpha$ et la même condition pour les conditions aux bords spatiales en $x = 0$ et $x = L$. Pour les nouvelles variables ϕ_α , cela donne des conditions similaires, par exemple le champ antisymétrique ϕ_1 satisfait

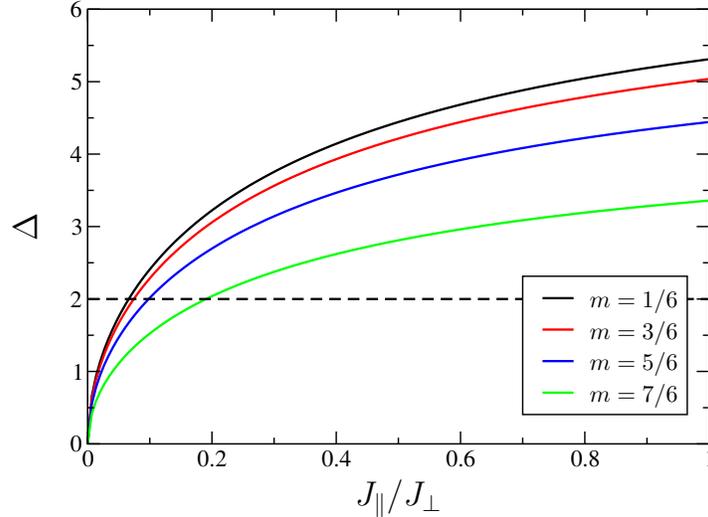


FIGURE II.10 – Dimension de l’opérateur de perturbation en cosinus de l’action (II.55) en fonction de J_{\parallel}/J_{\perp} aux valeurs de m pouvant mener à un plateau. La perturbation est pertinente et ouvre un gap dans le spectre si $\Delta < 2$, et non pertinente si $\Delta > 2$. Nous nous attendons à ce que les plateaux disparaissent pour $J_{\parallel}/J_{\perp} \gtrsim 0, 1$.

$\phi_1(\beta) = \phi_1(0) + 2\pi(n_2 - n_1)/\sqrt{2}$. Cependant, la présence de termes de masse dans l’action S_{ch} pour ϕ_1 et ϕ_2 nous dit que ces champs devraient être petits, et en particulier ne pas avoir d’enroulement, *i.e.* $n_1 = n_2$. Le même raisonnement s’applique pour ϕ_2 et donne $n_1 = n_3$. Il reste pour ϕ_s une périodicité $\phi_s(\beta) = \phi_s(0) + 2\pi\sqrt{3}n_3$, et donc la redéfinition est justifiée pour retrouver la périodicité de 2π .

Degré de liberté de chiralité

Nous allons maintenant étudier la partie S_{ch} de l’action (II.53) pour les champs ϕ_1 et ϕ_2 . Nous présentons ci-dessous une analyse qui nous permet de retrouver presque toutes les phases potentiellement observables.

Pour commencer, il est commode d’introduire les deux champs complexes conjugués $\Psi = \phi_1 + i\phi_2$ and $\Psi^* = \phi_1 - i\phi_2$, et, après redéfinition du temps imaginaire l’action se réécrit

$$S[\Psi, \Psi^*] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2} K |\vec{\nabla} \Psi|^2 + \tilde{M}^2 |\Psi|^2 - \frac{\mu}{2} (\Psi^* \partial_{\tau} \Psi - \Psi \partial_{\tau} \Psi^*) + \dots \right\}, \quad (\text{II.58})$$

avec $K = \sqrt{\lambda_{\tau}^{(1,2)} \lambda_x^{(1,2)}}$ et $\tilde{M}^2 = M^2 \sqrt{\frac{\lambda_{\tau}^{(1,2)}}{\lambda_x^{(1,2)}}$. Les trois points servent à rappeler que nous sommes en train de travailler dans une approximation gaussienne, et que des termes de plus hauts degrés sont attendus dans une action plus générale. A ce stade, un terme de masse est présent, et il serait logique de conclure que les excitations correspondantes sont de haute énergie et peuvent être intégrées dans la fonction de partition. Nous verrons plus loin, dans l’approche de couplage fort, que plusieurs phases sont en fait attendues pour la chiralité, et notamment une phase non gappée dans la limite $J_{\parallel}/J_{\perp} \rightarrow 0$. Nous pensons alors que le terme de dérivée $\mu (\Psi^* \partial_{\tau} \Psi - \Psi \partial_{\tau} \Psi^*)$ peut avoir des effets importants sur le comportement de Ψ et permet d’avoir en particulier une phase critique. Pour aller au-delà de l’approximation gaussienne, nous allons aborder le problème en écrivant une action plus générale incluant des termes de plus hauts degrés, qui sera contrainte par les symétries du modèle.

En revenant aux variables initiales φ_α définies en (II.44), il est instructif de réécrire le champ Ψ comme $\Psi = i\frac{2}{\sqrt{6}}(\varphi_3 + \omega\varphi_1 + \omega^2\varphi_2)$ où $\omega = e^{i\frac{2\pi}{3}}$. La comparaison avec l'expression des états chiraux donnée en (II.6) confirme que ces deux champs représentent bien le degré de liberté de chiralité. Au niveau des symétries, une permutation circulaire des sites du triangle correspond donc à ajouter un terme de phase au champ Ψ selon $\Psi \rightarrow \omega\Psi$. L'opération de parité ne doit pas être prise en compte puisque, comme discuté précédemment, lors du choix de la configuration classique nous l'avons explicitement brisée. L'action la plus générale est alors

$$S[\Psi, \Psi^*] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2}K|\vec{\nabla}\Psi|^2 - \mu(\Psi^*\partial_\tau\Psi - \Psi\partial_\tau\Psi^*) + \beta\Psi^3 + \beta^*\Psi^{*3} + f(|\Psi|, \phi_s) + \dots \right\}. \quad (\text{II.59})$$

En écrivant $\Psi = \rho e^{i\theta}$, nous voyons que la seule variable qui puisse être non gappée est la phase θ , et nous trouvons

$$S[\theta] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2}\tilde{K}|\vec{\nabla}\theta|^2 + \lambda_3\cos(3\theta) + \lambda_6\cos(6\theta) + i\tilde{\mu}\partial_\tau\theta \right\}, \quad (\text{II.60})$$

où \tilde{K} , λ_3 , λ_6 et $\tilde{\mu}$ sont des paramètres phénoménologiques. Le point important est de remarquer que le terme complexe $i\tilde{\mu}\partial_\tau\theta$ interdit la vorticit  (voir la discussion dans la partie sur la cha ne de Heisenberg). D'apr s cette action quatre phases sont possibles :

i) Quand la raideur \tilde{K} du champ θ est assez grande, les dimensions $\delta_{3,6} \sim 1/\tilde{K}$ des deux op rateurs cosinus sont inf rieures   2 et ceux-ci sont alors pertinents et $\langle\Psi\rangle \neq 0$. Nous allons supposer ici que λ_6 a le m me signe que λ_3 , et dans ce cas il y a trois valeurs  quivalentes de θ qui minimisent les cosinus. Deux des trois champs φ_α ont alors la m me valeur moyenne. Nous allons examiner quelles sont les propri t s de cette phase. Pour cela, nous revenons   l' quation (II.49). En utilisant les champs Ψ et Ψ^* , le dernier terme $\sum_\alpha \Pi_\alpha(\varphi_{\alpha-1} - \varphi_{\alpha+1})$ se r  crit comme $\Pi\Psi^* - \Pi^*\Psi$, o  les champs complexes Π and Π^* ont la m me d finition que les champs Ψ et Ψ^* mais par rapport aux champs $\tilde{\Pi}_\alpha$. Donc, avoir $\langle\Psi\rangle \neq 0$ implique $\langle\Pi\rangle \neq 0$. Puisque les variables Π_α sont directement les fluctuations autour de l'aimantation classique m , cela va se traduire par une renormalisation des aimantations classiques de fa on diff rente selon la cha ne. Cette variation est  gale pour deux cha nes et diff rente pour la troisi me, tout en conservant une aimantation totale inchang e. L' tat fondamental est donc trois fois d g n r . Notons encore que cela se fait de mani re homog ne le long des cha nes, c'est- -dire que la phase est   $k_\parallel = 0$. Nous appelons cette phase le *spin imbalance* sym trique.

ii) Dans ce deuxi me cas, les deux op rateurs sont toujours pertinents mais cette fois λ_6 a le signe oppos    λ_3 . De mani re similaire   la phase *i)*, nous trouvons un spin imbalance homog ne, mais cette fois les trois cha nes ont des aimantations diff rentes. La d g n rescence de cet  tat est six. Nous nommons cette phase le *spin imbalance* asym trique. Remarquons aussi que la transition entre cette phase et le spin *spin imbalance*, dont les d g n rescences sont respectivement de six et trois, correspond au mod le du double sine-Gordon et appartient donc   la classe d'universalit  du mod le d'Ising [151].

iii) Quand la raideur \tilde{K} est assez petite, les deux op rateurs ne sont plus pertinents et peuvent  tre n glig s. Dans ce cas, nous pouvons appliquer la m me transformation de dualit  que pour l'action du champ sym trique. Cela nous donne une action avec deux termes $(1/\tilde{K})(\vec{\nabla}\Theta)^2$ et $g\cos(2\pi(\Theta + \tilde{\mu}x))$, o  Θ est le champ dual et $\tilde{\mu}$ une phase qui va d pendre a priori des param tres microscopiques du mod le. Donc, pour une phase $\tilde{\mu}$ g n rique, le cosinus dispara tra alors par interf rences destructives, comme dans le cas o  $3(S - m) \notin \mathbb{Z}$. Nous obtenons au final un simple mod le gaussien dont les fonctions de corr lations du champ θ d croissent en lois de puissance, et qui est caract ris  par $\langle\Psi\rangle = 0$. La th orie conforme sous-jacente a une charge centrale $c = 1$ [148].

iv) Finalement dans cette quatri me phase $\langle\Psi\rangle = 0$ et les fonctions de corr lations du champ θ sont   courte port e. Il faut ici faire un commentaire sur l'action (II.60). Le dernier terme complexe

a, comme la phase de Berry, pour effet de supprimer les configurations à vortex du champ θ , et est responsable de la phase critique *iii*). C'est le même scénario qui a expliqué que le champ ϕ_s est non-gappé en général sauf pour certaines valeurs particulières de l'aimantation. Ici, tant que le paramètre μ n'a pas de valeur particulière comme peut l'être $S - m$, nous avons dit que l'opérateur cosinus pour le champ dual disparaît. Donc, la transition de la phase *iii*) à cette phase à courte portée ne se fait en principe pas par une transition KT. Ce serait plutôt parce que $\tilde{K} \rightarrow 0$, de la même manière qu'une chaîne XXZ entre dans la phase ferromagnétique quand l'anisotropie devient suffisamment négative (voir Section 3.2.2). Une telle phase a d'ailleurs été trouvée pour $S = 1/2$ dans le régime de chaînes faiblement couplées [117].

Cette analyse phénoménologique de l'action pour la chiralité nous a donc permis de prédire plusieurs phases différentes. Nous verrons dans la Section 3.3 consacrée aux résultats numériques que toutes ces phases sont observées, soit pour ce modèle du tube de spin simple, soit pour le tube déformé que nous étudierons par la suite.

3.2 Limite de couplage fort : modèles effectifs et chiralité

Dans la Section 3.1, nous avons étudié le modèle (II.1) par une méthode semi-classique pour un spin- S quelconque et indépendamment des valeurs des couplages J_{\parallel} et J_{\perp} du Hamiltonien. Nous allons maintenant utiliser une approche différente, purement quantique, en considérant la limite de couplage fort $J_{\parallel}/J_{\perp} \rightarrow 0$. Nous allons voir que pour un spin S demi-entier, les plateaux d'aimantation correspondant aux plus hautes et aux plus basses valeurs de m , c'est-à-dire $m = 1/6$ et $m = S - 1/3$, peuvent tous deux être décrits en termes d'un degré de liberté de chiralité. Utilisant la théorie des perturbations, nous dériverons pour cela des Hamiltoniens effectifs à même de décrire correctement les différentes phases du système.

3.2.1 Hamiltonien effectif au premier ordre

Nous commençons par nous placer dans le cas simple $S = 1/2$ dans le régime de couplage fort et considérons la limite $J_{\parallel} = 0$ où les triangles sont découplés. Ce problème a été traité dans la Section 1.4. Nous allons maintenant garder uniquement les quatre états dégénérés (II.6) et appliquer la théorie des perturbations dégénérées pour dériver un modèle effectif qui décrit la physique de basse énergie. Au premier ordre, le Hamiltonien effectif est [109]

$$H_{\text{eff}}^{(1)} = \frac{J_{\parallel}}{3} \sum_j [1 + 4(\tau_j^+ \tau_{j+1}^- + \tau_j^- \tau_{j+1}^+)] \vec{T}_j \cdot \vec{T}_{j+1} - h \sum_j T_j^z, \quad (\text{II.61})$$

où \vec{T}_j est un opérateur de spin-1/2 représentant le spin total du triangle j . Nous avons aussi introduit τ_j^{\pm} l'opérateur de pseudospin-1/2 qui échange les chiralités L et R selon

$$\begin{aligned} \tau^+ | \cdot L \rangle &= 0, & \tau^- | \cdot L \rangle &= | \cdot R \rangle, \\ \tau^+ | \cdot R \rangle &= | \cdot L \rangle, & \tau^- | \cdot R \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (\text{II.62})$$

Par construction, cet Hamiltonien effectif va décrire le système depuis le régime $h = 0$ jusqu'au premier plateau à $m = 1/6$, tout en sachant que sur le plateau il ne reste que les deux états de chiralité ayant $S_{\Delta}^z = 1/2$. Ce modèle a été largement étudié par le passé, à la fois numériquement et analytiquement [108, 109, 110, 115]. Il est connu pour posséder un petit plateau à $m = 0$. Comme nous l'avons dit dans l'introduction de ce chapitre, cela se comprend d'un point de vue physique par

la formation de singulets dans l'état fondamental [109]. Lorsqu'un champ magnétique assez fort est présent, ce gap se ferme et le système entre dans un régime critique où il est décrit par de deux liquides de Luttinger, un pour le degré de liberté magnétique et un pour la chiralité [115]. Finalement, pour un champ magnétique plus élevé, un gap s'ouvre à nouveau pour le degré de liberté magnétique et le système entre dans la phase du plateau d'aimantation à $m = 1/6$. Le degré de liberté de spin du triangle est alors gelé, et nous pouvons conserver uniquement la chiralité dans le modèle effectif, ce qui donne

$$H_{\text{eff}}^{(1)} = \frac{J_{\parallel}}{12} \sum_j [1 + 4(\tau_j^+ \tau_{j+1}^- + \tau_j^- \tau_{j+1}^+)]. \quad (\text{II.63})$$

Nous avons là un modèle XY de spin-1/2, qui peut se décrire en termes de fermions libres après transformation de Jordan-Wigner [152] et est donc exactement soluble. Les excitations de spin sont non-gappées et les corrélations sont algébriques.

Bien que cette analyse soit faite pour $S = 1/2$, nous pouvons facilement voir qu'elle reste valable pour tout spin S demi-entier sur le plateau $m = 1/6$. En effet, le couplage des trois spins d'un triangle en champ nul mène toujours à un état fondamental quatre fois dégénéré fait de deux doublets chiraux, que nous représenterons comme des pseudospins-1/2. Bien que les états aient alors une forme plus compliquée que dans (II.6), nous obtenons un modèle effectif de la même forme que celui donné en (II.61). La seule différence vient d'un changement de la constante (4 précédemment) devant les opérateurs de chiralité. Finalement, sur le plateau le spin total du triangle est polarisé à $+1/2$ et nous terminons encore avec un modèle XY qui s'écrit

$$H_{\text{eff}}^{(1)} = \frac{J_{\parallel}}{12} \sum_j [1 + \alpha(\tau_j^+ \tau_{j+1}^- + \tau_j^- \tau_{j+1}^+)], \quad (\text{II.64})$$

où $\alpha = (2S + 1)^2$.

Comme annoncé précédemment, cette dérivation du plateau $m = 1/6$ s'applique aussi au cas du plus haut plateau d'aimantation $m = S - 1/3$. En inspectant une nouvelle fois la limite $J_{\parallel} = 0$, nous nous apercevons de l'émergence d'un doublet chiral sur ce plateau, avec des états qui ont la même forme qu'en (II.6) après la substitution de \uparrow par S et de \downarrow par $S - 1$:

$$\begin{aligned} |S - 1/3, L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|SS\bar{S}\rangle + \omega|S\bar{S}S\rangle + \omega^{-1}|\bar{S}SS\rangle), \\ |S - 1/3, R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|SS\bar{S}\rangle + \omega^{-1}|S\bar{S}S\rangle + \omega|\bar{S}SS\rangle), \end{aligned} \quad (\text{II.65})$$

où nous avons utilisé \bar{S} pour noter $S - 1$. Là encore, la théorie des perturbations au premier ordre nous donne un modèle effectif XY de la forme (II.64).

3.2.2 Méthode CORE et Hamiltoniens effectifs

Les Hamiltoniens XY dérivés au premier ordre, bien qu'ayant été largement utilisés dans la littérature pour étudier les tubes de spin triangulaires, ne sont cependant pas suffisants pour capturer toutes les phases possibles de la chiralité. En effet, à la fois les simulations numériques et l'intégrale de chemin montrent et prévoient un comportement plus riche et notamment la possibilité d'avoir des transitions de phases sur ces plateaux.

Une façon d'aller au-delà de la perturbation au premier ordre est d'utiliser la méthode de *Contract Renormalization* (CORE) [153, 154]. Il s'agit d'une technique non-perturbative de renormalisation

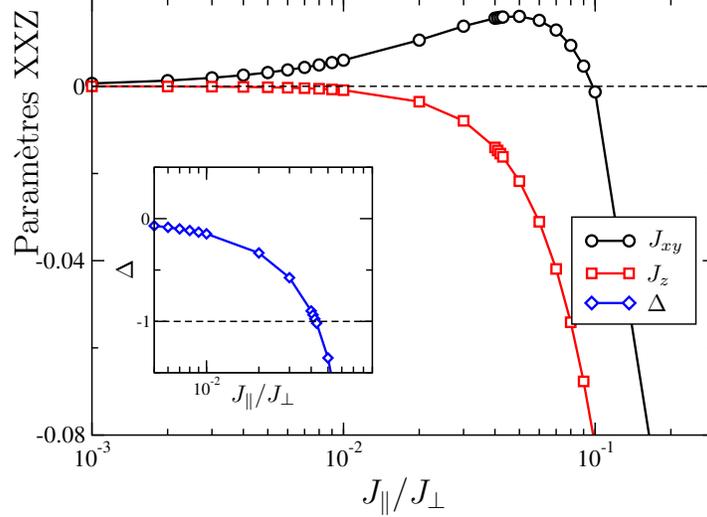


FIGURE II.11 – Valeur des paramètres J_{xy} , J_z et $\Delta = J_z/J_{xy}$ du Hamiltonien XXZ (II.66) calculés par la méthode CORE à portée 2 en fonction de J_{\parallel}/J_{\perp} pour le plateau $m = 7/6$ du tube $S = 3/2$. Bien que le couplage J_{xy} change de signe, seul celui de J_z , négatif, importe. La fenêtre secondaire montre qu’au couplage critique $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,042$ le ratio Δ devient plus petit que -1, ce qui correspond à l’ouverture d’un gap pour les excitations de chiralité et un ordre ferromagnétique pour ce mode non magnétique.

en espace réel pour des systèmes sur réseau, qui permet de calculer numériquement des Hamiltoniens effectifs avec des interactions à longues portées. Cette approche a donné des résultats quantitativement bons dans plusieurs types de systèmes, par exemple dans des modèles antiferromagnétiques en basse dimension [155, 156, 157]. Bien que cette méthode permette de dériver des modèles effectifs avec des blocs élémentaires de tailles arbitrairement grandes et possède ainsi un large domaine d’application, nous allons ici nous limiter à des interactions entre plus proches voisins, *i.e.* nous considérons uniquement deux triangles (CORE-2). Bien que nous manquions ainsi une des phases possibles, dans cette approche extrêmement simple les valeurs de couplages critiques données pour une des transitions de phase sont en excellent accord avec les résultats numériques. Cela constitue également une amélioration par rapport à la perturbation classique au premier ordre, puisque tous les termes entre deux triangles (à deux corps) seront obtenus, indépendamment de leur ordre de grandeur. Plus concrètement, nous obtenons ainsi un Hamiltonien du type XXZ

$$H_{\text{eff}}^{\text{CORE-2}} = \sum_j \left[\frac{J_{xy}}{2} (\tau_j^+ \tau_{j+1}^- + \tau_j^- \tau_{j+1}^+) + J_z \tau_j^z \tau_{j+1}^z \right], \quad (\text{II.66})$$

dont les paramètres sont obtenus numériquement par diagonalisation exacte de deux triangles.

Nous montrons sur la Figure II.11 les valeurs calculées pour les paramètres J_{xy} , J_z et leur rapport $\Delta = J_z/J_{xy}$ dans le cas $S = 3/2$ et $m = 7/6$. Le modèle XXZ étant bien connu [1], nous savons que le paramètre Δ contrôle complètement le comportement du modèle (II.66). Nous voyons que pour des couplages très petits, le système est dans le régime $|\Delta| < 1$, qui correspond à la phase XY de charge centrale $c = 1$, puisque l’anisotropie Δ n’est pas assez forte pour ouvrir un gap. Nous avons aussi vérifié que les valeurs obtenues pour J_{xy} sont en très bon accord avec la théorie des perturbations au premier ordre. Lorsque le rapport J_{\parallel}/J_{\perp} augmente, le couplage négatif J_z diminue et à la valeur critique $J_{\parallel}^h/J_{\perp} = 0,042$ le système entre dans le régime $\Delta < -1$. Cela correspond à une phase gappée

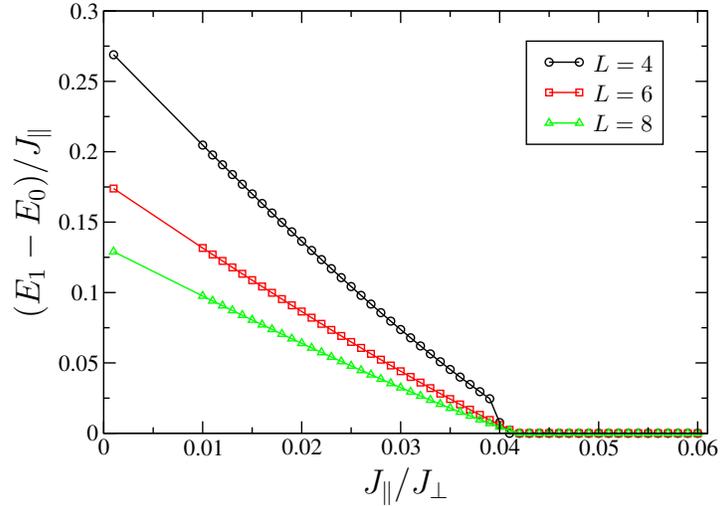


FIGURE II.12 – Différence entre les deux premiers niveaux d'énergie du tube triangulaire simple (II.1), obtenus par diagonalisation exacte, en fonction du couplage J_{\parallel}/J_{\perp} et des tailles $L = 4, 6, 8$. Le gap entre les deux niveaux se ferme pour la valeur critique $J_{\parallel,c} = 0,042J_{\perp}$ avec très peu d'effets de taille finie. Ces deux niveaux d'énergie sont toujours dans le secteur d'impulsion $k_{\parallel} = 0$, ce qui est compatible avec une transition d'une phase de chiralité XY à une phase Ising ferromagnétique en accord avec le modèle effectif (II.66).

Ising ferromagnétique, ou "ferrochiral" dans notre cas, qui est doublement dégénérée et où tous les triangles sont dans le même état de chiralité soit L , soit R : c'est l'ordre classique. La transition de phase quantique est donc une transition de type Ising. Remarquons que le changement de signe de J_{xy} n'est pas important puisque seul celui de J_z , qui reste négatif, est important. Nous pouvons en effet faire une rotation de π autour de l'axe z dans l'espace des spins, qui laisse le modèle invariant à part le changement de J_{xy} en $-J_{xy}$. Nous avons également vérifié par diagonalisation exacte (ED) du modèle du tube de spins pour différentes tailles de systèmes, jusqu'à $L = 10$, qu'il y a un changement dans le spectre proche du couplage critique. Plus précisément, nous observons sur la Figure II.12 qu'à petit J_{\parallel}/J_{\perp} le fondamental est unique et est situé dans le secteur d'impulsion $k_{\parallel} = 0$, puis après le couplage critique le fondamental est deux fois dégénéré, les deux états étant toujours dans le secteur $k_{\parallel} = 0$. Ce scénario et les secteurs d'impulsion sont bien compatibles avec la transition proposée. Pour le plateau $S = 3/2$ et $m = 1/6$ nous avons trouvé le même scénario avec une transition au couplage critique $J_{\parallel,c}^l/J_{\perp} = 0.256$, bien que nous verrons par la suite que dans ce cas-là le plateau disparaît avant cette valeur.

Bien que cette méthode CORE-2 soit extrêmement simple, elle se révèle être suffisante pour le tube de spins, elle nous permet d'obtenir un résultat au-delà de la perturbation au premier ordre. Nous pouvons ainsi proposer de manière qualitative un scénario expliquant l'apparition de phases gappées pour la chiralité. Bien entendu, de manière générale cette approche ne saurait donner des résultats quantitatifs précis puisque les interactions à plus longues portées devraient en principe jouer un rôle. Il s'avère cependant que les résultats numériques par DMRG donneront un couplage critique très proche du 0,042 que nous avons trouvé.

Gardant à l'esprit que nous traitons ici les spins demi-entiers, le fait de ne devoir diagonaliser que deux triangles pour cette méthode fait que nous pouvons aussi traiter le cas de spins plus élevés. Nous

rapporçons dans la Table II.1 les valeurs critiques de couplages $J_{\parallel,c}^l$ et $J_{\parallel,c}^h$, correspondant respectivement au plateau $m = 1/6$ et au plateau $m = S - 1/3$, pour lesquels la méthode CORE prédit une transition vers la phase ferrochirale. Nous constatons que pour les deux plateaux ce couplage critique diminue, et puisqu'en même temps les plateaux doivent eux aussi disparaître de plus en plus vite, il n'est pas évident de savoir si la phase Ising serait effectivement présente. Pour $S = 1/2$ le couplage critique est donné à 0,5, très proche de la valeur 0,496 trouvée par DMRG par Okunishi *et al.* [158], ce qui est encourageant.

	$S = 1/2$	$S = 3/2$	$S = 5/2$	$S = 7/2$	$S = 9/2$
$J_{\parallel,c}^l/J_{\perp}$	0.500	0.256	0.157	0.108	0.079
$J_{\parallel,c}^h/J_{\perp}$	0.500	0.0420	0.0140	0.0071	0.0042

TABLE II.1 – Valeurs critiques $J_{\parallel,c}^l/J_{\perp}$ et $J_{\parallel,c}^h/J_{\perp}$ de la transition dans le modèle effectif pour la chiralité d'une phase XY à une phase Ising ferromagnétique sur le plus bas et le plus haut plateau d'aimantation (lettres supérieures l and h respectivement).

3.2.3 Hamiltoniens effectifs généraux : utilisation des symétries

Bien que l'approche CORE à portée 2 présente une amélioration notable par rapport à la perturbation au premier ordre, nous allons voir que nous manquons malgré tout une phase de faible extension. En effet, Okunishi *et al.* ont dérivé récemment le modèle effectif au deuxième ordre en utilisant la théorie des perturbations pour $S = 1/2$ (qui est en quelque sorte un cas particulier puisqu'il n'y a qu'un seul plateau). A cet ordre, de nouveaux termes apparaissent dans le Hamiltonien effectif, par exemple un terme négatif $\tau_j^z \tau_{j+1}^z$, en accord avec le résultat CORE. Ils ont aussi trouvé un terme à trois corps $\tau_{j-1}^+ \tau_j^+ \tau_{j+1}^+$ qui va lui être responsable de l'apparition d'une phase de *spin imbalance*. Impliquant trois sites, ce terme ne pouvait évidemment pas être obtenu dans notre calcul. Au-delà de la dérivation d'un modèle effectif pour un Hamiltonien et un spin S donnés, nous voulons proposer l'écriture d'un Hamiltonien sur des bases plus générales. Pour cela, nous revenons à l'écriture des états chiraux donnés en (II.6). Le facteur de phase ω n'est rien d'autre que l'impulsion transverse du tube de spins, puisque l'effet des opérateurs τ^{\pm} est simplement de modifier cette impulsion totale de $\pm 2\pi/3$. Dit autrement, la permutation cyclique des trois sites du triangle j correspond à la multiplication de ces opérateurs par un facteur de phase, $\tau_j^{\pm} \rightarrow \omega^{\pm 1} \tau_j^{\pm}$. Par conservation de l'impulsion transverse, ces opérateurs doivent donc être présents dans le Hamiltonien par multiples de trois. L'opérateur τ_j^z est lui inchangé. La seconde symétrie du triangle à prendre en compte est la parité. Appliquant cette symétrie aux états (II.6), nous voyons que cela revient à faire d'une part $\tau_j^z \rightarrow -\tau_j^z$ et, d'autre part, à échanger les opérateurs τ_j^{\pm} . En imposant donc que le Hamiltonien effectif soit invariant par ces transformations, nous obtenons, quelle que soit la valeur de S ou le plateau,

$$\begin{aligned}
 H_{\text{eff}} = \sum_j \left[\frac{J_{xy}}{2} (\tau_j^+ \tau_{j+1}^- + \tau_j^- \tau_{j+1}^+) + J_z \tau_j^z \tau_{j+1}^z + J_3 (\tau_{j-1}^+ \tau_j^+ \tau_{j+1}^+ + \tau_{j-1}^- \tau_j^- \tau_{j+1}^-) \right. \\
 \left. + J_6 (\tau_{j-2}^+ \tau_{j-1}^+ \tau_j^+ \tau_{j+1}^+ \tau_{j+2}^+ \tau_{j+3}^+ + \tau_{j-2}^- \tau_{j-1}^- \tau_j^- \tau_{j+1}^- \tau_{j+2}^- \tau_{j+3}^-) + \dots \right], \quad (\text{II.67})
 \end{aligned}$$

où nous avons ignoré, par exemple, les termes XY entre seconds voisins qui jouent un rôle négligeable. Dans le cas du spin-1/2, les valeurs des paramètres J_{xy} , J_z et J_3 ont été calculées jusqu'au deuxième

ordre en J_{\parallel}/J_{\perp} [158]. Dans ce langage de pseudospin-1/2, la symétrie \mathbb{Z}_2 associée à la chiralité est simplement $\tau^z \rightarrow -\tau^z$, que nous obtenons par exemple par une rotation de π autour de l'axe x . Notons également que ce modèle ne possède pas la symétrie $U(1)$, contrairement aux modèles obtenus en perturbation au premier ordre. Cela signifie que la chiralité n'est pas une quantité conservée. Il est intéressant de faire le lien entre ce modèle et notre analyse semi-classique de la Section 3.1.3. En nous rappelant que dès le départ l'intégrale de chemin brise cette symétrie \mathbb{Z}_2 , cela se traduirait, dans le Hamiltonien (II.67), par placer le pseudospin-1/2 à une aimantation homogène non nulle de façon à avoir $\langle \tau_j^z \rangle \neq 0$. Cela se ferait par l'ajout d'un terme de champ magnétique effectif pour la chiralité $h_{\text{ch}} \tau_j^z$, qui est ici interdit par les symétries.

Pour étudier le modèle (II.67), un outil idéal est la bosonisation, qui est bien adaptée au régime où J_{xy} domine devant les autres couplages. Cette méthode permet de représenter des modèles 1D de fermions ou de spins par des bosons, et nous renvoyons à la référence [1] pour un exposé détaillé. Cela donne le Hamiltonien

$$H_{\text{eff}} = \frac{v}{2} \int dx \left[\frac{1}{2} \kappa (\partial_x \chi)^2 + 2\kappa (\partial_x \tilde{\chi})^2 + \lambda_1 \cos(2\sqrt{2\pi}\chi) + \lambda_2 \cos(6\sqrt{2\pi}\tilde{\chi}) \right], \quad (\text{II.68})$$

où v est la vitesse de Fermi, κ le paramètre de Luttinger et $\tilde{\chi}$ est un champ bosonique dual au champ χ . Tous les paramètres de ce modèle vont ensuite dépendre des détails du Hamiltonien d'origine.

Le premier cosinus est généré par le terme d'Ising $\tau_j^z \tau_{j+1}^z$, tandis que le second cosinus vient du terme à six corps J_6 . Dans la description de bosonisation le terme à trois corps disparaît lors de l'intégration spatiale selon x car possédant un facteur oscillant $(-1)^x$. Le modèle (II.68) est simple à étudier puisque les deux cosinus ne sont pas en compétition. En effet, le premier est pertinent au sens du groupe de renormalisation lorsque $\kappa < 1$ tandis que le second le sera lui pour $\kappa > 9$. Une situation où les deux termes seraient en compétition nécessiterait une analyse plus poussée que seulement calculer la dimension de ces opérateurs. Entre ces deux valeurs de κ , aucun des deux n'est pertinent et le modèle est donc dans la phase critique XY, qu'il faut associer à la phase *iii*) trouvée par l'intégrale de chemin dans la Section 3.1.3. Nous pouvons maintenant discuter le diagramme de phases. Pour $J_{\parallel}/J_{\perp} \rightarrow 0$, nous savons que le modèle (II.67) se réduit à un modèle XY pour lequel $\kappa = 2$. La question est ensuite de savoir comment va évoluer ce paramètre lorsque que J_{\parallel}/J_{\perp} augmente. En fait, nous avons pour cela besoin de connaître le signe de J_z . Puisqu'il est négatif, le modèle va se diriger vers la phase d'Ising ferromagnétique et cela veut dire que κ augmente. Nous en concluons que le premier opérateur $\cos(2\sqrt{2\pi}\chi)$ ne sera jamais pertinent et nous pouvons le négliger par la suite. Le scénario est donc le suivant : la phase XY va disparaître et deux phases gappées doivent ensuite se succéder. La première est causée par l'opérateur $\cos(6\sqrt{2\pi}\tilde{\chi})$ devenant pertinent pour un certain $\Delta_{c,1}$ et la seconde correspond à la transition vers la phase ferrochirale pour un $\Delta_{c,2}$ suffisamment négatif. Dans cette phase, la description par la bosonisation n'est plus valide. Cela doit être mis en parallèle avec la phase *iv*) trouvée par l'intégrale de chemin.

Il est intéressant de comprendre quelle est la description physique de la phase gappée intermédiaire. Pour cela, il faut revenir aux opérateurs (II.3) et (II.4) définis dans la Section 1.3 et voir comment ils s'écrivent dans la description bosonisée. Nous trouvons la relation $\tau_j^x \sim \mathcal{P}_j \mu_j \mathcal{P}_j$ où $\mathcal{P}_j = |\uparrow R\rangle \langle \uparrow R| + |\uparrow L\rangle \langle \uparrow L|$ est l'opérateur de projection à la plaquette j sur le sous-espace de basse énergie donné par les deux états chiraux. Nous avons d'autre part la relation $\tau_j^z \sim \mathcal{P}_j \chi_j \mathcal{P}_j$ pour l'opérateur de chiralité. Lorsque le cosinus est pertinent, le champ $\tilde{\chi}$ a donc une valeur moyenne non nulle et cela fait que l'opérateur $\tau^x \sim (-1)^x \cos(\sqrt{\pi}\tilde{\chi})$ a lui aussi une valeur moyenne non nulle. Cette phase est donc caractérisée par un *spin-imbalance*, où deux chaînes ont la même aimantation et la troisième est différente. La parité étant ainsi spontanément brisée, cette phase est inaccessible à l'approche par

intégrale de chemin, pour laquelle la parité est explicitement brisée dès le début de l'analyse et où nous avons une aimantation non nulle selon z . D'autre part, nous voyons que dans la relation entre τ^x et $\cos(\tilde{\chi})$ il y a un facteur oscillant $(-1)^x$, qui nous indique que ce *spin imbalance* brise également la translation le long des chaînes, *i.e.* est une phase à $k_{\parallel} = \pi$, l'approche semi-classique effectuée étant, elle, adaptée à des phases à $k_{\parallel} = 0$. Finalement, nous nous attendons à ce que les deux points critiques $\Delta_{c,1}$ et $\Delta_{c,2}$ soient très proches (en l'absence des termes à trois et six corps, nous aurions la valeur bien connue $\Delta_{c,2} = -1$, mais elle va être renormalisée). Dans ce cas, cette phase de *spin imbalance* serait très peu étendue entre les phases XY et ferrochirale.

3.3 Résultats numériques pour $S = 3/2$

Nous allons maintenant présenter les résultats numériques obtenus par S. CAPPONI en utilisant l'algorithme de (DMRG), qui permet de simuler des systèmes unidimensionnels de très grande taille [159]. Nous avons étudié en détail le cas $S = 3/2$ pour des systèmes jusqu'à $L = 64$ (soit 192 spins) avec des conditions aux bords ouvertes.

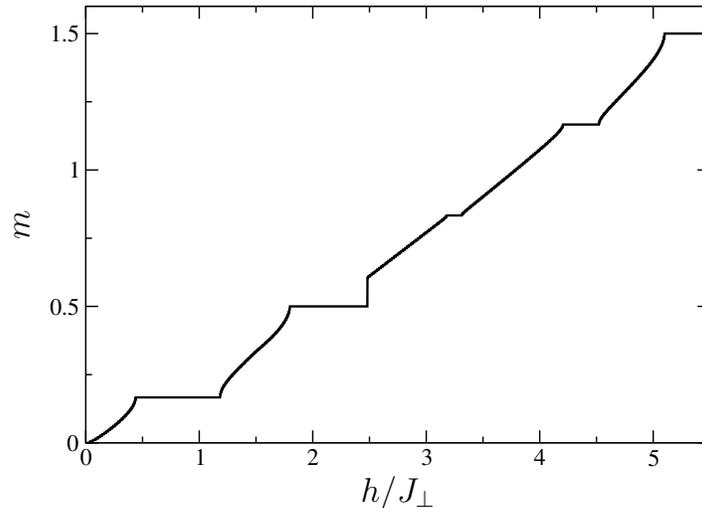


FIGURE II.13 – Courbe d'aimantation $m(h)$ pour le tube de spins $S = 3/2$ avec $L = 64$ et des couplages tels que $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0, 1$. Comme prévu par le critère OYA (II.56) nous trouvons dans ce régime de couplage fort quatre plateaux pour les valeurs d'aimantation par spin $m = 1/6, 1/2, 5/6, 7/6$. Le plateau à $m = 0$ n'est pas visible à cet échelle car trop petit, le gap de spin étant estimé à $2 \cdot 10^{-2} J_{\perp}$. La grande taille du système fait que la courbe semble continue comme dans la limite thermodynamique.

3.3.1 Plateaux d'aimantation

Nous commençons par présenter sur la Figure II.13 une courbe d'aimantation obtenue dans le régime de couplage fort pour $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0.1$ et une taille $L = 64$. Nous observons de larges plateaux d'aimantation pour les aimantations par spin $m = 1/6, 3/6, 5/6, 7/6$, en accord avec la condition OYA (II.56). Le plateau $m = 0$ n'est pas visible à cette échelle car le gap de spin est de l'ordre de $2 \cdot 10^{-2} J_{\perp}$ pour $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0.1$, en accord avec la littérature [119]. La valeur du champ de saturation peut être trouvée analytiquement en considérant le problème d'un seul spin retourné dans une mer de spins complètement polarisés et est donnée par $h_{sat} = (3J_{\perp} + 4J_{\parallel})S$.

	$m = 1/6$	$m = 3/6$	$m = 5/6$	$m = 7/6$
$J_{\parallel,c}^{\text{DMRG}}/J_{\perp}$	0,20-0,22	0,14-0,16	0,16-0,18	0,22-0,26
$J_{\parallel,c}^{\text{PI}}/J_{\perp}$	0,066	0,074	0,098	0,19

TABLE II.2 – Valeurs critiques $J_{\parallel,c}/J_{\perp}$ de disparition des plateaux d’aimantation pour le tube simple $S = 3/2$. Nous indiquons les valeurs numériques obtenues par analyse de taille finie des résultats DMRG ainsi que les valeurs prédites par l’intégrale de chemin (PI) dans la Section 3.1.3.

Afin d’obtenir le diagramme de phases complet du modèle, nous avons effectué une analyse de taille finie de la largeur de chaque plateau pour déterminer les couplages critiques auxquels ils disparaissent. Les résultats sont tracés sur la Figure II.14. Cela nous confirme que les plateaux survivent bien dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$, et nous résumons dans la Table II.2 les valeurs trouvées pour les couplages critiques. Sur la deuxième ligne nous indiquons également les valeurs prédites par l’intégrale de chemin à partir de la formule (II.57). Il faut cependant noter que, la transition hors du plateau étant de type BKT, il est difficile de déterminer très précisément les points critiques car le gap s’ouvre très lentement. Nous voyons que l’accord avec les prédictions n’est pas parfait mais est néanmoins satisfaisant. La plus grande différence vient du fait que les valeurs théoriques prédisent que les plateaux disparaissent progressivement avec m , à cause du facteur $(S^2 - m^2)$ présent dans (II.42), ce que nous ne retrouvons pas dans les simulations. Il faut cependant se rappeler que les valeurs théoriques viennent d’une approche à grand S .

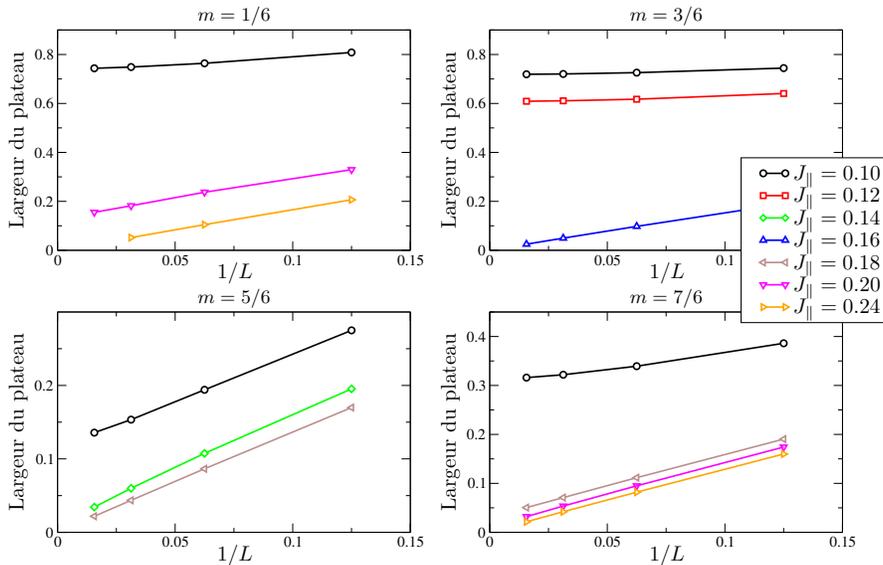


FIGURE II.14 – Analyse de taille finie pour les quatre plateaux du tube de spins $S = 3/2$ pour différents couplages J_{\parallel}/J_{\perp} . Cela nous permet de confirmer que les plateaux sont finis dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$ et nous permet également d’obtenir une estimation des couplages critiques pour lesquels ils disparaissent.

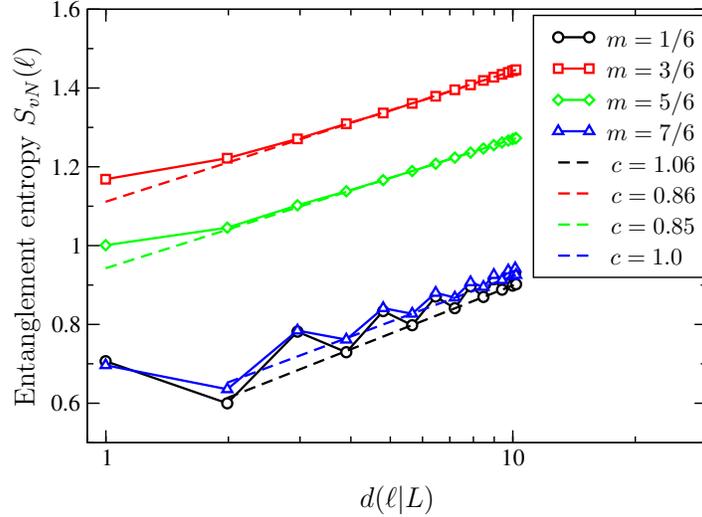


FIGURE II.15 – Entropie de von Neumann $S_{vN}(\ell)$ en fonction de la longueur de bloc conforme $d(\ell|L)$ (en commençant à un bord du tube car nous travaillons avec des conditions aux bords ouvertes) pour un tube $S = 3/2$ de taille $L = 32$ et $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,02$, pour les quatre plateaux d’aimantation donnés par la condition (II.56). En accord avec les valeurs des couplages critiques données par la méthode CORE, nous trouvons que les deux plateaux extrêmes $m = 1/6, 7/6$ sont dans une phase XY puisqu’un fit des entropies donne une valeur très proche de $c = 1$ dans les deux cas. Pour les plateaux intermédiaires $m = 3/6, 5/6$, les charges centrales estimées sont plus petites que 1 et pourraient correspondre à des criticalités non-gaussiennes.

3.3.2 Entropies d’intrication et charges centrales

Après avoir déterminé les paramètres donnant des plateaux d’aimantation, nous allons maintenant étudier la question de la chiralité, pour laquelle nous avons prédit différentes phases possibles. Nous sommes en particulier intéressés par la possibilité d’observer plusieurs transitions de phases sur les plateaux.

Pour faire la distinction entre phases gappées et phases non gappées, ainsi que pour localiser des transitions de phases continues, un outil très utile est l’entropie d’intrication entre deux partitions du système, ou entropie de Von Neumann $S_{vN}(\ell)$. Cette quantité, accessible très simplement au cours des simulations DMRG [160], se comporte différemment pour de grandes tailles de blocs ℓ et en condition aux bords ouvertes. Quand le système est gappé, $S_{vN}(\ell)$ sature à une constante, tandis que si le système est critique l’entropie suit la loi $S_{vN}(\ell) \simeq (c/6) \log \ell$, où c est la charge centrale de la théorie conforme décrivant le système [161]. Pour minimiser les effets de taille finie, il est convenable d’utiliser la longueur de bloc conforme $d(\ell|L) = (L/\pi) \sin(\ell\pi/L)$.

Pour localiser les transitions de phases, nous sommes guidés par les résultats de l’analyse CORE, et nous choisissons dans un premier temps un petit couplage $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,02$ pour lequel nous attendons une chiralité sans gap. Nous montrons sur la Figure II.15 les entropies de Von Neumann pour les différents plateaux et $L = 32$, et elles confirment une phase XY. Les fits pour les plateaux $m = 1/6$ et $m = 7/6$ donnent en effet des valeurs de c à respectivement 1,06 et 1,0. De manière surprenante, les plateaux intermédiaires $m = 3/6$ et $m = 5/6$ montrent également un comportement critique qui pourrait être compatible soit avec $c = 1$, soit avec une valeur légèrement plus faible puisque nous trouvons 0,86 et 0,85. Nous pouvons en particulier remarquer que ces charges centrales sont très proches de la valeur

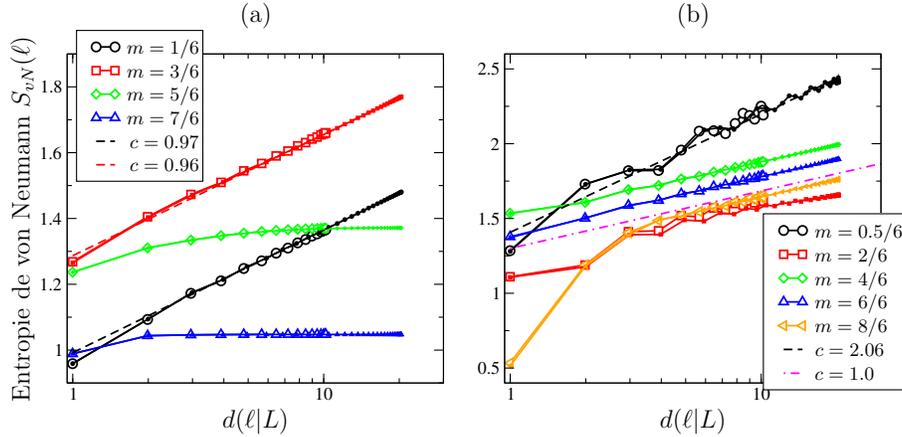


FIGURE II.16 – Entropie de von Neumann $S_{vN}(\ell)$ en fonction de la longueur de bloc conforme $d(\ell|L)$ (en commençant à un bord du tube car nous travaillons avec des conditions aux bords ouvertes) pour un tube $S = 3/2$ de tailles $L = 16$ (symboles creux) et $L = 32$ (symboles pleins) pour un couplage $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0, 1$. Sur le panneau (a) de gauche, les entropies sont calculées pour des aimantations correspondant aux quatre plateaux d’aimantation donnés par (II.56). Nous trouvons un comportement gappé pour les plateaux extrêmes $m = 1/6, 7/6$ tandis que les plateaux intermédiaires $m = 3/6, 5/6$ continuent à afficher un comportement critique. Le panneau (b) de droite montre les entropies pour des valeurs intermédiaires de m . La charge centrale $c = 2,06$ pour $m = 0,5$ révèle qu’en plus du mode magnétique, la chiralité est également critique, alors que les autres aimantations donnent uniquement le secteur magnétique sans gap ($c = 1$).

$c = 6/7$ du modèle de Potts critique à trois états. Cependant, rien dans notre approche par intégrale de chemin ne prédit une criticalité non-gaussienne, et en théorie des perturbations ces plateaux sont plus délicats car le nombre d’états de basse énergie sur un triangle augmente (respectivement 3 et 4). Il faut donc dériver des modèles effectifs pour des spins plus élevés que $1/2$ qui peuvent se révéler compliqués à étudier car incluant a priori de nombreux termes si nous nous basons uniquement sur les symétries. Il serait néanmoins intéressant d’étudier de manière plus approfondie ces plateaux, afin de déterminer si ces valeurs de c reflètent réellement un comportement non gaussien, ou bien s’il s’agit juste d’un artefact numérique pour une taille L trop petite.

Nous prenons maintenant des valeurs de J_{\parallel}/J_{\perp} plus élevées pour lesquelles nous attendons des phases gappées. Sur le panneau (a) de gauche de la Figure II.16, nous montrons les résultats pour $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0, 1$ et $L = 16$ et $L = 32$ aux aimantation $m = 1/6, 3/6, 5/6, 7/6$ des différents plateaux, confirmant ainsi le comportement gappé sur le plateau du haut puisque l’entropie sature. Le plateau du bas continue lui à afficher un comportement critique ($c = 0,97$) en accord avec la Table II.1. Le couplage critique que nous obtenons pour le plateau $m = 7/6$ est proche de 0,04 tandis que la chiralité est toujours sans gap pour le plateau $m = 1/6$ tant qu’il existe, *i.e.* pour $J_{\parallel}/J_{\perp} \lesssim 0.25$. Nous insistons sur l’excellent accord du couplage critique trouvé et celui prédit par la méthode CORE de portée 2 (voir la Table II.1). Rappelons également que, lorsque l’entropie indique une phase gappée, cela ne nous renseigne pas sur la nature de cette phase, et même ne nous dit pas si une ou plusieurs phases se succèdent. Nous étudions cette question plus bas car nous savons à partir du modèle effectif et par l’intégrale de chemin que plusieurs phases gappées différentes sont attendues. Nous pouvons également remarquer que qu’un degré de liberté s’est gappé sur le plateau $m = 5/6$ puisque l’entropie

sature, tandis que pour $m = 3/6$ nous trouvons toujours un mode critique ($c = 0,96$), comme à plus faible couplage (voir la Figure II.15). Puisque nous n'avons pas étudié ce plateau en couplage fort, nous nous contenterons donc de constater que sur ces plateaux intermédiaires également, des transitions de phases pour un mode non magnétique sont possibles.

Bien que nous n'ayons pas étudié théoriquement ces régimes, nous traçons sur le panneau (b) de droite de la Figure II.16 les entropies pour des aimantations intermédiaires, c'est-à-dire pour des valeurs ne donnant pas lieu à des plateaux. Puisque le degré de liberté magnétique n'est pas gelé, nous nous attendons évidemment à trouver un comportement de type liquide de Luttinger, avec donc au minimum $c = 1$. A basse aimantation ($m = 0,5$), nous trouvons une charge centrale $c = 2$. En accord avec la littérature [115], cela se comprend comme étant la somme de deux liquides de Luttinger $c = 1$, un pour la chiralité et un pour le mode magnétique. La surprise vient des autres aimantations intermédiaires pour lesquelles nous trouvons systématiquement $c = 1$. Cela veut dire que, lorsque le champ magnétique varie, le mode magnétique se dégage pour sortir du plateau tandis que dans le même temps un gap s'ouvre pour un autre mode non magnétique. C'est notamment vrai pour le plateau intermédiaire $m = 3/6$, puisque nous n'avons pas trouvé de traces d'une phase gappée dans ce cas-là, et il serait intéressant de savoir si les deux transitions coïncident exactement ou non. Enfin, nous pouvons également nous poser la question de la stabilité de la phase ferrochirale pour un champ magnétique arbitraire. Pour le tube $S = 1/2$, il a été montré que cette phase existe pour tout champ magnétique dans le régime de couplage faible $J_{\parallel}/J_{\perp} \gg 1$ [117], mais le scénario pourrait ici être plus complexe.

3.3.3 Nature des phases gappées

Le calcul des charges centrales à partir des entropies d'intrications nous a permis de mettre en évidence l'existence de phases XY pour les plateaux $m = 1/6$ et $m = 7/6$, ainsi qu'une transition vers au moins une phase gappée pour ce dernier plateau dans le régime $J_{\parallel}/J_{\perp} > 0,04$. Dans cette section nous étudions la nature de cette phase, et montrons qu'il y a tout d'abord une étroite phase de *spin imbalance* alterné, suivie par la phase Ising ferrochirale.

Pour cela, nous avons calculé les aimantations locales $\langle S_{\alpha,j}^z \rangle$ et présentons les résultats sur la Figure II.17. Pour $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,04$, le panneau du haut montre très clairement la présence d'un *spin imbalance* alterné, en accord avec la prédiction du modèle effectif bosonisé (II.68). Plusieurs remarques sont à faire sur ce résultat. Premièrement, une symétrie ne peut en principe pas être brisée sur un système de taille finie et nous devrions observer des quantités locales identiques pour chaque chaîne. L'explication est qu'ici le DMRG se retrouve en fait bloqué dans l'un des états fondamentaux dégénérés, ce qui se reflète dans les quantités locales [162]. Dans une situation normale, la simulation devrait trouver une superposition des états dégénérés, et il faudrait calculer les corrélations (connexes) $\langle S_{\alpha,j}^z S_{\beta,j+r}^z \rangle - \langle S_{\alpha,j}^z \rangle \langle S_{\beta,j+r}^z \rangle$ afin de caractériser la phase. Ici les quantités locales se révèlent suffisantes. Deuxièmement, il n'est pas évident, d'après ces courbes, de dire si deux chaînes ont des aimantations égales ou si les trois sont en fait différentes, vu les valeurs très proches pour les chaînes 2 et 3. Aussi, nous avons vérifié que cette phase est très peu étendue, puisque, d'après le panneau du bas de la Figure II.17, à $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,06$ le *spin imbalance* a complètement disparu, signalant que le système est entré dans la phase ferrochirale. Localiser plus précisément la transition hors de cette petite phase est cependant beaucoup plus délicat.

Finalement, il est intéressant de comparer ce résultat avec celui obtenu pour le spin 1/2 [158], pour lequel une phase de *spin imbalance* homogène a été trouvée numériquement, et dont l'étendue est également très faible. Dans la référence [158], la différence entre la prédiction du modèle effectif d'une

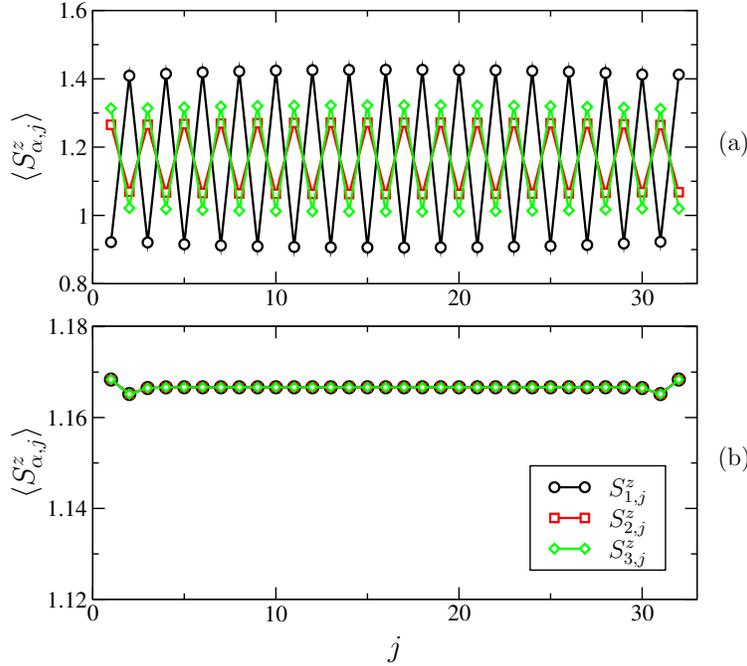


FIGURE II.17 – Aimantations locales obtenues pour un tube $S = 3/2$ de taille $L = 32$. Les panneaux du bas et du haut correspondent respectivement à des couplages $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,04$ et $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,06$, c'est-à-dire dans le régime où la chiralité est gappée d'après les résultats numériques sur les entropies. Sur le panneau (a) du haut nous notons la présence d'un *spin imbalance* alterné, avec une chaîne qui a une aimantation très différente des deux autres, qui sont assez proches. Sur le panneau (b) du bas, le spin imbalance a complètement disparu et nous retrouvons des aimantations homogènes. Combiné à la nature gappée de la phase, cela indique que le système est entré dans la phase ferrochirale.

phase à $k_{\parallel} = \pi$ et le numérique donnant $k_{\parallel} = 0$ est expliquée en termes de l'échec de la théorie des perturbations pour les couplages correspondants $J_{\parallel}/J_{\perp} \simeq 0,5$, *i.e.* les états de plus haute énergie sur un triangle ne peuvent plus être négligés. Au-delà de cette explication, remarquons que cette phase peut être comprise par notre analyse semi-classique. Afin de s'assurer que dans notre cas il est bien possible de décrire le système en termes de chiralité, nous avons calculé, par diagonalisation exacte sur un système de taille $L = 6$ et avec des conditions aux bords périodiques, les valeurs propres de la matrice de densité réduite d'un triangle $\hat{\rho}_{\Delta}$. Nous reviendrons dans un chapitre suivant sur cette notion de matrice de densité réduite, et plus généralement d'entropie d'intrication. Mentionnons seulement que cela consiste à calculer la matrice de densité totale $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ où Ψ est le fondamental, puis à tracer sur tous les sites n'appartenant pas au triangle.

Nous traçons sur la Figure II.18 la somme des deux plus grandes valeurs propres, logiquement associées aux deux états chiraux de basse énergie (nous avons vérifié qu'elles sont bien dégénérées), en fonction de J_{\parallel}/J_{\perp} . Nous voyons que pour une large plage $J_{\parallel}/J_{\perp} < 0,08$, incluant donc les trois phases différentes, nous trouvons une valeur supérieure à 0,9. Ce résultat peut être interprété en disant que le poids total de ces états dans la description d'un triangle excède 90% (voir les références [155, 157]). Bien entendu, il n'existe pas de critère strict permettant de dire jusqu'à quel point la perturbation est valide, mais nous pouvons raisonnablement affirmer que nous sommes bien dans le domaine de validité du modèle effectif. La fenêtre secondaire de la Figure II.18 nous permet de mettre en évidence un saut

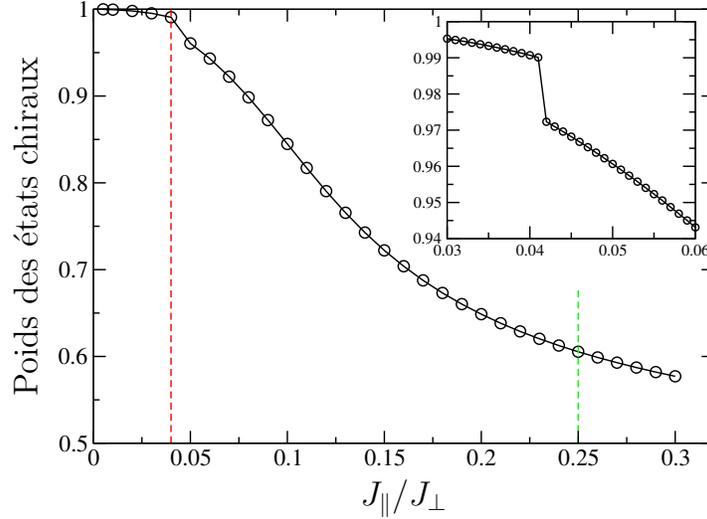


FIGURE II.18 – Poids des états chiraux trouvé à partir des valeurs propres de la matrice de densité réduite d’un triangle. Les données ont été obtenues par diagonalisation exacte du tube de spin simple pour $S = 3/2$ de taille $L = 6$. Une discontinuité est observée autour de $J_{\parallel}/J_{\perp} \simeq 0,04$ et correspond *a priori* à l’entrée dans la phase ferrochirale. Nous remarquons que le poids des états chiraux reste important dans une large région de couplage J_{\parallel}/J_{\perp} , suggérant ainsi que le modèle effectif (II.67) est pertinent pour décrire correctement le système.

vers $J_{\parallel}/J_{\perp} \simeq 0,04$. Vu la petite taille du système et le fait que nous n’avons pas été capable de trouver de signes de la phase de *spin imbalance* en diagonalisation exacte, il est tentant d’associer ce saut à l’entrée dans la phase ferrochirale. Cependant, dans la référence [158] un calcul de la valeur moyenne du projecteur sur les états chiraux a été faite par DMRG (et donc pour des tailles plus grandes). Cette méthode, qui s’interprète de la même manière que notre calcul sur la matrice densité réduite d’un triangle, et a montré un saut similaire au début de la phase de *spin imbalance*. Il est donc difficile de conclure ici. Finalement, il faut remarquer que, contrairement à ce que nous pourrions attendre, la courbe ne présente pas de comportement particulier autour de $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,025$ lorsque le plateau disparaît. Cela s’explique par le fait que la phase ferrochirale s’étend jusqu’au régime de couplage faible [117] et il est donc logique de ne pas observer de signe particulier.

3.3.4 Diagramme de phases

Nous résumons ici l’ensemble des résultats numériques en donnant sur la Figure II.19 le diagramme de phases $(J_{\parallel}/J_{\perp}, h/J_{\perp})$ pour le tube $S = 3/2$. Les plateaux d’aimantation présents dans le régime de couplage fort sont indiqués par les régions colorées, ainsi que l’état complètement polarisé pour des champs magnétiques tels que $h > h_{sat}$. L’étendue des plateaux a été estimée par analyse de taille finie, Cf. Figure II.14 et la Table II.2. Le trait noir épais à $h/J_{\perp} = 0$ rappelle la présence du plateau $m = 0$, qui peut être observé dans tout le régime J_{\parallel}/J_{\perp} [119], comme pour le spin-1/2 [110].

Les deux plateaux extrêmes, que nous avons étudiés dans le détail à partir des Hamiltoniens effectifs, montrent un comportement différent. Pour l’aimantation $m = 1/6$, aucune transition de phase n’est observée pour le degré de liberté de chiralité, et seule la phase critique XY est présente tant que le plateau existe. Pour de plus grandes valeurs de J_{\parallel}/J_{\perp} , le plateau disparaît et le degré de liberté

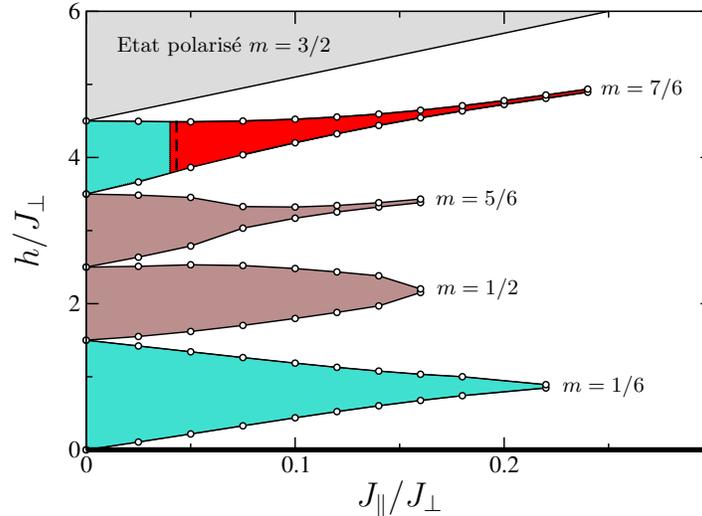


FIGURE II.19 – Diagramme de phases numérique du tube simple pour $S = 3/2$ dans le plan $(J_{||}/J_{\perp}, h/J_{\perp})$. Les régions pleines correspondent aux différents plateaux d’aimantation donnés par la condition (II.56), ainsi qu’à l’état complètement polarisé $m = 3/2$ pour $h > h_{sat}$. Pour les plateaux du haut et du bas pour lesquels une analyse de couplage fort a été possible, les régions bleues indiquent des phases critiques suivant l’étude des charges centrales, tandis que la région rouge correspond à une chiralité gappée. Sur le plateau $m = 7/6$, le trait en pointillés noirs représente la transition entre la phase de *spin imbalance* alterné et la phase ferrochirale. Les deux plateaux intermédiaires sont simplement indiqués en marron, car, bien que d’après la Figure II.16 il y a aussi une transition de phase sur le plateau $m = 5/6$, nous n’avons pas d’arguments analytiques permettant une explication détaillée. Le trait noir épais rappelle l’existence du plateau $m = 0$.

magnétique est décrit par la théorie du liquide de Luttinger. D’un autre côté, le plateau $m = 7/6$ affiche toutes les phases prédites par le modèle effectif (II.68). Nous indiquons en bleu la phase non-gappée et en rouge les phases gappées. Autour de $J_{||}/J_{\perp} = 0,04$, nous avons observé une transition vers la phase de spin imbalance, qui disparaît rapidement pour donner ensuite une phase ferrochirale qui s’étend jusqu’à ce que le plateau se ferme. Suivant la littérature pour le cas $S = 1/2$, cette dernière phase devrait a priori s’étendre dans le régime de couplage faible, signalant que la physique du tube est dominée par celle du régime de couplage fort. La transition entre les deux phases gappées est indiquée par le trait noir en pointillé. Nous n’avons pas calculé précisément le point de transition.

Finalement, pour les deux plateaux intermédiaires en marron, bien que nous ne les ayons pas étudiés dans le détail tant numériquement que analytiquement, semblent eux aussi pouvoir admettre des transitions de phase pour un degré de liberté non magnétique quand le couplage longitudinal est varié. C’est ce que nous avons pu constater sur le plateau $m = 5/6$ à partir des entropies d’intrication, puisque nous trouvons une saturation pour $J_{||}/J_{\perp} = 0,1$ mais pas pour $J_{||}/J_{\perp} = 0,02$. L’étude de cette transition est cependant au-delà du travail effectué sur ce tube, et sur le diagramme de phase nous nous contentons donc d’indiquer la présence de ces plateaux. Autre point intéressant, nous avons vu précédemment qu’à très petit $J_{||}/J_{\perp}$, les charges centrales obtenues sont légèrement plus petites que 1 et pourraient ainsi correspondre à des criticalités non-gaussiennes, tout en restant compatibles avec un scénario plus traditionnel qui serait $c = 1$. Pour des valeurs plus élevées de $J_{||}/J_{\perp}$, nous retrouvons pour $m = 3/6$ une charge centrale $c = 1$ indiquant une phase XY.

4 Tube triangulaire déformé

4.1 Approche par intégrale de chemin

Suivant les mêmes étapes que dans la Section 3.1, nous commençons par déterminer la configuration classique du modèle (II.2). Classiquement, les deux limites $J_\perp = 0$ et $J_d = 0$ sont facilement comprises en l'absence du champ magnétique. Pour $J_\perp = 0$, le modèle n'est en fait pas frustré car bipartite, l'état classique est donc simplement l'état de Néel (sur une même chaîne les spins sont par contre orientés ferromagnétiquement, et prendre un couplage $J_\parallel \neq 0$ introduirait donc plus de frustration). Dans l'autre limite $J_d = 0$, les triangles sont découplés et nous retrouvons la situation déjà considérée pour le tube simple, les spins étant coplanaires avec des angles de 120° entre eux. Quand les deux couplages sont non nuls, l'état fondamental classique est toujours un de ces deux états [125]. Il est en effet possible de montrer que de $J_d/J_\perp = 0$ à $J_d/J_\perp = 3/2$, la configuration classique est l'état 120° tandis que pour $J_d/J_\perp > 3/2$ l'état de Néel est énergétiquement plus favorable. Pour cela, nous pouvons faire un calcul dans l'espace de Fourier en réécrivant le Hamiltonien comme

$$H = \sum_{\vec{k}} J_{\vec{k}} \vec{S}_{\vec{k}} \cdot \vec{S}_{-\vec{k}}, \quad (\text{II.69})$$

où $\vec{k} = (k_\perp, k_\parallel)$, $J(\vec{k}) = 2\cos(k_\perp)(J_\perp + 2J_d\cos(k_\parallel))$ et k_\perp est en fait limité à $0, 2\pi/3$. La configuration classique est donnée par la minimisation du couplage $J(k_\perp, k_\parallel)$. Comparant les énergies des deux états $\vec{k} = (0, \pi)$ (Néel) et $\vec{k} = (2\pi/3, 0)$ (120°), nous retrouvons bien les deux régimes donnés précédemment ainsi que le point de transition $J_d/J_\perp = 3/2$. L'effet du champ magnétique est alors de partiellement polariser les spins comme nous avons pu le voir pour la configuration 120° du tube simple ou pour l'état Néel de la chaîne de spins. Notons que le réseau, s'il n'est pas bipartite, est « trois-coloriable », c'est-à-dire que nous avons trois sous-réseaux différents A, B et C , et qu'un spin appartenant à un sous-réseau donné n'interagit qu'avec des spins des deux autres sous-réseaux. Deux configurations classiques existent et pour utiliser l'approche d'intégrale de chemin il faut considérer les deux régimes séparément.

4.1.1 Régime $J_d/J_\perp < 3/2$

Dans ce régime, l'état fondamental est donc le même que pour le tube simple, avec la différence que l'ordre est à $k_\parallel = 0$. Contrairement au cas du tube simple, nous voyons que le couplage J_d entre les triangles n'est alors pas complètement satisfait. En effet le spin 1 sur le triangle j n'est pas anticolinéaire avec les spins 2 et 3 sur les triangles voisins $j \pm 1$ mais fait des angles de 120° , signifiant que la frustration est plus importante dans ce modèle. Nous paramétrons l'état classique par

$$\vec{S}_{\alpha,j} = S \begin{pmatrix} \sin(\theta^{(0)})\cos(\varphi_\alpha^{(0)}) \\ \sin(\theta^{(0)})\sin(\varphi_\alpha^{(0)}) \\ \cos(\theta^{(0)}) \end{pmatrix}, \quad (\text{II.70})$$

où $\cos(\theta^{(0)}) = \frac{h}{S(3J_\perp + 6J_d)}$ et nous avons choisi $\varphi_\alpha^{(0)} = (\alpha - 1)2\pi/3$. Nous introduisons ensuite les fluctuations quantiques comme précédemment en laissant les angles dévier de ces valeurs selon $\theta^{(0)} \rightarrow \theta_{\alpha,j} = \theta^{(0)} + \delta\theta_{\alpha,j}$, $\varphi_\alpha^{(0)} \rightarrow \varphi_\alpha^{(0)} + \varphi_{\alpha,j}$ et introduisons le moment conjugué $\Pi_{\alpha,j}$. Le développement des

opérateurs de spins nous donne

$$n_{\alpha,j}^{\pm} \approx e^{\pm i[(\alpha-1)\frac{2\pi}{3} + \varphi_{\alpha,j}]} \left[\sin(\theta_0) - \frac{m}{S^2 \sin(\theta_0)} \Pi_{\alpha,j} - \frac{1}{2} \frac{S^2}{S^2 - m^2} \frac{1}{S^2 \sin(\theta_0)} \Pi_{\alpha,j}^2 \right], \quad (\text{II.71})$$

$$n_{\alpha,j}^z \approx \cos(\theta_0) + \frac{\Pi_{\alpha,j}}{S},$$

où la seule différence avec (II.45) vient de l'absence du facteur $(-1)^j$ pour $n_{\alpha,j}^{\pm}$, qui signalait que la configuration du tube simple était un ordre à $k_{\parallel} = \pi$ dans le plan xy . En suivant les mêmes étapes que précédemment nous obtenons l'action

$$S[\{\Pi_{\alpha}\}, \{\varphi_{\alpha}\}] = \int d\tau dx \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ \frac{1}{2} a J_d (S^2 - m^2) (\partial_x \varphi_{\alpha})^2 + \frac{1}{2} a \frac{S^2}{S^2 - m^2} (J_{\perp} + 2J_d) \Pi_{\alpha}^2 \right. \\ \left. + a \left(1 - \frac{1}{2} \frac{m^2}{S^2 - m^2} \right) (J_{\perp} + 2J_d) \Pi_{\alpha} \Pi_{\alpha+1} + \frac{1}{4} \frac{S^2 - m^2}{a} (J_{\perp} + 2J_d) (\varphi_{\alpha} - \varphi_{\alpha+1})^2 \right. \\ \left. - \frac{\sqrt{3}}{2} m (J_{\perp} + 2J_d) \Pi_{\alpha} (\varphi_{\alpha-1} - \varphi_{\alpha+1}) + i \left[\left(\frac{S - m}{a} \right) \partial_{\tau} \varphi_{\alpha} - \Pi_{\alpha} \partial_{\tau} \varphi_{\alpha} \right] \right\}. \quad (\text{II.72})$$

Cette action a la même forme que l'action (II.49) et (II.50) pour le tube simple, la seule différence venant de termes de bords qui de toute façon ne jouent aucun rôle. Nous voyons que, à l'exception du terme de dérivée $(\partial_x \varphi_{\alpha})^2$, les couplages J_{\perp} et J_d jouent exactement le même rôle. Dans la limite du continu, il est en effet évident que le couplage diagonal J_d est similaire à J_{\perp} . Dans les paramètres de l'action (II.72), le facteur deux en plus pour J_d nous dit simplement que pour un triangle il y a deux fois plus de couplages diagonaux (six) que de couplages intra-triangle (trois). Après avoir effectué la transformation (II.51) et intégré les champs $\tilde{\Pi}_{\alpha}$, nous obtenons

$$S[\{\phi_{\alpha}\}] = \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2} \lambda_{\tau}^{(1,2)} [(\partial_{\tau} \phi_1)^2 + (\partial_{\tau} \phi_2)^2] + \frac{1}{2} \lambda_x^{(1,2)} [(\partial_x \phi_1)^2 + (\partial_x \phi_2)^2] - i\mu (\phi_1 \partial_{\tau} \phi_2 - \phi_2 \partial_{\tau} \phi_1) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \lambda_{\tau}^{(s)} (\partial_{\tau} \phi_s)^2 + \frac{1}{2} \lambda_x^{(s)} (\partial_x \phi_s)^2 + i3 \frac{S - m}{a} \partial_{\tau} \phi_s \right\}, \quad (\text{II.73})$$

où nous avons encore redéfini $\phi_s \rightarrow \phi_s / \sqrt{3}$.

A l'ordre gaussien, l'action est une nouvelle fois découplée entre une action pour le champ symétrique ϕ_s et une action pour les champs ϕ_1 et ϕ_2 représentant la chiralité. De manière surprenante, la masse de ces champs s'est annulée lors de l'intégration des $\tilde{\Pi}_{\alpha}$. Bien que dans la Section 3.1.3 la raison de la redéfinition du champ reposait sur le fait que les champs ϕ_1 et ϕ_2 étaient massifs, nous affirmons qu'elle reste justifiée. En effet, le développement (II.71) est tronqué à l'ordre deux. Si nous gardions les termes d'ordre supérieur, des termes de masse de la forme $(\varphi_{\alpha} - \varphi_{\alpha+1})^4$ apparaîtraient et nous retrouverions ainsi un terme de masse, forçant ϕ_1 et ϕ_2 à être petits et ne pas avoir d'enroulement. A part cette annulation accidentelle de la masse, cette action ne présente pas de différence avec celle du tube simple. Cela n'est pas surprenant car nous sommes partis de la même configuration classique, l'ordre $k_{\parallel} = \pi$ étant en fait caché dans les termes diagonaux, vu que les spins couplés par J_d font entre eux un angle supérieur à $\pi/2$.

La transformation de dualité sur l'action symétrique nous donne l'action (II.55) pour le champ dual, et la condition OYA est évidemment encore $3(S - m) \in \mathbb{Z}$, puisqu'elle ne dépend que du nombre de spins par cellule unité. En calculant la dimension de l'opérateur cosinus nous trouvons

$$\delta = \pi \sqrt{\frac{3J_d(S^2 - m^2)}{J_\perp \left(1 + 2\frac{J_d}{J_\perp}\right)}}, \quad (\text{II.74})$$

qui a la même forme que (II.57) et dépend de la même façon de m . Pour l'action de chiralité des champs ϕ_1 et ϕ_2 , la même discussion sur une action phénoménologique respectant les symétries est possible et nous prédit les mêmes quatre phases données dans la Section 3.1.3.

4.1.2 Régime $J_d/J_\perp > 3/2$

Pour le régime où le terme diagonal domine, la configuration classique est donnée par l'état de Néel, que nous écrivons comme

$$\vec{S}_{\alpha,j} = S \begin{pmatrix} (-1)^j \sin(\theta^{(0)}) \cos(\varphi^{(0)}) \\ (-1)^j \sin(\theta^{(0)}) \sin(\varphi^{(0)}) \\ \cos(\theta^{(0)}) \end{pmatrix}, \quad (\text{II.75})$$

où $\cos(\theta^{(0)}) = h/(8SJ_d)$ et nous avons pris $\varphi_\alpha^{(0)} = 0$. Contrairement aux solutions classiques basées sur l'état 120° , la symétrie \mathbb{Z}_2 de parité n'est ici pas brisée. Seules la symétrie de translation et la symétrie $U(1)$ sont brisées mais elles ne jouent aucun rôle par la suite. En suivant les mêmes étapes que précédemment, nous arrivons à l'action

$$\begin{aligned} S[\{\Pi_\alpha\}, \{\varphi_\alpha\}] = & \int d\tau dx \sum_{\alpha=1}^3 \left\{ aJ_d(S^2 - m^2)(\partial_x \varphi_\alpha)^2 + a(2J_d - J_\perp) \frac{S^2}{S^2 - m^2} \Pi_\alpha^2 \right. \\ & + \frac{1}{2}(2J_d - J_\perp) \frac{S^2 - m^2}{a} (\varphi_\alpha - \varphi_{\alpha+1})^2 + a \left[2J_d \left(1 - \frac{m^2}{S^2 - m^2} \right) + J_\perp \frac{S^2}{S^2 - m^2} \right] \Pi_\alpha \Pi_{\alpha+1} \\ & \left. + i \left[\left(\frac{S - m}{a} \right) \partial_\tau \varphi_\alpha - \Pi_\alpha \partial_\tau \varphi_\alpha \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{II.76})$$

Comme nous sommes partis de $J_d/J_\perp > 3/2$, la condition $2J_d > J_\perp$ pour obtenir une action définie positive, *i.e.* correspondant bien à une configuration d'énergie minimale, est satisfaite : les termes devant $(\partial_x \varphi_\alpha)^2$ et $(\varphi_\alpha - \varphi_{\alpha+1})^2$ sont bien positifs. A ce stade, nous voyons déjà ce qui va se passer pour la chiralité, puisque la nature coplanaire de la configuration classique fait que les termes de couplages $\Pi_\alpha(\varphi_{\alpha-1} - \varphi_{\alpha+1})$ des deux fluctuations Π_α et φ_α sont absents. Lorsque nous intégrons les champs massifs Π_α , l'action devient

$$\begin{aligned} S[\{\phi_\alpha\}] = & \int d\tau dx \left\{ \frac{1}{2} \lambda_\tau^{(1,2)} [(\partial_\tau \phi_1)^2 + (\partial_\tau \phi_2)^2] + \frac{1}{2} \lambda_x^{(1,2)} [(\partial_x \phi_1)^2 + (\partial_x \phi_2)^2] + M^2(\phi_1^2 + \phi_2^2) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \lambda_\tau^{(s)} (\partial_\tau \phi_s)^2 + \frac{1}{2} \lambda_x^{(s)} (\partial_x \phi_s)^2 + i3 \frac{S - m}{a} \partial_\tau \phi_s \right\}. \end{aligned} \quad (\text{II.77})$$

Nous obtenons cette fois une action pour la chiralité différente de celles données en (II.73) et (II.53), puisque le terme complexe $i(\phi_1 \partial_\tau \phi_2 - \phi_2 \partial_\tau \phi_1)$ est ici absent. Il est normalement généré par

la présence du terme $\Pi_\alpha(\varphi_{\alpha-1} - \varphi_{\alpha+1})$ lors de l'intégration des champs Π_α , et fait donc, de manière générale, la différence entre les configurations coplanaires et non coplanaires. Cela est au final logique si nous rappelons que, d'après la définition (II.3) de la chiralité, celle-ci n'a de sens que dans le cas de configurations non coplanaires (ou, plus généralement, pour des états non colinéaires pour des problèmes sans champ). L'analyse que nous avons faite dans la Section 3.1.3 étant basée sur la présence de ce terme complexe, le champ de chiralité Ψ est automatiquement gappé et une seule phase, où la chiralité est désordonnée, est attendue.

Une autre différence intervient pour l'action symétrique responsable des plateaux d'aimantation. La condition OYA $3(S - m) \in \mathbb{Z}$ reste bien entendu la même, par contre nous trouvons pour la dimension de l'opérateur cosinus une expression indépendante des paramètres du Hamiltonien

$$\delta = \frac{3}{2}\pi\sqrt{S^2 - m^2}. \quad (\text{II.78})$$

En accord avec le fait que nous attendons les plateaux dans le régime de couplage fort, où la configuration classique est donnée par l'état 120° , cela nous suggère que pour $J_d/J_\perp > 3/2$ les plateaux sont toujours absents. Nous verrons que les résultats numériques pour $S = 3/2$ confirment cela, avec en plus le fait que le plateau le plus robuste semble se fermer très proche de $J_d/J_\perp = 3/2$, et nous retrouvons un couplage critique presque identique pour le plateau $m = 1/6$ dans le cas $S = 1/2$ [124].

4.2 Limite de couplage fort

Nous allons maintenant reprendre la méthode de dérivation des Hamiltoniens effectifs pour étudier les plateaux d'aimantation pour lesquels la limite $J_\parallel = 0$ donne un état fondamental deux fois dégénéré pour un triangle isolé, et qui peut donc être décrit par une chiralité. Puisque la plaquette triangulaire est la même que pour le tube simple, une nouvelle fois les plateaux $m = 1/6$ et $m = S - 1/3$ peuvent aussi être décrits par un pseudospin-1/2, avec les doublets chiraux donnés respectivement par les états (II.6) et (II.65). Par exemple, au premier ordre en perturbation le plateau $m = 1/6$ pour le spin-1/2 est toujours donnée par un modèle XY [124]

$$H_{\text{eff}} = \frac{J_d}{6} \sum_j [1 + 2(\tau_j^+ \tau_{j+1}^- + \tau_j^- \tau_{j+1}^+)]. \quad (\text{II.79})$$

Là encore, afin de retrouver la possibilité de phases gappées comme celles prédites par l'intégrale de chemin, il faut aller au-delà de la perturbation au premier ordre et utiliser le modèle (II.67) basé sur les symétries du tube ainsi que sur sa forme bosonisée (II.68). En se basant sur ce modèle, les phases attendues dans le régime de couplage fort sont donc les mêmes que celles pour le tube simple, à savoir une phase XY de chiralité, suivie de deux phases gappées avec un *spin imbalance* alterné puis une phase ferrochirale. Notons que, par contre, l'intégrale de chemin a prédit que dans le régime de couplage faible les deux systèmes doivent se comporter différemment. Bien que le Hamiltonien effectif soit le même, savoir si toutes les phases vont être présentes ou non va dépendre de la valeur du paramètre de Luttinger κ en fonction des paramètres du modèle microscopique. Plus précisément, si l'ordre des trois phases est fixé et si la phase XY est obligatoirement présente, il n'est pas dit que les deux autres phases gappées apparaissent lorsque J_\parallel/J_\perp augmente. Cela sera le cas si, comme discuté dans la Section 3.3.3, le modèle effectif cesse d'être valide avant que la valeur de κ rende pertinent l'opérateur du *spin imbalance* alterné.

Afin d'avoir une prédiction plus quantitative, nous avons répété l'analyse CORE à portée 2 de la Section 3.2.2 pour obtenir des valeurs numériques des paramètres J_{xy} et J_z . A ce niveau d'approximation, nous trouvons pour les deux plateaux extrêmes d'un spin demi-entier quelconque un

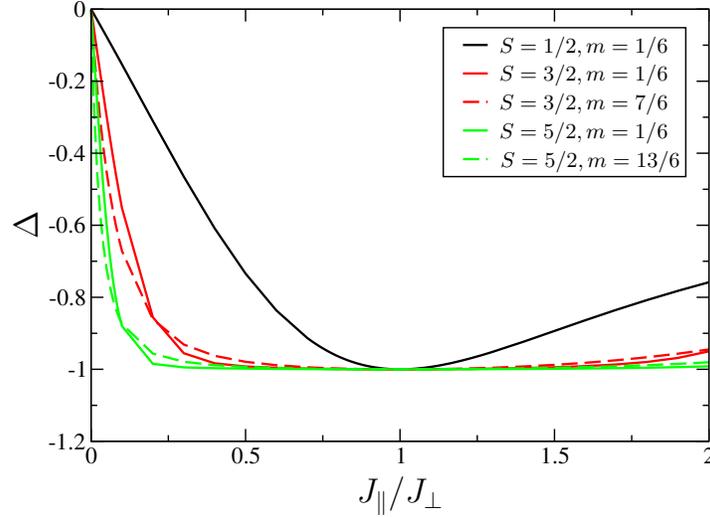


FIGURE II.20 – Valeurs de $\Delta = J_z/J_{xy}$ du Hamiltonien XXZ (II.66) calculées par la méthode CORE à portée 2 en fonction de J_{\parallel}/J_{\perp} pour le plateau $m = 7/6$ du tube déformé $S = 3/2$. Nous voyons que pour les deux plateaux le système reste toujours dans la phase XY, avec un minimum $\Delta = -1$ à $J_{\parallel}/J_{\perp} = -1$.

comportement différent du tube simple, à savoir que le modèle XXZ reste toujours dans le régime XY $|\Delta| = |J_z/J_{xy}| < 1$ et ne prévoit donc pas l'apparition de la phase ferrochirale pour des valeurs de J_{\parallel}/J_{\perp} raisonnables du point de vue de l'existence du plateau. La phase de *spin imbalance*, non prise en compte dans ce calcul à deux triangles, pourrait être a priori présente mais cela reste improbable car, comme discuté auparavant, elle doit être très peu étendue et nécessite un grand κ . Nous traçons sur la Figure II.20 les valeurs de Δ que nous avons calculées pour $S = 1/2, 3/2, 5/2$ sur les deux plateaux. Nous voyons que pour ces trois valeurs de spin la phase Ising n'est jamais atteinte dans le régime de couplage fort, et, étrangement, nous trouvons systématiquement un minimum $\Delta = -1$ pour $J_{\parallel}/J_{\perp} = 1$. La méthode CORE n'étant pas perturbative, elle n'est pas strictement limitée au régime de couplage fort. La condition est plutôt que les états chiraux décrivent correctement le triangle, ce qui n'est pas exactement la même chose. De plus, bien que cette méthode soit très simple, nous avons constaté que dans le cas du tube simple les valeurs obtenues étaient quantitativement très satisfaisantes, et nous verrons par la suite que les résultats DMRG confirment la seule présence de la phase critique XY (parmi les trois phases du modèle effectif, car nous verrons un autre type de *spin imbalance*).

4.3 Composé $[(\text{CuCl}_2\text{tachH})_3\text{Cl}]\text{Cl}_2$

En utilisant les résultats précédent, nous discutons le cas du composé $[(\text{CuCl}_2\text{tachH})_3\text{Cl}]\text{Cl}_2$, qui appartient au régime $J_d/J_{\perp} > 3/2$. Pour $S = 1/2$, il n'y a qu'un plateau à $m = 1/6$. La dimension (II.78) est $\pi/\sqrt{2} > 2$ pour ces valeurs et le composé ne doit donc pas présenter de plateau dans sa courbe d'aimantation. Dans la référence [124], Fouet *et al.* sont arrivés numériquement à la même conclusion. Plus généralement, notre analyse est compatible avec leur diagramme de phases déterminé par DMRG. En effet, ils ont observé que le plateau s'étend jusqu'à $J_d/J_{\perp} = 3/2$. Nous arrivons ici à la même conclusion, puisque si nous appliquons la formule (II.74) nous trouvons que le plateau

est toujours présent dans le régime $J_d/J_\perp < 3/2$ (à $J_d/J_\perp = 3/2$ la dimension du cosinus vaut 1,57). D'un autre côté, l'analyse par modèle effectif a montré l'absence de transition vers la phase ferrochirale. Bien sûr, vu que le composé n'est pas dans le régime de couplage fort il n'est pas certain que cette information soit pertinente. Il faut cependant se rappeler que pour le tube simple, la phase ferrochirale est en fait attendue comme s'étendant jusqu'au régime de couplage faible [117]. Ici, cela veut dire que soit elle n'est pas présente dans le régime de couplage faible, soit elle doit disparaître avant d'entrer dans le régime de couplage fort, le plus certainement lors de l'ouverture du plateau d'aimantation. L'intégrale de chemin pointe clairement vers la première solution, puisque nous avons vu que la chiralité doit être gappée et désordonnée dans le régime $J_d/J_\perp > 3/2$. En résumé, nous n'attendons pour $[(\text{CuCl}_2\text{tachH})_3\text{Cl}]\text{Cl}_2$ aucun ordre non magnétique et pas de plateau d'aimantation.

4.4 Résultats numériques pour $S = 3/2$

Comme pour l'étude numérique du tube simple, les résultats DMRG ont été obtenus par S. CAPPONI. La méthodologie étant identique pour le tube simple, nous ne montrerons pas toutes les données.

En suivant la démarche de la Section 3.3.2, nous utilisons l'entropie de von Neumann pour détecter la présence ou non d'un gap pour la chiralité sur les plateaux $m = 1/6$ et $m = 7/6$. En nous basant sur les calculs CORE-2, nous devrions en principe trouver uniquement la phase XY. Si cela semble bien être le cas pour $m = 7/6$, nous observons la présence d'une transition vers un régime gappé à $J_d/J_\perp = 0,12$ pour $m = 1/6$. Comme nous l'avons anticipé précédemment, le mécanisme pour cette transition est différent de ce qui se passe pour le tube simple. Nous montrons sur la Figure II.21 les aimantations locales des trois chaînes, et concluons à l'absence du *spin imbalance* alterné ainsi que de la phase ferrochirale. A la place, nous trouvons pour $J_d/J_\perp > 0,12$ une unique phase gappée de *spin imbalance* homogène qui se poursuit jusqu'à la disparition du plateau. De plus, nous remarquons que la différence d'aimantation entre les chaînes est très importante, une des valeurs étant même négative.

Une autre façon de comprendre l'absence du *spin imbalance* alterné et de la phase ferrochirale est donnée par les valeurs propres de la matrice de densité réduite. Nous montrons sur la Figure II.22 la somme des deux valeurs propres (dégénérées) les plus larges ainsi que la somme des deux valeurs propres (dégénérées encore) suivantes. En comparant au cas du tube simple (Cf. Figure II.18), nous voyons que le poids des états chiraux est déjà fortement réduit même pour des couplages faibles $J_d/J_\perp = 0,01$ à 75%, contre 99% pour le tube simple à $J_\parallel/J_\perp = 0,01$. De plus, nous notons la présence de deux états qui ont toujours un poids combiné de l'ordre de 25% dans toute la gamme de couplage, contrairement au tube simple où les états les plus importants après les états chiraux étaient inférieurs à 1%. Cela suggère donc que même pour des valeurs modérées de J_d/J_\perp nous ne pouvons pas nous appuyer sur le modèle effectif (II.67), le mélange avec d'autres états étant trop important pour être négligé. A la place, nous devons plutôt nous servir des résultats de l'intégrale de chemin qui disent qu'une telle phase homogène est possible, et dont l'extension n'est a priori pas faible contrairement à celle de la phase alternée.

Les résultats des simulations sont résumés sur le diagramme de phases de la Figure II.23. L'extension des plateaux a été obtenue par analyse de taille finie, en prenant le critère qu'un plateau est fini si sa largeur extrapolée est supérieure à $0,005J_\perp$. Pour les plateaux du haut et du bas, les phases critiques sur les plateaux sont en bleu et les phases gappées en rouge. Remarquons que le plateau à $m = 1/2$ est présent dans toute la région $J_d/J_\perp > 3/2$ et qu'il montre une petite anomalie à son sommet, comme le plateau $m = 1/6$ pour $S = 1/2$ [124]. Nous n'avons pas étudié en détail la physique de ces plateaux intermédiaires, colorés en marron, et seulement vérifié qu'ils possèdent comme le tube simple un degré de liberté critique, au moins dans la limite d'un petit couplage longitudinal, sans

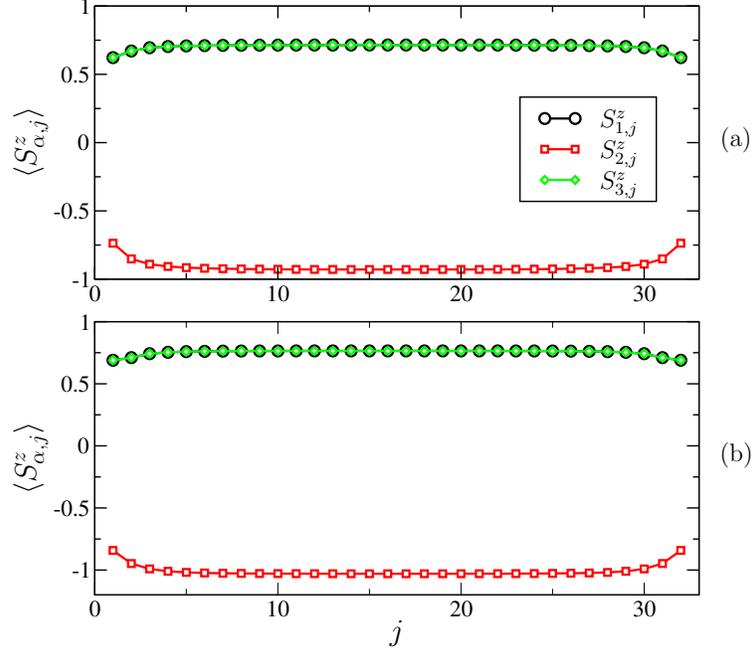


FIGURE II.21 – Aimantations locales obtenues pour un tube déformé $S = 3/2$ de taille $L = 32$. Les panneaux du bas et du haut correspondent respectivement à des couplages $J_d/J_{\perp} = 0,2$ et $J_d/J_{\perp} = 0,3$. Nous observons la présence d'un important *spin imbalance* homogène, l'aimantation de la chaîne 2 étant négative dans les deux cas.

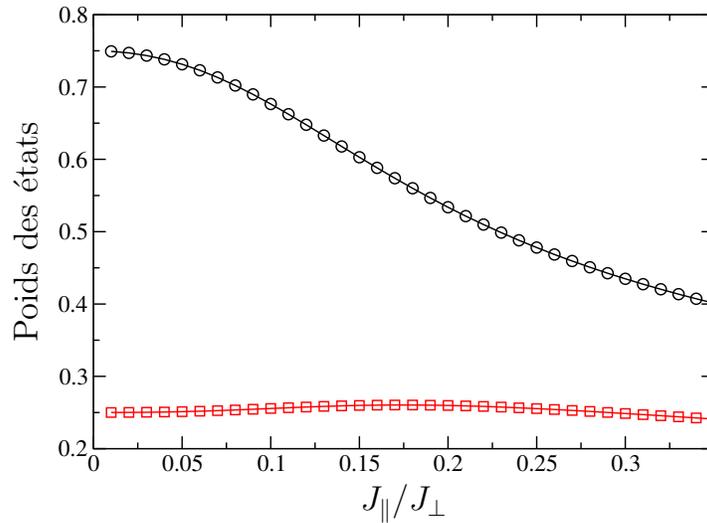


FIGURE II.22 – En noir, poids des états chiraux et en rouge, poids des deux états suivants les plus importants. Ces valeurs ont été trouvées à partir des valeurs propres de la matrice de densité réduite d'un triangle par diagonalisation exacte du tube de spin déformé pour $S = 3/2$ de taille $L = 4$. Nous voyons que même pour des valeurs très faibles de J_d/J_{\perp} l'importance des états chiraux est réduite par rapport au cas du tube simple, et en particulier les deux états suivants ont toujours un poids non négligeable.

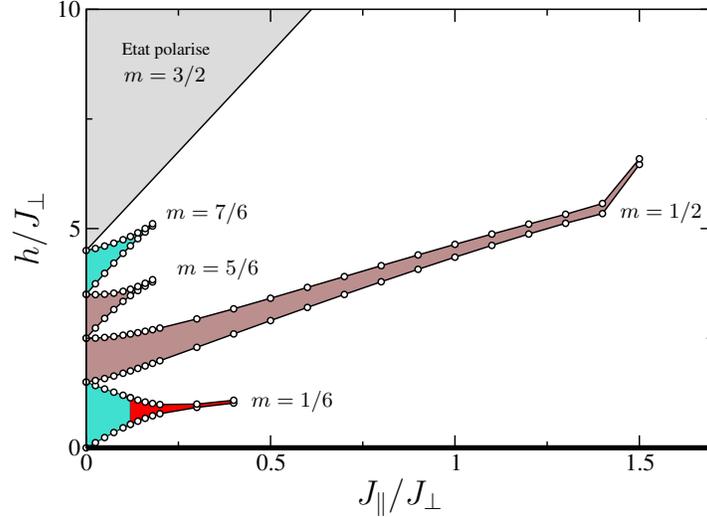


FIGURE II.23 – Diagramme de phases numérique du tube déformé pour $S = 3/2$ dans le plan $(J_d/J_{\perp}, h/J_{\perp})$. Les régions pleines correspondent aux différents plateaux d’aimantation donnés par la condition (II.56), ainsi qu’à l’état complètement polarisé $m = 3/2$ pour $h > h_{sat}$. Les régions bleues indiquent des phases critiques suivant l’étude des charges centrales, tandis que la région rouge correspond à une large phase de *spin imbalance* homogène. Comme pour le tube simple, les plateaux intermédiaires que nous n’avons pas étudiés en détail sont indiqués en marron, tandis que le trait noir épais rappelle l’existence du plateau $m = 0$.

toutefois chercher l’éventuelle présence de transitions de phase. La valeur du champ de saturation est $h_{sat} = (3J_{\perp} + 6J_d)S$.

5 Conclusion et perspectives

Au cours de ce chapitre nous avons étudié les propriétés magnétiques et non magnétiques de deux modèles de tubes de spins qui illustrent les effets que peut avoir la frustration sur des modèles de spins unidimensionnels. Nous avons en particulier montré comment, lorsque les excitations de spins sont gelées sur un plateau d’aimantation, des modes non magnétiques émergent et peuvent subir des transitions de phases lorsque les paramètres sont variés. Pour cela, nous avons dans un premier temps utilisé une approche de type large- S et obtenu une condition sur les plateaux d’aimantation ainsi que sur leurs domaines d’existence. Dans le même temps, nous avons montré qu’en allant plus loin que l’ordre gaussien, il était possible de proposer une action phénoménologique permettant de prendre en compte le comportement complexe des excitations de chiralité. Cela nous a permis de mettre en évidence la possibilité d’une phase de *spin imbalance* homogène ainsi que d’une phase ferrochirale, cette dernière rappelant l’état classique. Ensuite, nous nous sommes concentrés sur le régime de couplage fort et nous avons proposé une approche de type modèle effectif. Des calculs très simples basés sur la méthode CORE nous ont fourni des résultats numériques qui se sont révélés particulièrement précis, même si toujours insuffisants. La meilleure manière est alors d’utiliser les symétries, communes aux deux modèles, pour dériver un Hamiltonien effectif à même de capturer toute la physique de ce régime de couplage fort. Les deux modèles présentent cependant des comportements différents en couplage fort, comme suggéré par l’approche CORE. A partir des simulations DMRG pour $S = 3/2$ et de calculs

de matrice de densité réduite par diagonalisation exacte, nous avons vu que, si le tube simple peut correctement être décrit par le modèle effectif de couplage fort, le tube déformé va lui très vite quitter ce régime, même pour des valeurs assez faibles du couplage longitudinal. En particulier, nous avons confirmé que la phase ferrochirale est absente dans ce régime, et devrait l'être également dans le reste du diagramme de phases, contrairement au tube. Donc, un modèle garde trace de la configuration classique tandis que l'autre non.

Finalement, nous voudrions conclure en disant que, si nous nous sommes ici limités à l'analyse de la chiralité émergeant sous forme d'un spin-1/2 effectif sur certains plateaux, il s'agit en fait d'un principe plus général. Les plateaux intermédiaires, qui présentent de plus nombreux états de basse énergie, semblent aussi posséder un degré de liberté critique en couplage fort. De plus, les simulations numériques semblent indiquer des charges centrales plus petites que 1. Il serait donc particulièrement intéressant de porter plus d'attention à ces plateaux d'aimantation, afin de voir si cela n'est qu'un artefact numérique ou s'il y a une physique plus exotique derrière. Une autre piste d'étude serait de considérer l'effet du dopage. En effet, s'il est bien établi qu'il a pour effet de décaler et diviser les plateaux d'aimantation dans les systèmes unidimensionnels [163, 164], son influence sur le sort de la chiralité constitue une question ouverte.

Chapitre III

Tube de spin carré

Dans ce chapitre, nous allons étudier les effets de la frustration sous le point de vue des effets de la dégénérescence continue de l'état classique. Du point de vue de la physique statistique classique, les systèmes magnétiques frustrés ont depuis longtemps présenté un grand intérêt à cause du phénomène d'ordre par le désordre [165]. Nous rappellerons les principales idées s'y rapportant plus bas, mais, en quelques mots, il s'agit de la sélection par les fluctuations thermiques de certains états particuliers parmi un grand nombre, parfois extensif, d'états dégénérés à température nulle. De manière analogue, les fluctuations quantiques peuvent jouer un rôle de sélection, et ce problème est donc également intéressant dans la limite d'un spin-1/2.

Récemment, une grande attention a été portée dans la littérature sur les conséquences de la frustration en termes d'intrication à longue portée [166, 167], l'exemple le plus étudié, et encore sujet à discussion, étant le cas du liquide de spin gappé topologique \mathbb{Z}_2 pour le modèle de Heisenberg sur le réseau Kagomé [168, 169, 170]. La même phase est également en débat pour le modèle de Heisenberg $J_1 - J_2$ sur le réseau carré [171, 172]. L'idée à retenir est que ces phases exotiques ne peuvent pas être identifiées à l'aide d'un paramètre d'ordre local.

Cependant, pour certains modèles frustrés, les fonctions d'onde peuvent être obtenues comme des états-produits, soit exactement ou soit de manière approximative mais tout à fait satisfaisante. Nous allons voir, à travers l'exemple d'un modèle de tube de spin carré, comment cette émergence d'états sans intrication, et donc très différents des phases topologiques, peut se révéler comme une conséquence de l'ordre par le désordre. Notre modèle possède en effet une dégénérescence continue au niveau classique, et nous verrons que cela aura un rapport avec la sélection d'états fondamentaux extrêmement proches d'états-produits. D'autres cas ont déjà été trouvés dans la littérature, par exemple pour le modèle de Heisenberg sur le réseau Kagomé, où la fonction d'onde peut s'obtenir exactement à très haut champ comme une collection de magnons localisés [173], ou encore sur d'autres réseaux comme la chaîne en dents de scie et les réseaux damier ou pyrochlore [174]. De par la forme de ces états, ils peuvent être interprétés comme possédant un *spin imbalance*, avec les aimantations des différents sites qui sont bloquées à certaines valeurs. D'autres modèles avec des états approchés sont également présents sur les plateaux d'aimantation du Kagomé sous champ [175, 176]. Nous verrons dans notre cas que la factorisation des fonctions d'onde est en lien étroit avec l'émergence de phases de *spin imbalance* quantifié. L'intérêt de notre modèle est qu'il possède une dégénérescence minimale facile à prendre en compte dans le calcul, et que sa nature unidimensionnelle nous permet d'obtenir des résultats numériques précis ainsi que des modèles effectifs relativement simples.

Dans un premier temps, nous rappellerons les principes de base de l'ordre par le désordre sur un cas simple. Puis nous présenterons notre modèle, et montrerons par une approche d'intégrale de chemin

comment, lorsqu'un certain champ, à cause de la dégénérescence de l'état classique, devient quasi délocalisé, un *spin imbalance* quantifié peut émerger. Dans la limite de couplage fort pour $S = 1/2$ et sur le plateau d'aimantation $m = 1/4$, nous dériverons des Hamiltoniens effectifs dont les états propres seront des fonctions d'onde presque exactement factorisables, et d'où découlera la présence du *spin imbalance* quantifié. En étendant notre analyse à des spins plus grands, nous verrons que la même phase se retrouve sur le dernier plateau d'aimantation (avant saturation), avec en plus une seconde phase pour de plus grandes valeurs des couplages. Nous confirmerons ces prédictions avec des résultats DMRG, qui révéleront également que des phases de *spin imbalance* quantifié sont en fait présentes sur *tous* les plateaux d'aimantation. Finalement, nous discuterons la relation avec les résultats de l'approche semi-classique.

1 Ordre par le désordre

Nous allons ici faire un bref rappel du phénomène d'ordre par le désordre, qui a été introduit par VILLAIN *et al.* dans l'étude d'un modèle de Ising frustré avec de la dilution [165]. Pour cela, nous allons considérer l'exemple canonique du modèle XY $J_1 - J_2$ sur le réseau carré. Cet exemple a été étudié par HENLEY dans la référence [177] et nous présentons ici ses résultats. Le Hamiltonien est donné par

$$H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y), \quad (\text{III.1})$$

où $\langle ij \rangle$ et $\langle\langle ij \rangle\rangle$ dénotent respectivement des paires de premiers et de seconds voisins et \vec{S}_i est l'opérateur de spin- S . Pour $J_2 = 0$, le modèle n'est pas frustré et possède un ordre de Néel. L'ajout d'un $J_2 < 0$ ferromagnétique n'est pas frustrant et renforce cet ordre, tandis que pour un couplage antiferromagnétique le modèle devient frustré.

Nous prenons pour commencer la limite classique de ce modèle, et écrivons un état fondamental classique à $T = 0$ comme

$$\vec{S}_{\vec{r}} = \vec{e}_x \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}) + \vec{e}_y \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}), \quad (\text{III.2})$$

où le vecteur $\vec{k} = (k_x, k_y)$ doit minimiser la transformée de Fourier du couplage. Cette dernière s'écrit

$$J(\vec{k}) = J_1 (\cos(k_x) + \cos(k_y)) + J_2 (\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y)). \quad (\text{III.3})$$

Nous voyons immédiatement que pour $J_2 < J_1/2$, $J(\vec{k})$ a un seul minimum en (π, π) , ce qui correspond à l'état de Néel déjà présent à $J_2 = 0$. Pour $J_2 > J_1/2$, il y a deux minima à $(\pi, 0)$ et $(0, \pi)$, ce qui correspond à avoir un ordre antiferromagnétique (ferromagnétique) dans la direction x et ferromagnétique (antiferromagnétique) dans la direction y . En fait, il est possible de faire tourner dans le plan tous les spins d'un des deux sous-réseaux d'un angle arbitraire γ sans coût d'énergie. Autrement dit, nous pouvons construire un état fondamental en ayant sur chaque sous-réseau un état de Néel *indépendant* de celui de l'autre sous-réseau, avec une orientation relative γ arbitraire.

L'idée est ensuite de comprendre quel va être l'effet des fluctuations sur cet état fondamental dégénéré. Si nous prenons maintenant une température finie $T > 0$ qui crée des déviations autour de ces états, Henley a montré que la différence entre l'énergie libre du système et l'énergie à $T = 0$ s'écrit [177]

$$\mathcal{F}(\gamma, T) - E_0 = -\frac{1}{2}NT \ln(T) - NT S_0(\gamma), \quad (\text{III.4})$$

où N est le nombre de spins et l'entropie $S_0(\gamma)$ est

$$S_0(\gamma) = g_0 \left(\frac{J_1}{2J_2} \cos(\gamma) \right) \quad (\text{III.5})$$

à une constante près. La fonction $g_0(x)$ augmente avec x selon $g_0(x) = 0,22 + 0,32x^2 + O(x^4)$. Donc, pour minimiser l'énergie libre, il faut maximiser l'entropie en prenant une configuration colinéaire $\cos(\gamma) = \pm 1$. Les fluctuations thermiques, par l'intermédiaire de l'entropie, sélectionnent certaines configurations parmi une famille continue d'états : c'est le phénomène d'ordre par le désordre.

La question de savoir quels états seront favorisés par les fluctuations quantiques se pose également. Un calcul d'ondes de spin mène à une différence d'énergie donnée par les fluctuations de point-zéro

$$E(\gamma) - E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \omega_{\vec{q}}(\gamma) \propto g_{1/2} \left(\frac{J_1}{2J_2} \cos(\gamma) \right), \quad (\text{III.6})$$

où $g_{1/2}(x) = 0,9581 - 0,082x^2 + o(x^4)$. Les fluctuations quantiques ont donc le même effet que la température, et sélectionnent les états colinéaires $\cos(\gamma) = \pm 1$. Physiquement, une façon de voir les choses est que les états sélectionnés par la température sont ceux dont les fluctuations seront les plus « molles » [178]. Quantiquement, l'intérêt de cette analyse est essentiellement de voir comment les fluctuations peuvent finalement mener à un état ordonné, malgré les fortes fluctuations quantiques, en particulier en dimension réduite.

Depuis ces travaux initiaux, ce mécanisme de sélection a été étudié pour de nombreux systèmes, à la fois classiques et quantiques. Un exemple est celui du modèle de Heisenberg sur le réseau Kagomé, dont l'état classique à $T = 0$ est extensivement dégénéré, avec en plus des états coplanaires et non coplanaires. CHALKER *et al.* ont montré, avec des arguments analytiques et numériques que les fluctuations thermiques font émerger un ordre nématique et une sélection des états coplanaires [23]. La même conclusion a été atteinte dans la référence [24], qui a en plus traité le cas des modèles XY et Ising. Malgré ces travaux initiaux [25], l'état fondamental classique pour le modèle de Heisenberg est encore aujourd'hui sujet à discussion [179, 180, 181]. Le réseau pyrochlore a lui aussi attiré beaucoup d'attention, que ce soit sur le modèle de Heisenberg classique avec interactions entre plus proches voisins [182, 183], à plus longue portée [184, 185] ou sous champ magnétique [186]. Le modèle quantique a aussi été très étudié [187, 188, 189, 190, 191]. Un autre exemple est la version planaire du pyrochlore, le réseau damier [192, 193]. Au-delà de l'importance théorique de ce mécanisme, des études expérimentales ont révélé qu'il est à l'œuvre pour le composé pyrochlore $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ [194, 195, 196].

Dans plusieurs cas cependant, la situation n'est pas aussi simple que l'exemple que nous venons de présenter. Il arrive que les différents états (ou famille d'états) dégénéré(e)s soient toujours équivalent(e)s au niveau des fluctuations harmoniques. Il faut alors considérer l'effet des termes anharmoniques, qui doivent en principe lever la dégénérescence qui n'est pas reliée à une symétrie du modèle [188, 191, 197, 198]. Pour certain modèles comme le Kagomé, le problème est de plus très compliqué à étudier numériquement à cause de paysages de basse énergie très complexes, pour lesquels une méthode typique comme le Monte-Carlo peut être mise en difficulté. Au final, ces systèmes très frustrés à la dégénérescence classique élevée proposent donc une physique très riche et qui est toujours d'actualité.

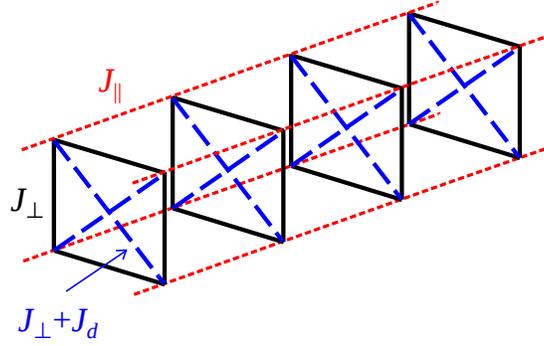


FIGURE III.1 – Structure géométrique du modèle (III.7). Les couplages J_{\parallel} et J_{\perp} sont antiferromagnétiques, tandis que J_d peut être négatif ou positif.

2 Présentation du modèle

Le modèle consiste en un tube de spin fait de quatre chaînes de Heisenberg de spins S couplées par deux types de termes de Heisenberg sur les plaquettes carrées. Le Hamiltonien s'écrit.

$$\begin{aligned} H &= J_{\perp} \sum_j \sum_{\alpha < \beta} \vec{S}_{\alpha,j} \cdot \vec{S}_{\beta,j} + J_d \sum_j (\vec{S}_{1,j} \cdot \vec{S}_{3,j} + \vec{S}_{2,j} \cdot \vec{S}_{4,j}) + J_{\parallel} \sum_j \sum_{\alpha} \vec{S}_{\alpha,j} \cdot \vec{S}_{\alpha,j+1} - h \sum_j \sum_{\alpha} S_{\alpha,j}^z \\ &= H_{\perp} + H_d + H_{\parallel} + H_h, \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

où $\vec{S}_{\alpha,j}$ est l'opérateur de spin- S , $J_{\parallel} > 0$ le couplage antiferromagnétique longitudinal, $J_{\perp} > 0$ le couplage transverse antiferromagnétique, J_d le couplage diagonal, négatif ou positif, et h le champ magnétique le long de l'axe z . L'indice $\alpha = 1, 2, 3, 4, 5 \equiv 1$ numérote la chaîne et $j = 1, \dots, L$ la position du spin le long d'une chaîne. Le tube est représenté sur la Figure III.1. Le premier terme J_{\perp} couple tous les spins sur une plaquette. Comme nous l'avons mentionné dans le chapitre précédent, les tubes de spins simples avec un nombre pair de chaînes ne sont pas frustrés. Ici, nous avons rajouté des termes diagonaux $J_{\perp} + J_d$, et pour $J_d \geq -J_{\perp}$ ces couplages apportent de la frustration. Pour $J_d = -J_{\perp}$ nous obtenons l'analogie pour quatre chaînes du tube triangulaire simple. Bien que ce modèle soit quelque peu artificiel, nous allons voir qu'il est très approprié pour discuter quelles peuvent être les conséquences du phénomène d'ordre par le désordre. Finalement, bien que les tubes pairs aient attiré peu d'attention, un autre modèle de tube carré a été étudié dans les références [199, 200], la frustration étant introduite par des couplages longitudinaux diagonaux.

2.1 Symétries

Nous voyons immédiatement que le modèle (III.7) possède un point spécial en $J_d = 0$. Tout d'abord, dans ce cas le Hamiltonien d'une plaquette peut se réécrire comme

$$H_{\boxtimes} = \frac{1}{2} J_{\perp} \vec{S}_{\boxtimes}^2 - 2J_{\perp} S(S+1) - hS_{\boxtimes}^z, \quad (\text{III.8})$$

où nous avons introduit le spin total de la plaquette $\vec{S}_{\boxtimes} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3 + \vec{S}_4$. Pour $S = 1/2$, le couplage de quatre spins nous dit que le modèle peut posséder un plateau à l'aimantation $m = 1/4$.

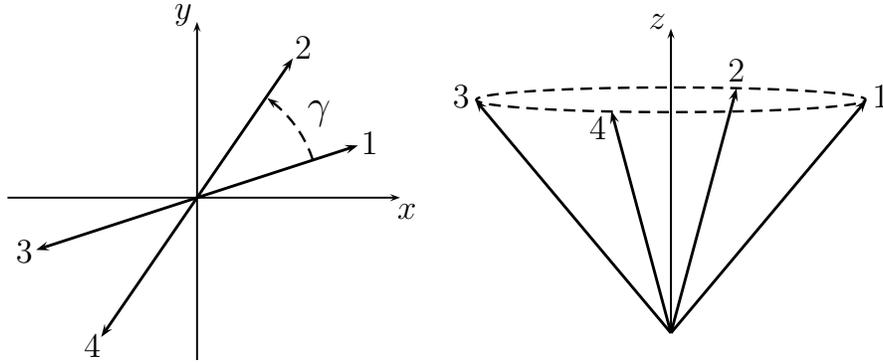


FIGURE III.2 – Configuration classique du modèle (III.7). Les quatre spins forment un spin total de zéro dans le plan xy perpendiculaire au champ (gauche) et sont inclinés de manière égale dans la direction du champ (droite). L'énergie ne dépend pas de l'angle γ entre les directions dans le plan.

D'autre part, le Hamiltonien acquiert à ce point une symétrie S_4 correspondant à toute permutation des quatre chaînes, tous les spins étant couplés entre eux de manière équivalente. En prévision de l'approche de couplage fort, il est utile de décomposer ce grand groupe de symétrie selon $S_4 = \mathbb{Z}_4 \times \mathbb{Z}_3 \times \mathbb{Z}_2$, où $\mathbb{Z}_4 = \{(), (1234), (13)(24), (1432)\}$, $\mathbb{Z}_3 = \{(), (123), (132)\}$ et $\mathbb{Z}_2 = \{(), (13)\}$. Lorsque une asymétrie diagonale $J_d \neq 0$ est ajoutée, la symétrie baisse à $C_{4v} = \mathbb{Z}_4 \times \mathbb{Z}_2 = \{(), (1234), (13)(24), (1432), (13), (12)(34), (24), (14)(23)\}$. Le tube est bien sûr aussi invariant par translation le long des chaînes.

2.2 Configuration classique

Nous considérons à présent le régime $J_d \geq 0$, car nous verrons par la suite que pour $J_d \leq 0$ la physique est en fait celle du tube non frustré. Pour $J_{\parallel} = 0$, $J_d = 0$ et $h = 0$, l'état classique sur une plaquette est déterminé par la condition $\vec{S}_{\boxtimes} = \vec{0}$. Les configurations qui satisfont cette condition peuvent être paramétrées par deux angles, dont les valeurs sont indépendantes et dont l'énergie ne dépend pas. C'est le même état classique que pour le réseau pyrochlore puisque les deux systèmes ont la même cellule unité [182]. En présence d'un champ, il y a une condition additionnelle $S_{\boxtimes}^z = h$ et seulement un de ces angles reste libre. L'état classique est alors obtenu en inclinant de la même façon tous les spins le long du champ, et en formant deux paires de spins anti-colinéaires dans le plan orthogonal xy . L'énergie est indépendante de l'angle γ entre les directions des deux paires. Cette configuration est représentée sur la Figure III.2.

Lorsque les plaquettes sont couplées par le terme J_{\parallel} , un seul angle libre γ de dégénérescence globale survit, puisque nous pouvons accommoder un ordre à $k_{\parallel} = \pi$ dans la direction longitudinale pour les composantes de spin dans le plan xy . Donc, en plus de la dégénérescence $U(1)$ habituelle, l'état classique possède bien une dégénérescence continue comme annoncé dans l'introduction de ce chapitre. Nous souhaitons insister sur le fait que, cet angle ne provenant pas d'une symétrie, nous nous attendons à ce que les fluctuations, thermiques ou quantiques, sélectionnent certaines valeurs particulières qui minimisent l'énergie libre.

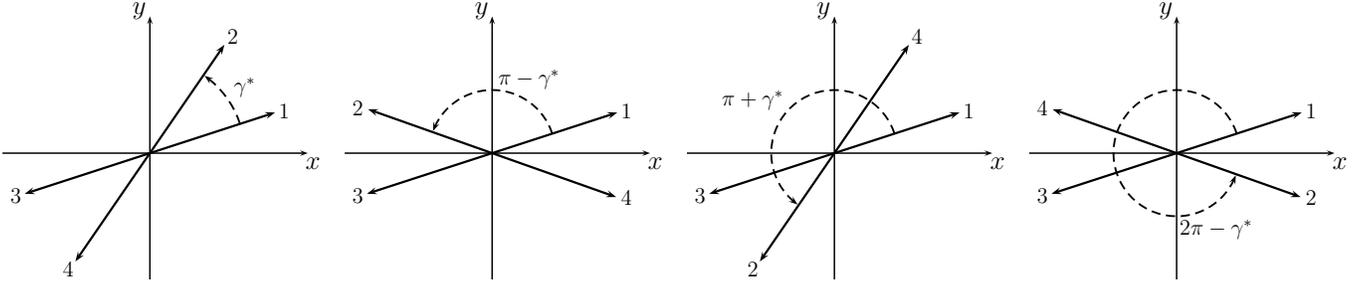


FIGURE III.3 – Les quatre états distincts pour une solution non colinéaire et non orthogonale, déterminée par un angle $\gamma^* \in]0, \pi/2[$.

Nous écrivons la solution classique comme

$$\vec{S}_{\alpha,j} = S \begin{pmatrix} \sin(\theta^{(0)})\cos(\varphi_{\alpha,j}^{(0)}) \\ \sin(\theta^{(0)})\sin(\varphi_{\alpha,j}^{(0)}) \\ \cos(\theta^{(0)}) \end{pmatrix}, \quad (\text{III.9})$$

où $\varphi_{1,j}^{(0)} = j\pi, \varphi_{2,j}^{(0)} = \gamma + j\pi, \varphi_{3,j}^{(0)} = (j+1)\pi, \varphi_{4,j}^{(0)} = \gamma + (j+1)\pi$ et $\cos\theta^{(0)} = \frac{h}{2S(2J_{\parallel} + 2J_{\perp} + J_d)}$. En faisant ce choix, nous avons explicitement brisé une symétrie \mathbb{Z}_3 . En effet, puisque nous sommes au point S_4 , le fait de choisir les spins 1 et 3 comme étant anti colinéaires dans le plan xy est arbitraire, et nous aurions tout aussi bien pu prendre la paire 1 et 2 ou la paire 1 et 4. Une fois que ce choix est fait, nous pouvons discuter de différences selon la valeur de γ , que nous définissons comme l'angle entre les spins 1 et 2 et qui a une périodicité de 2π . En regardant la Figure III.2, il apparaît que les cas $\gamma = 0, \pi$ et $\gamma = \pi/2, 3\pi/2$ mènent tous les deux à deux états distincts, tandis que pour une valeur générique de γ différente d'un multiple de $\pi/2$, il y a quatre états inéquivalents. L'angle entre les spins 1 et 2 prend alors les valeurs $\gamma = \gamma^*, \pi - \gamma^*, \pi + \gamma^*, 2\pi - \gamma^*$, où $\gamma^* \in]0, \pi/2[$ (pour $\gamma^* = 0, \pi/2$ nous retrouvons le cas précédent avec seulement deux états distincts parmi ces quatre). Cette situation est résumée sur la Figure III.3.

Pour distinguer ces quatre états, nous proposons d'utiliser les deux observables suivantes

$$\begin{aligned} \chi^{1234} &= \sum_{\alpha}^4 (\vec{S}_{\alpha} \times \vec{S}_{\alpha+1})^z, \\ Q^{1234} &= (\vec{S}_1 \times \vec{S}_2) \cdot (\vec{S}_3 \times \vec{S}_4). \end{aligned} \quad (\text{III.10})$$

L'opérateur χ^{1234} est l'habituelle mesure de la composante z de la chiralité vectorielle, tandis que la signification du second opérateur est moins évidente. Elle sera discutée dans la Section 4. Dans les quatre états, ces observables valent

$$\begin{aligned} \langle \chi^{1234} \rangle &\sim (\sin(\gamma^*), \sin(\gamma^*), -\sin(\gamma^*), -\sin(\gamma^*)), \\ \langle Q^{1234} \rangle &\sim (q_-(\gamma^*), q_+(\gamma^*), q_+(\gamma^*), q_-(\gamma^*)), \end{aligned} \quad (\text{III.11})$$

où $q_{\pm}(\gamma^*) = (2m^2 - S^2)\sin^2(\gamma^*) + m^2(1 \pm \cos(\gamma^*))^2$. Hors du point symétrique, la forme de l'état classique ne change pas, mais nous n'avons plus le choix dans la façon de former des paires anticollinéaires dans le plan, il faut forcément grouper les spins 1 et 3 ensemble. Il s'agit simplement du fait que la symétrie \mathbb{Z}_3 n'est plus présente.

Pour terminer, nous voulons discuter les relations de symétrie entre ces quatre états. Une fois que le choix de former la paire 1 et 3 est fait, nous devons considérer uniquement l'effet des opérations de symétrie de $C_{4v} = \{(), (1234), (13)(24), (1432), (13), (12)(34), (24), (14)(23)\}$. Les états sont invariants sous l'opération $(13)(24)$. Les réflexions (13) et (24) connectent les états γ^* et $\pi + \gamma^*$ d'un côté et $\pi - \gamma^*$ et $2\pi - \gamma^*$ d'un autre côté. Sous les permutations cycliques (1234) et (1432) , l'état γ^* est envoyé sur l'état $\pi - \gamma^*$, et même chose pour l'état $\pi + \gamma^*$ qui devient l'état $2\pi - \gamma^*$. Enfin, les réflexions $(12)(34)$ et $(14)(23)$ transforment l'état avec un angle γ^* en celui avec $2\pi - \gamma^*$ et l'état $\pi - \gamma^*$ en $\pi + \gamma^*$.

3 Approche par intégrale de chemin

Cette section est consacrée à l'application de la méthode d'intégrale de chemin au cas du tube carré frustré. Nous allons voir comment peut émerger une phase de *spin imbalance* particulière puisque quantifiée. A l'origine de ce phénomène se trouve la frustration du modèle et la dégénérescence classique qui en découle, et qui peut se traduire par la quasi-délocalisation d'un certain champ angulaire dans l'action.

3.1 Action de basse énergie

Par commodité, nous rappelons ici l'expression des opérateurs de spins développés à l'ordre deux

$$S_{\alpha,j}^{\pm} \approx (-1)^j e^{\pm i[\varphi_{\alpha,j}^{(0)} + \varphi_{\alpha,j}]} S \left[\sin(\theta_0) - \frac{m}{S^2 \sin(\theta_0)} \Pi_{\alpha,j} - \frac{1}{2} \frac{S^2}{S^2 - m^2} \frac{1}{S^2 \sin(\theta_0)} \Pi_{\alpha,j}^2 \right], \quad (\text{III.12})$$

$$S_{\alpha,j}^z \approx S \cos(\theta_0) + \Pi_{\alpha,j}.$$

Sur le modèle de ce qui a été fait dans le chapitre précédent, nous partons donc des valeurs des angles de la configuration classique (III.9) et à partir de ces expressions des opérateurs de spins nous arrivons à l'action

$$S[\{\Pi_{\alpha}\}, \{\varphi_{\alpha}\}] = \int d\tau dx \sum_{\alpha} \left\{ \frac{1}{2} a J_{\parallel} (S^2 - m^2) (\partial_x \varphi_{\alpha})^2 + a \left(2J_{\parallel} + \frac{J_{\perp} + J_d}{2} \frac{S^2}{S^2 - m^2} \right) \Pi_{\alpha}^2 \right. \\ + \frac{J_{\perp}}{2} \cos(\gamma) \frac{S^2 - m^2}{a} (-1)^{\alpha} (\varphi_{\alpha} - \varphi_{\alpha+1})^2 + \frac{J_{\perp} + J_d}{4} \frac{S^2 - m^2}{a} (\varphi_{\alpha} - \varphi_{\alpha+2})^2 \\ + a J_{\perp} \left(1 + (-1)^{\alpha+1} \cos(\gamma) \frac{m^2}{S^2 - m^2} \right) (\Pi_{\alpha} \Pi_{\alpha+1}) + a \frac{J_{\perp} + J_d}{2} \left(1 - \frac{m^2}{S^2 - m^2} \right) (\Pi_{\alpha} \Pi_{\alpha+2}) \\ \left. + a J_{\perp} m \sin(\gamma) \varphi_{\alpha} (\Pi_{\alpha-1} - \Pi_{\alpha+1}) + i \left(\frac{S - m}{a} \right) \partial_{\tau} \varphi_{\alpha} - i \Pi_{\alpha} \partial_{\tau} \varphi_{\alpha} \right\}, \quad (\text{III.13})$$

où a est la constante du réseau et m l'aimantation par spin. Nous voyons que l'angle γ n'intervient logiquement que pour les couplages J_{\perp} , et cette action est bien invariante par les symétries du modèle (par exemple sous la permutation (24) combinée à au changement $\gamma \rightarrow \pi + \gamma$, voir les remarques sur la configuration classique). Les termes de couplages du type $\varphi_{\alpha} (\Pi_{\alpha-1} - \Pi_{\alpha+1})$ disparaissent pour une solution coplanaire $\gamma = 0, \pi$, comme discuté dans le chapitre précédent. Cette action est diagonalisée

par la transformation $\vec{\tilde{\Pi}} = U\vec{\Pi}$, où la matrice U est

$$P = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{III.14})$$

Nous appliquons de même cette transformation aux champs angulaires $\vec{\phi} = U\vec{\varphi}$ et nous obtenons l'action

$$S = \int d\tau dx \left\{ \sum_{\alpha} \left[\frac{1}{2} \lambda_{\alpha} \tilde{\Pi}_{\alpha}^2 + \frac{1}{2} \lambda_x (\partial_x \phi_{\alpha})^2 \right] + \frac{1}{2} m_1^2 \phi_1^2 + \frac{1}{2} m_3^2 \phi_3^2 + \mu [\tilde{\Pi}_1 \phi_3 - \tilde{\Pi}_3 \phi_1] \right. \\ \left. + i2 \frac{S-m}{a} \partial_{\tau} \phi_4 - i \sum_{\alpha} \tilde{\Pi}_{\alpha} \partial_{\tau} \phi_{\alpha} \right\}, \quad (\text{III.15})$$

où les constantes sont données par

$$\lambda_{1,3} = 4aJ_{\parallel} + 2a [J_d + J_{\perp}(1 \pm \cos(\gamma))] \frac{m^2}{S^2 - m^2}, \quad \lambda_2 = 4aJ_{\parallel} + 2aJ_d, \quad \lambda_4 = 4aJ_{\parallel} + 2a(J_d + 2J_{\perp}), \\ \lambda_x = aJ_{\parallel} (S^2 - m^2), \quad m_{1,3}^2 = 2 \frac{S^2 - m^2}{a} [J_d + J_{\perp}(1 \pm \cos(\gamma))], \quad \mu = 2mJ_{\perp} \sin(\gamma). \quad (\text{III.16})$$

Nous pouvons finalement intégrer les champs massifs $\tilde{\Pi}_{\alpha}$ et l'action devient

$$S = \int d\tau dx \left\{ \sum_j \left[\frac{1}{2\lambda_{\alpha}} (\partial_{\tau} \phi_{\alpha})^2 + \frac{1}{2\lambda_x} (\partial_x \phi_{\alpha})^2 \right] + \frac{1}{2} \left(m_1^2 - \frac{\mu^2}{\lambda_3} \right) \phi_1^2 + \frac{1}{2} \left(m_3^2 - \frac{\mu^2}{\lambda_1} \right) \phi_3^2 \right. \\ \left. + i\mu \left(\frac{1}{\lambda_1} \phi_3 \partial_{\tau} \phi_1 - \frac{1}{\lambda_3} \phi_1 \partial_{\tau} \phi_3 \right) + i2 \frac{S-m}{a} \partial_{\tau} \phi_4 \right\}. \quad (\text{III.17})$$

Nous remarquons que seuls les champs ϕ_1 et ϕ_3 possèdent une dépendance en γ , et nous pouvons vérifier que les masses effectives $M_1^2 = m_1^2 - \frac{\mu^2}{\lambda_3}$ et $M_3^2 = m_3^2 - \frac{\mu^2}{\lambda_1}$ sont bien positives.

Cette action constitue l'élément principal de la discussion sur la sélection d'un angle γ , et il est utile de s'y arrêter afin de comprendre le rôle important que joue le champ ϕ_2 . Nous souhaitons insister sur l'absence de terme de masse m_2^2 pour ce champ. Nous avons vu dans le chapitre précédent que pour le tube triangulaire déformé une masse s'annulait après intégration sur les champs $\tilde{\Pi}_{\alpha}$. Ici, si nous revenons un pas en arrière avant intégration, dans l'action (III.15) la masse était déjà absente, et nous trouvons que ϕ_2 se comporte comme un champ libre. En revenant aux variables d'origine φ_{α} , ce champ est interprété comme bouger solidairement les spins 1 et 3 d'un côté et 2 et 4 de l'autre, ce qui revient à faire changer γ . Autrement dit, nous retrouvons le fait que classiquement une telle déformation ne coûte pas d'énergie. Cependant, comme nous l'avons dit précédemment, cette liberté dans le choix de γ ne provient pas d'une symétrie du Hamiltonien. La symétrie $U(1)$ du modèle (III.7) est prise en compte par le champ ϕ_4 . Donc, le champ ϕ_2 ne peut pas être un vrai mode de Goldstone, et l'action que nous avons obtenue ne reflète pas son vrai comportement. L'idée est alors que la dépendance de l'énergie libre en γ à travers ϕ_1 et ϕ_3 correspond à un certain potentiel localisant pour le champ ϕ_2 . De cette manière, il perd sa nature de champ libre, en accord avec l'idée que la dégénérescence est forcément levée. Dans le cas d'approche par ondes de spin quantique, c'est le même raisonnement que

nous avons évoqué précédemment dans le cas où si l'ordre harmonique ne sélectionne aucun état, les termes anharmoniques doivent le faire [201]. Plutôt que de calculer une action au-delà de l'ordre gaussien, nous allons donc calculer l'énergie libre à cet ordre et sa forme nous donnera une indication sur celle de ce potentiel, et notamment son nombre de minima.

En inspectant l'action (III.17), nous remarquons que certaines valeurs de γ jouent un rôle particulier. Si $J_d = 0$ (point S_4), pour $\gamma = 0$ (π), les champs ϕ_1 et ϕ_3 se découplent car $\mu = 0$ et en même temps la masse M_3^2 (M_1^2) s'annule. Nous terminons ainsi avec le champ ϕ_3 (ϕ_1) qui a aussi une forme de champ libre. L'explication est la même que pour ϕ_2 , puisque pour cette valeur de l'angle, une déformation où nous groupons les spins 1 et 4 (1 et 2) et les spins 2 et 3 (3 et 4) ne coûte pas d'énergie, mais uniquement au point symétrique. De la même façon il faut considérer un potentiel localisant aux ordres suivants qui corrigera cette apparence de champ libre.

Un autre couple de points spéciaux est $\gamma = \pi/2, 3\pi/2$. En effet dans ce cas les coefficients pour les champs ϕ_1 et ϕ_3 sont égaux. Nous pouvons alors, comme pour le tube triangulaire, introduire les deux champs conjugués $\Psi = \phi_1 + i\phi_3$ et $\Psi^* = \phi_1 - i\phi_3$ qui représentent les états de chiralité que nous retrouverons dans la Section 4. La même analyse sur l'importance du terme complexe $\phi_3\partial_\tau\phi_1 - \phi_1\partial_\tau\phi_3$ pourrait être faite. Cependant, nous allons voir ci-dessous que ces deux angles ne sont pas favorisés par les fluctuations, et l'analyse de couplage fort montrera, elle aussi, que la chiralité ne joue pas de rôle pour ce modèle.

3.2 Energie libre et sélection

Nous allons à présent calculer la partie de l'énergie libre qui dépend de γ et la minimiser afin de voir quels états sont sélectionnés par les fluctuations quantiques. Nous prendrons aussi la limite classique pour étudier l'effet de la température. Nous repartons de l'action (III.17) et ne gardons que la partie des champs ϕ_1 et ϕ_3 . En introduisant la transformée de Fourier

$$\phi_\alpha(x, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta L}} \sum_{k, \omega_n} e^{i(kx - \omega_n \tau)} \phi_\alpha(k, \omega_n), \quad (\text{III.18})$$

où les $\omega_n = 2\pi n/\beta$, $n \in \mathbb{Z}$ et β la température inverse, sont les fréquences de Matsubara bosoniques (périodicité en temps imaginaire), l'action se réécrit

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2} \sum_{k, \omega_n} \left\{ \left[\frac{1}{\lambda_1} \omega_n^2 + \frac{1}{\lambda_x} k^2 + \left(m_1^2 - \frac{\mu^2}{\lambda_3} \right) \right] |\phi_1(k, \omega_n)|^2 + \left[\frac{1}{\lambda_3} \omega_n^2 + \frac{1}{\lambda_x} k^2 + \left(m_3^2 - \frac{\mu^2}{\lambda_1} \right) \right] |\phi_3(k, \omega_n)|^2 \right. \\ &\quad \left. + 2\mu\omega_n \left[\frac{1}{\lambda_3} \phi_1(k, \omega_n) \phi_3^*(k, \omega_n) - \frac{1}{\lambda_1} \phi_1^*(k, \omega_n) \phi_3(k, \omega_n) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k, \omega_n} \begin{pmatrix} \phi_1^* \\ \phi_3^* \end{pmatrix}^T \mathcal{M} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{III.19})$$

En suivant les étapes données dans les références [202, 203], nous trouvons l'expression standard de l'énergie libre

$$\mathcal{F} = \sum_k \left\{ \frac{\omega_+ + \omega_-}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left([1 - e^{-\beta\omega_+}] [1 - e^{-\beta\omega_-}] \right) \right\}, \quad (\text{III.20})$$

où les fréquences propres sont $\omega_\pm^2 = (p \pm \sqrt{\Delta})/2$, $\Delta = p^2 - 4q$, avec p, q des fonctions compliquées des coefficients (III.16) et qui contiennent donc la dépendance en γ de l'énergie libre. L'interprétation de

cette formule est transparente : le premier terme est l'énergie de point zéro donné par les fluctuations quantiques tandis que le second, qui disparaît dans la limite $\beta \rightarrow \infty$, correspond aux fluctuations thermiques. L'expression compliquée des fréquences ω_{\pm} en fonction de γ fait que la sélection n'est pas visible à première vue et l'énergie doit être calculée numériquement en effectuant la somme sur les k dans la zone de Brillouin.

Nous commençons par prendre la limite classique en négligeant l'énergie de point zéro. Remarquons que cette limite aurait pu être prise dès la forme (III.17) en oubliant la dépendance en τ des champs, *i.e.* $\partial_{\tau} = 0$, et en faisant sortir un facteur β selon $\int d\tau = \beta$. Les deux méthodes donnent bien sûr le même résultat. Sur la Figure III.4, nous montrons l'énergie libre calculée dans le régime classique pour différentes valeurs de J_{\parallel}/J_{\perp} et de J_d/J_{\perp} . Nous voyons qu'il y a deux minima correspondant aux configurations coplanaires $\gamma = 0, \pi$, et ce pour toutes les valeurs des couplages. Ce résultat est en accord avec ce que nous avons dit précédemment sur le fait que les fluctuations vont sélectionner les configurations ayant le plus de modes mous, ce qui est bien le cas ici au point $J_d = 0$ puisque la masse d'un des deux champs ϕ_1 ou ϕ_3 s'annule.

Les résultats dans la limite quantique $\beta \rightarrow \infty$ où seule l'énergie de point zéro contribue sont présentés sur la Figure III.5 et sont beaucoup plus surprenants. Nous avons calculé l'énergie libre en fonction de γ pour différentes valeurs des couplages, à la fois au point symétrique et pour une asymétrie finie. Dans les deux cas, deux régimes apparaissent. Pour un couplage J_{\parallel}/J_{\perp} assez large, nous trouvons la même sélection que pour les fluctuations thermiques, avec la sélection des configurations colinéaires d'angles $0, \pi$. Par contre, pour de faibles couplages J_{\parallel}/J_{\perp} , l'énergie libre est minimisée par les quatre valeurs non triviales données par un $\gamma^* \in]0, \pi/2[$, qui varie de plus légèrement avec le couplage. L'énergie libre présente donc quatre minima, comme ce que nous avons discuté dans la Section 2.2. Plus précisément, la présence de deux barrières d'énergie différentes dit aussi qu'il y a deux groupes de minima non équivalents. Le maximum global à $\pi/2$ sépare les deux minima à $\gamma = \pi - \gamma^*$ et $\pi + \gamma^*$ des deux autres, et sont eux-mêmes séparés par un maximum, local cette fois-ci, et nous allons commenter ce point plus bas.

Il est étonnant que les deux types de fluctuations agissent dans des directions différentes, au contraire du cas canonique du modèle XY $J_1 - J_2$ [177] que nous avons décrit dans la Section 1. C'est particulièrement vrai puisque nous avons remarqué précédemment que, pour $J_d = 0$, sélectionner les états colinéaires $\gamma = 0, \pi$ implique d'avoir un second champ pour lequel la masse s'annule. Dans l'image habituelle de l'ordre par le désordre, cet état devrait a priori être favorisé par les fluctuations puisqu'il possède un second mode mou. Nous n'avons malheureusement pas d'explication sur cette différence dans le cas présent, peut-être s'agit-il d'une limitation de notre approche. Cependant, il est important de noter que l'énergie de point zéro dans l'expression (III.20) dépend de la somme $\omega_+ + \omega_-$ des deux modes, tandis que la partie thermique est essentiellement donnée par le produit $\omega_+ \omega_-$. A partir de là, les deux types de fluctuations pourraient en principe avoir des effets différents sur la levée de dégénérescence. Pour le modèle XXZ sous champ du réseau Kagomé, la référence [175] a argumenté que c'est effectivement ce qui se produit. Pour des systèmes en dimensions plus élevées, cette situation est intéressante puisqu'elle induirait une transition de phase quand la température varie et que le système passe du régime classique au régime quantique.

3.3 Délocalisation et *spin imbalance*

Au-delà de la position des minima de \mathcal{F} , nous avons pointé précédemment l'absence de masse pour le champ ϕ_2 dans l'action (III.17) et la nécessité pour ce champ d'avoir un potentiel localisant. Se pose alors la question de savoir si ce potentiel va être assez profond pour localiser effectivement le

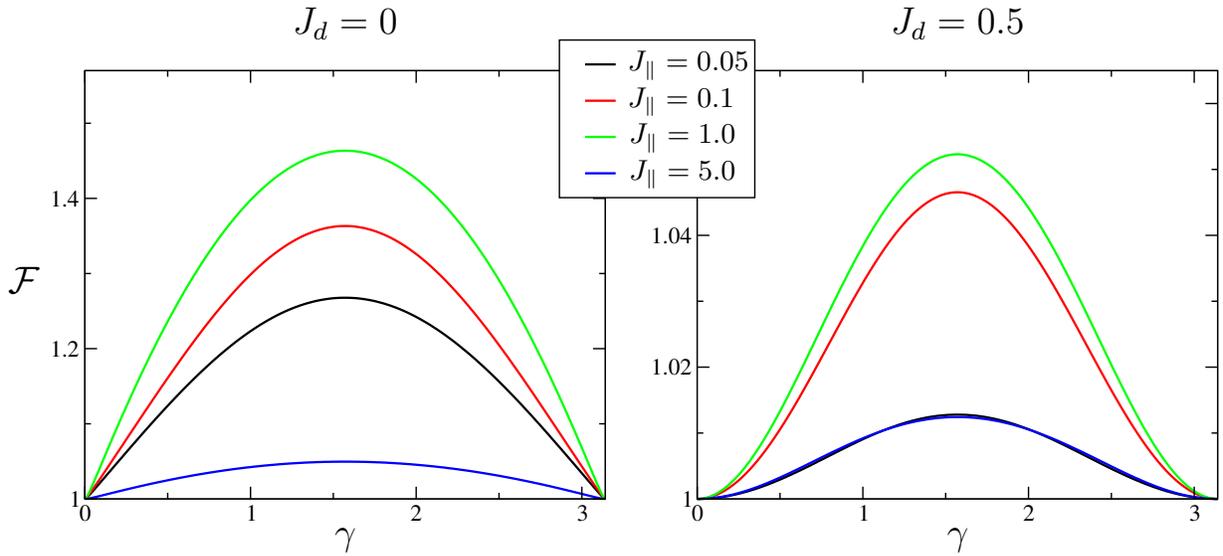


FIGURE III.4 – Energie libre en fonction de γ dans la limite classique, calculée pour $S = 1/2$, $m = 1/4$ et plusieurs valeurs du couplage longitudinal J_{\parallel}/J_{\perp} . A gauche, nous montrons les résultats au point symétrique $J_d = 0$, et à droite pour une asymétrie finie $J_d/J_{\perp} = 0,5$.

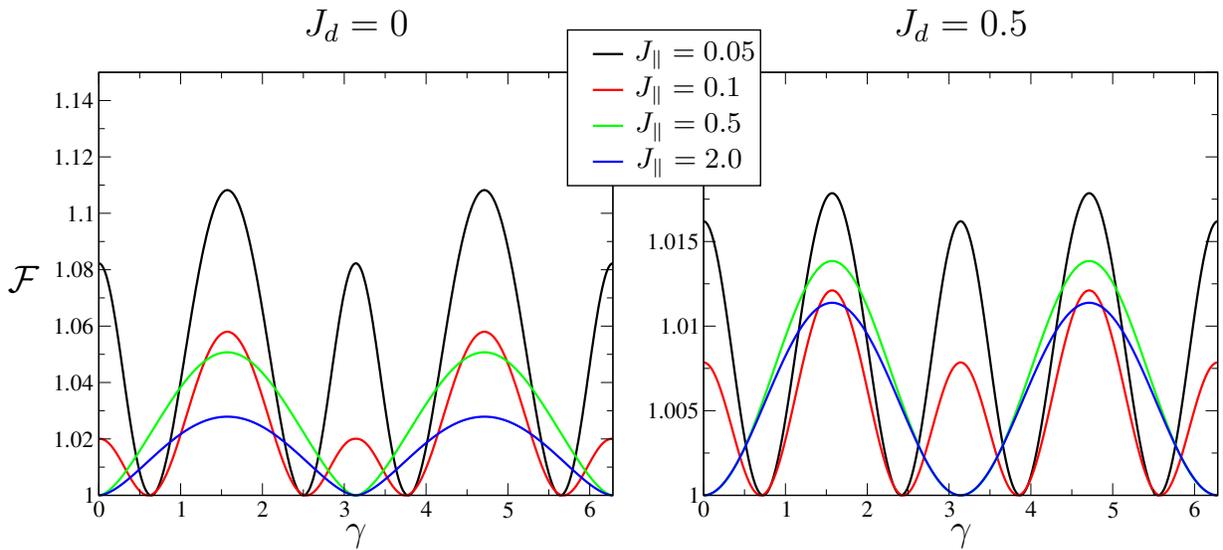


FIGURE III.5 – Energie libre en fonction de γ dans la cas quantique, calculée pour $S = 1/2$, $m = 1/4$ et plusieurs valeurs de J_{\parallel}/J_{\perp} . A gauche, nous montrons les résultats au point symétrique $J_d = 0$, et à droite pour une asymétrie finie $J_d/J_{\perp} = 0,5$. Dans les deux cas nous observons la présence de deux régimes selon la force du couplage longitudinal.

champ, ou s'il va en fait pouvoir passer librement d'un minimum à l'autre par effet tunnel, ou même être presque complètement délocalisé. Cette question été soulevée par CHANDRA *et al.* dans le cadre du modèle XY $J_1 - J_2$ [204] et se traduit dans ce cas par l'émergence d'une symétrie \mathbb{Z}_2 . Pour le tube nous retrouvons la même situation et nous allons discuter ce point en détail.

Nous prenons le cas le plus simple du régime d'assez large J_{\parallel}/J_{\perp} , où $\gamma = 0, \pi$. La forme de double puits de l'énergie libre nous renseigne sur la forme du potentiel pour ϕ_2 , qui introduit donc une symétrie \mathbb{Z}_2 . Deux scénarios sont donc possibles. Si la barrière entre les deux minima du potentiel est suffisamment basse et que dans le même temps la raideur du champ (donnée par $1/\lambda_2$ à l'ordre gaussien) est assez faible, le champ ϕ_2 va pouvoir s'enrouler et ainsi passer d'un minimum à l'autre par effet tunnel. La symétrie \mathbb{Z}_2 n'est donc pas brisée. Cela correspond à avoir un état fondamental unique, à la fois pour $J_d = 0$ et $J_d > 0$. Dans le cas contraire d'une barrière de potentiel trop haute par rapport à la raideur, l'effet tunnel va être négligeable et le champ ϕ_2 sera localisé dans l'un des deux minima : la symétrie \mathbb{Z}_2 est cette fois brisée. Cela donne une dégénérescence de deux pour $J_d > 0$ et de trois pour $J_d = 0$, puisqu'il faut rajouter un troisième état distinct qui aurait été obtenu en commençant avec une configuration classique différente (la symétrie \mathbb{Z}_3 brisée par notre paramétrage (III.9)). Puisque l'observable Q^{1234} prend les valeurs différentes 0 et $\pm 4m^2(S^2 - m^2)$ dans chacun de ces trois états et que la chiralité est nulle, la phase correspondante est caractérisée par un ordre à $k_{\parallel} = 0$ de l'opérateur Q^{1234} . D'après les résultats de couplage fort et numériques, nous retrouverons bien cette phase. Cependant, dans notre cas l'activation thermique est toujours à l'œuvre puisque la symétrie \mathbb{Z}_3 ne peut pas être brisée à température finie pour un système unidimensionnel. Cela ne pourra se produire que pour le cas quantique.

Pour le régime à quatre minima que nous avons trouvé dans le régime de faible J_{\parallel}/J_{\perp} , leur existence ainsi que celle des deux barrières de potentiel différentes rend la situation plus compliquée car il faut considérer plusieurs types d'effet tunnel :

i) Lorsque la raideur du champ est petite et que le potentiel est assez plat, le champ peut circuler entre les quatre minima et l'état fondamental est donc unique et désordonné.

ii) Dans une situation intermédiaire, seul le passage entre les deux minima à $\gamma = \pi - \gamma^*$ et $\gamma = \pi + \gamma^*$ d'un côté et ceux à $\gamma = \gamma^*$ et $\gamma = -\gamma^*$ est possible, tandis que la barrière d'énergie à $\gamma = \pi/2$ est trop importante pour que l'effet tunnel permette de passer entre les deux double-puits. La dégénérescence de l'état fondamental est alors de 2 pour $J_d > 0$ et $2 \times 3 = 6$ au point symétrique.

iii) Quand tout effet tunnel est supprimé, le champ est localisé dans l'un des quatre minima. Cela conduit à une dégénérescence de 4 pour $J_d > 0$ et $4 \times 3 = 12$ au point symétrique.

Cependant, nous allons voir à partir des résultats numériques et d'Hamiltoniens effectifs que pour un petit J_{\parallel}/J_{\perp} une phase ordonnée antiferromagnétiquement apparaît. Dans le développement (III.12) des opérateurs de spins, nous avons supposé que la symétrie de translation n'est pas brisée et par construction nous ne pouvons détecter que des phases ordonnées à $k_{\parallel} = 0$. Cela nécessiterait d'ajouter des degrés de liberté supplémentaires en doublant la cellule unité, comme ce qui peut être fait dans l'approche traditionnelle des phases de Néel par le NLSM [12]. Nous développerons un peu plus ce point dans la Section 6.

Nous allons maintenant discuter la possible émergence de phases de *spin imbalance* dont la valeur est *quantifiée* et dont les fluctuations sont presque nulles. Cela est dû à la quasi-délocalisation du champ ϕ_2 . Pour commencer, en utilisant la relation $S_{\alpha}^z = m + \Pi_{\alpha}$, nous voyons que la manière d'obtenir une renormalisation de l'aimantation classique différente selon la chaîne est d'avoir une valeur moyenne non nulle pour un des champs $\tilde{\Pi}_{\alpha}$ (voir le chapitre précédent). Si nous prenons le champ $\tilde{\Pi}_2$, cela correspond à avoir une aimantation égale pour les spins 1 et 3 et une autre valeur pour les spins 2 et 4, tel que $\langle S_1^z - S_2^z + S_3^z - S_4^z \rangle = 2\langle \tilde{\Pi}_2 \rangle \neq 0$. D'un autre côté, lorsque le potentiel localisant de ϕ_2 devient

suffisamment plat avec en même temps une raideur faible, par effet tunnel le champ devient de plus en plus délocalisé, c'est-à-dire que sa dispersion $\Delta\phi_2$ devient grande. Dans le cas le plus extrême, la fonction d'onde va devenir très similaire à une onde plane. Le point clé est alors de noter que le champ $\tilde{\Pi}_2$, défini comme son conjugué, est alors de plus en plus centré sur une de ses valeurs propres à cause du principe d'incertitude, *i.e.* $\Delta\tilde{\Pi}_2 \rightarrow 0$. Puisque les variables angulaires originelles Π_α sont définies entre 0 et 2π , les Π_α ont des valeurs propres entières $0, \pm 1, \pm 2, \dots$, d'où des valeurs propres demi-entières $0, \pm 1/2, \pm 1, \dots$ pour les $\tilde{\Pi}_\alpha$ suivant la transformation (III.14). Si cette quasi-délocalisation se produit, cela se traduira donc par une phase de *spin imbalance* dont les valeurs sont quantifiées : $\langle S_1^z - S_2^z + S_3^z - S_4^z \rangle = \pm 1, \pm 2 \dots$. Evidemment, cela n'aura pas lieu pour la valeur propre nulle, qui est la valeur propre favorisée par le terme cinétique $\tilde{\Pi}_2^2$ dans l'action (III.15). Mais même dans ce cas où la valeur moyenne est nulle, cet effet de blocage se manifesterait à travers la suppression des fluctuations de l'observable du *spin imbalance*. Il nous dit également que la valeur du *spin imbalance* sera très peu sensible aux variations des paramètres du Hamiltonien. Toutes ces propriétés se retrouveront dans les résultats des Section 4 et 5 pour la phase de *spin imbalance* alterné, le mécanisme à son origine étant le même que la phase soit homogène comme ici ou non (voir la discussion de la Section 6).

Pour conclure, nous voulons insister sur la spécificité d'une telle phase, dont la nature est très différente du *spin imbalance* que nous avons trouvé dans le Chapitre II précédent pour le tube triangulaire. Dans ce cas, il n'était *a priori* pas contraint à prendre une valeur particulière, ni, surtout, à avoir des fluctuations nulles. Suivant notre interprétation, cette différence résulte directement de la dégénérescence classique, présente pour le tube carré mais pas le triangulaire.

4 Approche de couplage fort

Dans cette section, nous étudions le modèle dans le régime de couplage fort en dérivant des Hamiltoniens effectifs jusqu'au deuxième ordre en J_\parallel . Nous commençons par traiter le cas $S = 1/2$ sur le plateau $m = 1/4$ et montrons la présence d'une phase de *spin imbalance* alterné. Le paramètre d'ordre correspondant est quantifié et ses fluctuations sont très fortement réduites. Puis nous étendrons ces résultats à des spins- S pour lesquels une nouvelle phase apparaît.

4.1 Cas $S = 1/2$

4.1.1 Etude d'une plaquette pour $S = 1/2$

Nous considérons le Hamiltonien d'une seule plaquette de spins $S = 1/2$ donné par

$$H_{\boxtimes} = J_\perp \sum_{\alpha < \beta} \vec{S}_\alpha \cdot \vec{S}_\beta + J_d (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_3 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_4) - h \sum_\alpha S_\alpha^z. \quad (\text{III.21})$$

Rappelons que pour $J_d = 0$ le tube a une symétrie S_4 (voir Sec. 2.1). Cependant, pour résoudre ce Hamiltonien il est plus convenable d'utiliser le fait que ce modèle a la symétrie C_{4v} , plus simple à manier et qui est de toute manière le groupe de symétrie dès que $J_d \neq 0$. Utilisant la symétrie de permutation circulaire autour d'une plaquette, ou encore de translation dans la direction transverse, nous choisissons d'écrire les états propres de H_{\boxtimes} comme étant également des états propres de l'opérateur de permutation circulaire $P_{\square} : \vec{S}_\alpha \rightarrow \vec{S}_{\alpha+1}$. Nous travaillons sur le plateau $m = 1/4$ et les quatre états avec $S_{\boxtimes}^z = 1$

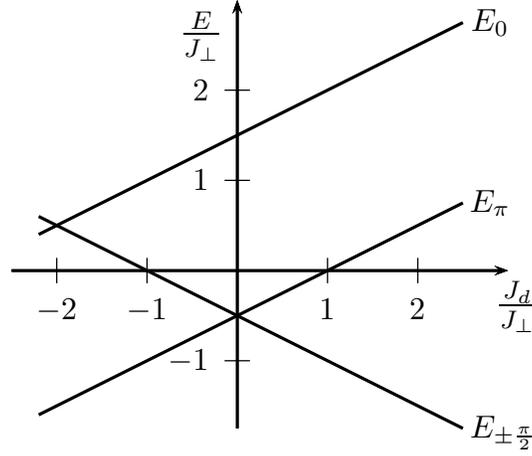


FIGURE III.6 – Niveaux d'énergie du Hamiltonien d'une plaquette (III.21) en fonction de J_d/J_\perp . Trois régimes peuvent être distingués selon que J_d/J_\perp est négatif, positif ou nul, et la dégénérescence du fondamental est respectivement de un, trois et deux.

sont

$$\begin{aligned}
 |1, 1, \pi/2\rangle &= \frac{1}{2}(|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + \omega |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + \omega^2 |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + \omega^3 |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle), \\
 |1, 1, \pi\rangle &= \frac{1}{2}(|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle), \\
 |1, 1, -\pi/2\rangle &= \frac{1}{2}(|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + \omega^3 |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + \omega^2 |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + \omega |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle), \\
 |2, 1, 0\rangle &= \frac{1}{2}(|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle),
 \end{aligned} \tag{III.22}$$

où nous avons écrit les états comme $|S_\boxtimes, S_\boxtimes^z, k_\square\rangle$ et $\omega = \exp(i\pi/2)$. Par construction, ces états vérifient $P_\square |S_\boxtimes, S_\boxtimes^z, k_\square\rangle = \exp(ik_\square) |S_\boxtimes, S_\boxtimes^z, k_\square\rangle$, et sont états propres de l'opérateur de chiralité

$$\chi^{1234} = \sum_\alpha (\vec{S}_\alpha \times \vec{S}_{\alpha+1})^z, \tag{III.23}$$

que nous avons déjà introduit dans la Section 2. Leurs énergies sont données par $E_{k_\square=0} = (3J_\perp + J_d)/2$, $E_{\pm\pi/2} = (-J_\perp - J_d)/2$, et $E_\pi = (-J_\perp + J_d)/2$, et sont tracées sur la Figure III.6 en fonction de J_d/J_\perp . Nous avons donc trois régimes. Pour $J_d < 0$, l'état fondamental est unique et est l'état $k_\square = \pi$, tandis que pour $J_d > 0$ il est deux fois dégénéré avec le doublet chiral d'impulsions $k_\square = \pm\pi/2$. Le point symétrique $J_d = 0$ correspond à un croisement de niveau où ces trois états sont dégénérés, puisque le Hamiltonien ne dépend plus que du spin total de la plaquette. Le fait que l'état d'impulsion $k_\square = \pi$ soit le fondamental pour $J_d < 0$ rappelle que dans ce régime l'état classique est l'état de Néel, non frustré. L'état d'impulsion nulle avec $S_\boxtimes = 2$ est toujours un état de haute énergie et nous le négligerons par la suite.

Contrairement au cas du tube triangulaire où le symétrie était plus basse et où il était suffisant de construire uniquement des états d'impulsion (bien que nous aurions aussi pu écrire des états diagonalisant l'opérateur de parité), nous avons ici plus de possibilités pour choisir une écriture des états propres de (III.21). En particulier, il va se révéler judicieux de les écrire comme étant aussi des états

propres de l'opérateur Q^{1324} , que nous définissons par

$$Q^{1324} = (\vec{S}_1 \times \vec{S}_3) \cdot (\vec{S}_2 \times \vec{S}_4), \quad (\text{III.24})$$

dont nous verrons par la suite qu'il joue un rôle important et n'a pas les mêmes symétries que l'opérateur de translation. Rappelons que nous avons également déjà utilisé cet opérateur (avec un ordre d'indices différent) en combinaison avec l'opérateur de chiralité, pour distinguer les différents états classiques. Une fois exprimé en fonction des opérateurs S_α^\pm et S_α^z , cet opérateur est facilement diagonalisé et ses états propres vérifiant $S_{\boxtimes}^z = 1$ et $S_{\boxtimes} = 1$ s'écrivent

$$\begin{aligned} |1, 1, +\rangle &= \frac{1}{2} (|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle), \\ |1, 1, -\rangle &= -\frac{1}{2} (|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle), \\ |1, 1, 0\rangle &= \frac{1}{2} (|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle), \end{aligned} \quad (\text{III.25})$$

et ont respectivement pour valeurs propres $+1/4, -1/4$ et 0 . Les énergies associées sont $E_\pm = (-J_\perp - J_d)/2$ and $E_0 = (-J_\perp + J_d)/2$.

A l'inverse des états d'impulsion dont l'interprétation physique est claire, la signification de ces états n'est à première vue pas évidente. Cependant, en inspectant les différents signes, nous voyons qu'ils peuvent se réécrire comme

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_{13}\rangle + |\Psi_{24}\rangle) \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_{14}\rangle + |\Psi_{23}\rangle), \\ |-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_{12}\rangle - |\Psi_{34}\rangle) \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_{13}\rangle - |\Psi_{24}\rangle), \\ |0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_{12}\rangle + |\Psi_{34}\rangle) \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_{14}\rangle - |\Psi_{23}\rangle), \end{aligned} \quad (\text{III.26})$$

où nous avons introduit l'état

$$|\Psi_{\alpha\beta}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_\alpha\downarrow_\beta\rangle - |\downarrow_\alpha\uparrow_\beta\rangle) \otimes |\uparrow_\gamma\uparrow_\delta\rangle, \quad (\text{III.27})$$

qui consiste en un produit tensoriel entre un singulet situé sur le lien $\alpha - \beta$ et des spins complètement polarisés à $1/2$ sur les sites γ et δ . Autrement dit, les états (III.25) s'interprètent comme une combinaison linéaire d'états possédant un singulet localisé sur un lien et deux spins polarisés. Cela donne des états où un singulet résonne sur quatre des six liens de la plaquette avec des amplitudes égales.

Nous pouvons également remarquer que les états d'impulsion et les états propres de l'opérateur Q^{1234} ont des aimantations $\langle S_\alpha^z \rangle = 1/4$ égales pour tous les spins puisque l'image de chacun de ces états est celle d'un singulet résonnant. D'un autre côté, les états $|\Psi_{\alpha\beta}\rangle$ sont eux caractérisés par $\langle S_\alpha^z \rangle = \langle S_\beta^z \rangle = 0$ et $\langle S_\gamma^z \rangle = \langle S_\delta^z \rangle = 1/2$, c'est-à-dire qu'ils affichent un *spin imbalance*. Les deux types d'états sont représentés sur la Figure III.7 en prenant pour exemple $|\Psi_{24}\rangle$ et $|+\rangle$. Ces observations vont se révéler utiles pour analyser les phases du modèle lorsque le couplage J_\parallel est rajouté.

Finalement, en calculant les produits scalaires $\langle k_\square | Q^{1324} \rangle$, nous voyons que les états d'impulsion et les états Q sont reliés par la transformation unitaire $v_k = \mathcal{U}v_Q$ où

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1-i) & \frac{1}{2}(1+i) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{2}(1+i) & \frac{1}{2}(1-i) & 0 \end{pmatrix}, \quad v_k = \begin{pmatrix} |\pi/2\rangle \\ |\pi\rangle \\ |-\pi/2\rangle \end{pmatrix}, \quad v_Q = \begin{pmatrix} |+\rangle \\ |-\rangle \\ |0\rangle \end{pmatrix}. \quad (\text{III.28})$$

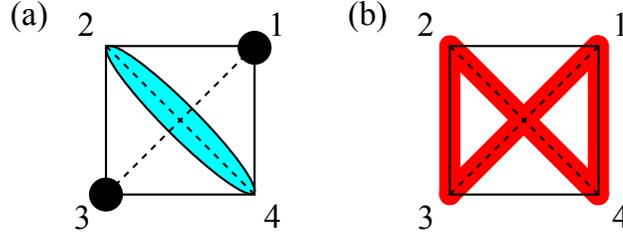


FIGURE III.7 – A gauche (a), représentation de l'état de *spin imbalance* $|\Psi_{24}\rangle$ défini en (III.27), et à droite (b) de l'état $|+\rangle$ défini en (III.25). Les cercles noirs représentent des spins polarisés à $+1/2$, l'ellipse bleue un singulet localisé sur un lien et les traits rouges épais un singulet qui résonne sur quatre différents liens.

4.1.2 Paramètres d'ordre

Nous introduisons ici les observables qui vont jouer le rôle de paramètres d'ordre quand nous examinerons les Hamiltoniens effectifs. Nous définissons les opérateurs suivant sur la plaquette j

$$\begin{aligned}\mu_j^{\alpha\beta\gamma\delta} &= S_{\alpha,j}^z - S_{\beta,j}^z + S_{\gamma,j}^z - S_{\delta,j}^z, \\ Q_j^{\alpha\beta\gamma\delta} &= (\vec{S}_{\alpha,j} \times \vec{S}_{\beta,j}) \cdot (\vec{S}_{\gamma,j} \times \vec{S}_{\delta,j}), \\ \chi_j^{\alpha\beta\gamma\delta} &= V_j^{\alpha\beta} + V_j^{\beta\gamma} + V_j^{\gamma\delta} + V_j^{\delta\alpha}, \quad \text{où } V_j^{\alpha\beta} = (\vec{S}_{\alpha,j} \times \vec{S}_{\beta,j})^z.\end{aligned}\tag{III.29}$$

Nous avons simplement généralisé les deux opérateurs χ^{1234} et Q^{1324} utilisés précédemment à des ordres d'indices différents, et rajouté l'opérateur $\mu_j^{\alpha\beta\gamma\delta}$. Ce dernier est invariant selon les opérations $\{(), (jl), (km), (jl)(km)\}$, ce qui donne le groupe C_{2v} , et détecte la présence d'un *spin imbalance* avec, selon le signe, la formation d'un singulet localisé sur un des deux liens $(\alpha\gamma)$ ou $(\beta\delta)$ (voir Figure III.7). L'opérateur $Q_j^{\alpha\beta\gamma\delta}$ est lui invariant sous $\{(), (jk)(lm), (jl)(km), (jm)(kl)\}$ (groupe D_2). Suivant l'interprétation des états propres de Q^{1324} que nous avons donné, il sert à détecter la formation d'un singulet résonant sur quatre des six liens d'une plaquette. Le dernier opérateur est la traditionnelle composante suivant z de la chiralité vectorielle, et a la symétrie C_4 dont les opérations sont $\{(), (jklm), (jl)(km), (jmlk)\}$. Les états propres de χ^{1234} sont donnés par (III.22).

Les 24 combinaisons d'indices ne sont bien sûr pas toutes utiles, puisqu'il n'y a en fait que 3 combinaisons distinctes pour chacun des trois opérateurs, les autres étant reliées par des permutations, à un signe près éventuellement. Il est donc suffisant de considérer seulement μ_j^{1234} , μ_j^{1243} et μ_j^{1324} par exemple, et physiquement cela permet bien de décrire les trois choix de couples de liens pour le placement du singulet localisé. Pour les autres opérateurs nous prendront Q_j^{1234} , Q_j^{1324} et Q_j^{1423} , et pour la chiralité χ_j^{1234} , χ_j^{1243} et χ_j^{1423} .

4.1.3 Hamiltoniens effectifs

Nous couplons maintenant les plaquettes par un terme longitudinal $J_{\parallel} \ll J_{\perp}$, J_d pour former le tube, et nous allons dériver des Hamiltoniens effectifs en traitant séparément les trois régimes selon le signe de J_d .

Régime $J_d < 0$

Quand $J_d < 0$, l'état fondamental reste unique et consiste en un produit tensoriel de l'état $|0\rangle$ sur chaque plaquette. Nous avons donc un état désordonné avec un gap vers les excitations et des fonctions

de corrélations qui décroissent exponentiellement. En fait, la physique de cette phase est celle du point $J_d = -J_\perp$. CABRA *et al.* ont proposé un diagramme de phases pour ce tube non frustré sous champ magnétique [205]. Dans la limite de couplage faible $J_\perp \ll J_\parallel$, ils ont analysé le modèle par bosonisation et ont trouvé une phase gappée sur le plateau $m = 1/4$, décrite par le modèle de sine-Gordon, qui est unique et désordonnée. Il est donc logique de faire la connexion avec la phase que nous venons de trouver en couplage fort, et qui doit donc être présente pour toute valeur de J_\parallel/J_\perp .

Régime $J_d > 0$

Lorsque l'asymétrie diagonale est suffisamment grande et que les deux niveaux d'énergie des états $|\pm\rangle$ sont bien séparés de celui de l'état $|0\rangle$ ($|E_\pm - E_0| = |J_d|$), les contributions de ce dernier sont supprimées et nous pouvons le négliger. Nous appliquons la théorie des perturbations dégénérées sur les deux états restant et nous obtenons dans la base Q le Hamiltonien effectif au premier ordre

$$H_{\text{eff},Q}^{(1)} = J_\parallel \sum_j \tau_j^x \tau_{j+1}^x, \quad (\text{III.30})$$

où les états $|\pm\rangle$ sont traités comme des états propres de l'opérateur de pseudospin-1/2 τ^z avec valeurs propres $\pm 1/2$. Nous avons donc un état fondamental deux fois dégénéré caractérisé par des valeurs moyennes non nulles $\langle (-1)^j \tau_j^x \rangle = \pm 1/2$. Bien sûr, lorsque nous approchons le point symétrique $J_d = 0$, les processus impliquant l'état $|0\rangle$ doivent être pris en compte. Ce point sera discuté plus loin, et nous verrons que les fluctuations du paramètre d'ordre sont essentiellement nulles pour tout $J_d > 0$, et que nous avons ainsi toujours presque $\langle (-1)^j \tau_j^x \rangle = \pm 1/2$.

Pour voir comment se traduisent les propriétés de cet état de Néel pour le tube, nous écrivons les observables (III.29) en fonction des opérateurs de spin-1/2, en prenant bien sûr uniquement les combinaisons $(\alpha\beta\gamma\delta)$ pour lesquelles les opérations laissant les observables invariante sont incluses dans le groupe C_{4v} du tube pour $J_d > 0$:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_j \mu_j^{1234} \mathcal{P}_j &= -2\tau_j^x, & \mathcal{P}_j \chi_j^{1234} \mathcal{P}_j &= 2\tau_j^y, \\ \mathcal{P}_j Q_j^{1234} \mathcal{P}_j &= -\frac{1}{8}(1 + 2\tau_j^z), & \mathcal{P}_j Q_j^{1324} \mathcal{P}_j &= \frac{\tau_j^z}{2}, & \mathcal{P}_j Q_j^{1423} \mathcal{P}_j &= \frac{1}{8}(1 + 2\tau_j^z), \end{aligned} \quad (\text{III.31})$$

où $\mathcal{P}_j = v_Q v_Q^\dagger$ est le projecteur sur le sous-espace engendré par les deux états $|\pm\rangle$ (voir Eq. (III.28), où nous ignorons l'état $|0\rangle$) sur la plaquette j . L'ordre antiferromagnétique selon x indique donc la présence d'une phase de *spin imbalance* alterné, caractérisée par l'opérateur $(-1)^j \mu_j^{1234}$. Cet opérateur est invariant sous les opérations de $C_{2v} = \{(), (13), (24), (13)(24)\}$, sous-groupe de C_{4v} . Puisque $C_{4v}/C_{2v} = \mathbb{Z}_2$, ce paramètre d'ordre détecte bien un état deux fois dégénéré. Plus concrètement, les deux états fondamentaux sont construits à partir des états $(|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$ et $(|+\rangle - |-\rangle)/\sqrt{2}$. En utilisant (III.26), ces derniers se réécrivent de manière plus transparente comme

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) &= |\Psi_{13}\rangle, \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) &= |\Psi_{24}\rangle. \end{aligned} \quad (\text{III.32})$$

Nous avons donc simplement retrouvé les états $|\Psi_{\alpha\beta}\rangle$, que nous avons pointés précédemment comme présentant un *spin imbalance* et qui sont représentés sur la Figure III.7. L'état fondamental du tube est donc un état-produit alterné de ces deux états-plaquettes, où un singulet est localisé sur un des deux liens diagonaux J_d . Remarquons que les opérateurs Q_j^{1234} et Q_j^{1423} ont une valeur moyenne $\pm 1/8$, mais

cela ne veut pas dire qu'ils s'ordonnent. En fait, si nous imaginons un état avec ces caractéristiques de *spin imbalance*, nous aurions aussi des valeurs moyennes non nulles pour ces deux opérateurs et une nulle pour le troisième.

Quand le couplage longitudinal augmente il faut prendre en compte de nouveaux termes dans le Hamiltonien et nous obtenons au second ordre un modèle XYZ

$$H_{\text{eff},Q}^{(2)} = \sum_j (J_x \tau_j^x \tau_{j+1}^x + J_y \tau_j^y \tau_{j+1}^y + J_z \tau_j^z \tau_{j+1}^z), \quad (\text{III.33})$$

où J_y et J_z sont d'ordre $J_{\parallel}^2/J_{\perp}$. L'expression de ces coefficients étant très compliquée nous ne la donnons pas ici, l'essentiel étant de savoir qu'ils sont tous deux négatifs. De plus, le fait que les trois coefficients sont tous différents fait que ce modèle n'a pas de symétrie $U(1)$. Il est facile de vérifier que ce Hamiltonien est bien invariant sous C_{4v} . Egalement, s'il n'y a pas de symétrie $U(1)$ à cause des termes $\tau_j^{\pm} \tau_{j+1}^{\pm}$, ces derniers conservent bien l'impulsion transverse k_{\square} (modulo 2π), ce qui se vérifie en passant dans la base des états d'impulsion où le Hamiltonien a la même forme (cela revient juste à échanger le rôle de τ^y et τ^z). Cela nous rappelle le cas du tube triangulaire, où les termes de deuxième ordre brisaient eux aussi la symétrie $U(1)$, qui n'était pas non plus nécessaire à la conservation de l'impulsion. Précisons aussi le fait que dans la dérivation du modèle (III.33) nous n'avons pas pris en compte les termes à plus longue portée comme ceux entre seconds plus proches voisins. Ces derniers ne sont en effet généralement pas importants pour comprendre qualitativement un diagramme de phases et n'influent que, par exemple, sur les positions des transitions de phase.

Le diagramme de phases du modèle XYZ est exactement connu. A part sur des lignes particulières où deux ou trois des coefficients sont égaux (lignes de type XXZ et point Heisenberg), l'état fondamental est toujours gappé et deux fois dégénéré dans une phase Ising, selon quel couplage J_{μ} a la plus grande valeur absolue, et l'ordre est ferromagnétique ou antiferromagnétique selon son signe [206]. Cependant, dans ce cas précis le terme J_x est toujours le terme dominant tant que $J_{\parallel}/J_{\perp} < 1$. Nous n'attendons donc pas de transition hors de la phase de *spin imbalance* tant que le plateau d'aimantation existe. Comme le modèle effectif n'est pas physiquement contraint à avoir une symétrie $U(1)$, une telle transition serait nécessairement d'une phase Ising à une autre phase Ising, et non pas vers une phase critique de type XXZ.

Point symétrique $J_d = 0$

Nous partons du point $J_d = 0$ où la symétrie est élargie au groupe de permutation S_4 . Il faut maintenant traiter les trois états sur chaque plaquette comme un pseudospin-1, et nous obtenons le Hamiltonien effectif au premier ordre

$$H_{\text{eff},k}^{(1)} = \frac{J_{\parallel}}{8} \sum_j \left[T_j^+ T_{j+1}^- + \frac{1}{2} (T_j^+)^2 (T_{j+1}^-)^2 + \frac{1}{2} (T_j^-)^2 (T_{j+1}^+)^2 + \text{h.c.} \right], \quad (\text{III.34})$$

où \vec{T}_i est un opérateur de spin-1. Nous nous sommes cette fois placé dans la base des états d'impulsion et les composantes $T^z = 0$ et $T^z = \pm 1$ correspondent respectivement aux états $k_{\square} = \pi$ et $k_{\square} = \pm\pi/2$. Cet Hamiltonien possède clairement une symétrie de rotation de $\pi/2$ autour de l'axe z , ce qui reflète en fait la symétrie \mathbb{Z}_4 de permutation circulaire des quatre chaînes, ou dit autrement, que l'impulsion transverse varie par multiples de $\pi/2$. Les trois termes de ce Hamiltonien conservent bien l'impulsion, modulo 2π .

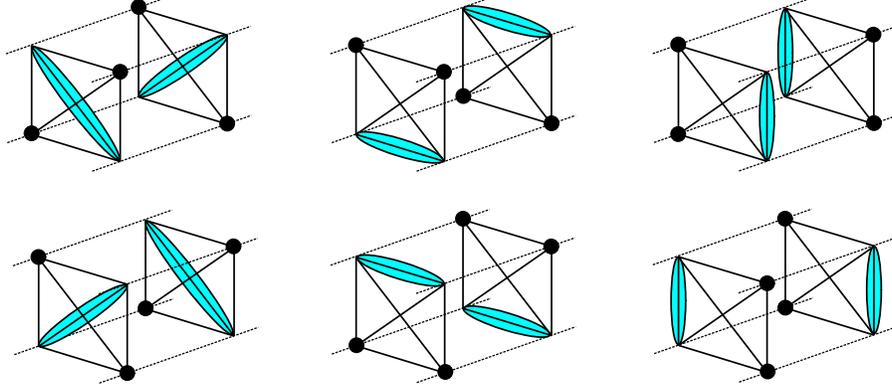


FIGURE III.8 – Représentation des six états dégénérés de *spin imbalance alterné*. Les quatre états de droite ne sont états fondamentaux qu’au point symétrique $J_d = 0$, tandis que les deux autres sont les états Ising trouvés dans le régime $J_d > 0$. Les états de la ligne du bas s’obtiennent par translation le long des chaînes des états de la ligne du haut. Les fonctions d’onde correspondantes sont des états-produits alternant des états-plaquettes écrits en (III.27).

Par la suite, il est en fait plus convenable de travailler dans la base Q , et en utilisant la transformation unitaire (III.28) nous trouvons

$$H_{\text{eff},Q}^{(1)} = \frac{J_{\parallel}}{4} \sum_j (\lambda_j^1 \lambda_{j+1}^1 + \lambda_j^4 \lambda_{j+1}^4 + \lambda_j^6 \lambda_{j+1}^6), \quad (\text{III.35})$$

où les λ^α , $\alpha = 1, \dots, 8$ sont les matrices de Gell-Mann. Cette fois, c’est la symétrie \mathbb{Z}_3 correspondant à la permutation des trois vecteurs de la base qui est évidente. De son côté la symétrie \mathbb{Z}_4 est cachée.

Il se trouve que ce calcul au premier ordre n’est pas suffisant pour comprendre l’effet de la perturbation J_{\parallel} . En effet, le Hamiltonien (III.35) possède une symétrie $\text{SU}(2)$ cachée et son état fondamental est donc toujours macroscopiquement dégénéré. Nous reviendrons plus loin sur cette symétrie cachée. Afin de lever cette dégénérescence, il faut aller à l’ordre suivant en J_{\parallel} . Le modèle effectif est alors donné par

$$H_{\text{eff},Q}^{(2)} = \sum_j \left[q_1 (\lambda_i^1 \lambda_{i+1}^1 + \lambda_i^4 \lambda_{i+1}^4 + \lambda_i^6 \lambda_{i+1}^6) + q_2 (\lambda_i^2 \lambda_{i+1}^2 + \lambda_i^5 \lambda_{i+1}^5 + \lambda_i^7 \lambda_{i+1}^7) + q_3 (\lambda_i^3 \lambda_{i+1}^3 + \lambda_i^8 \lambda_{i+1}^8) \right], \quad (\text{III.36})$$

où par simplicité nous avons une nouvelle fois inclus uniquement les termes entre plus proches voisins. Le Hamiltonien complet, incluant les termes à plus longue portée, a été dérivé par Y. FUJI et est donné dans l’annexe B. Il sert principalement à localiser précisément la transition de phase numériquement. Les couplages de ce Hamiltonien sont

$$q_1 = \frac{J_{\parallel}}{4} + \frac{7J_{\parallel}^2}{128J_{\perp}}, \quad q_2 = -\frac{31J_{\parallel}^2}{128J_{\perp}}, \quad q_3 = -\frac{33J_{\parallel}^2}{128J_{\perp}}. \quad (\text{III.37})$$

Par continuation du régime $J_d > 0$, nous anticipons la présence d’une phase de *spin imbalance alterné* pour ce modèle. En inspectant les coefficients q_μ pour de faibles valeurs de J_{\parallel}/J_{\perp} , nous voyons que le terme positif q_1 domine toujours. Vu la forme relativement simple du Hamiltonien, que nous pouvons voir comme un somme de termes de type Ising, nous espérons que cela correspond donc à un ordre antiferromagnétique pour les opérateurs $\lambda_j^{1,4,6}$. Nous pouvons alors faire le lien entre les

observables (III.29) et les matrices de Gell-Mann, et nous obtenons les relations suivantes dans le sous-espace tronqué des trois états

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P}_i \mu_i^{1234} \mathcal{P}_i &= \lambda_i^1, & \mathcal{P}_i \chi_i^{1234} \mathcal{P}_i &= \lambda_i^2, \\
 \mathcal{P}_i \mu_i^{3124} \mathcal{P}_i &= \lambda_i^4, & \mathcal{P}_i \chi_i^{3124} \mathcal{P}_i &= -\lambda_i^5, \\
 \mathcal{P}_i \mu_i^{2314} \mathcal{P}_i &= \lambda_i^6, & \mathcal{P}_i \chi_i^{2314} \mathcal{P}_i &= \lambda_i^7, \\
 \mathcal{P}_i Q_i^{1324} \mathcal{P}_i &= \frac{1}{4} \lambda_i^3, & \mathcal{P}_i P_i^{1234} \mathcal{P}_i &= \sqrt{3} \lambda_i^8.
 \end{aligned} \tag{III.38}$$

Donc, comme pour $J_d > 0$, où une valeur moyenne non nulle de $(-1)^j \tau_j^x$ implique un état produit alternant entre les deux états-plaquettes $|\Psi_{13}\rangle$ et $|\Psi_{24}\rangle$ dans le fondamental, ici une valeur finie de $(-1)^j \lambda_j^4$ ($(-1)^j \lambda_j^6$) donne la même image mais avec les états-plaquettes $|\Psi_{14}\rangle$ et $|\Psi_{23}\rangle$ ($|\Psi_{12}\rangle$ et $|\Psi_{34}\rangle$). L'ordre pour $(-1)^j \lambda_j^1$ correspond à celui de $(-1)^j \tau_j^x$ à $J_d > 0$. Nous obtenons donc six états de *spin imbalance* alterné, que nous illustrons sur la Figure III.8, avec à chaque fois un singulet alternant d'un lien à un autre entre deux plaquettes. Cet état est simplement la continuation de ce que nous avons trouvé pour $J_d > 0$, sauf que tous les liens sont équivalents et cela rajoute quatre états supplémentaires. Bien que les états $|\Psi_{jk}\rangle$ ne soient pas orthogonaux entre eux à cause du recouvrement partiel des singulets ($|\Psi_{13}\rangle$ est seulement orthogonal à $|\Psi_{24}\rangle$ par exemple), le recouvrement des six états fondamentaux construits à partir d'eux varie comme $1/2^L$, où L est la longueur du tube, comme ce qu'il se passe dans les états de liens de valence par exemple [207, 208]. Les six états sont donc bien asymptotiquement orthogonaux dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$.

Cela ne constitue qu'une première approche du modèle (III.37), et nous avons besoin de résultats numériques pour la confirmer. Pour cela, nous calculons par diagonalisation exacte le spectre de basse énergie pour le modèle originel du tube (III.7) pour $L = 10$ d'une part, et pour le modèle effectif $L = 18$ d'autre part, en incluant cette fois les termes à longue portée, nécessaires pour une comparaison quantitative. Les deux spectres sont présentés sur la Figure III.9 en fonction de l'impulsion longitudinale k_{\parallel} puisque nous utilisons des conditions périodiques dans cette direction. Les deux résultats sont en très bon accord, à la fois sur la présence d'un état fondamental six fois dégénéré comme suggéré ainsi sur l'ordre de grandeur du grand gap vers les premiers états excités. Le comptage de la dégénérescence n'étant a priori pas évident, nous expliquons maintenant comment les résultats ont été obtenus.

Pour la diagonalisation effective du modèle au second ordre complet (B.1), réalisée par Y. FUJI, la symétrie \mathbb{Z}_3 de permutation de trois des quatre chaînes a été utilisée, ainsi que la translation le long de la chaîne. Les états propres et niveaux d'énergie sont donc caractérisés par l'impulsion $k_{\Delta} = 0, \pm 2\pi/3$ venant de la symétrie \mathbb{Z}_3 ainsi que par l'impulsion le long des chaînes k_{\parallel} . Comme nous le voyons sur la Figure III.9 de droite, nous obtenons trois états à $k_{\parallel} = 0$ et trois autres à $k_{\parallel} = \pi$. Cela nous fait bien six états au total, qui ont tous des nombres quantiques différents compatibles avec les six états dessinés sur la Figure III.8. D'un autre côté, la diagonalisation du modèle originel (III.7) a été faite par S. CAPPONI en implémentant la symétrie de permutation cyclique des chaînes \mathbb{Z}_4 ainsi que la translation longitudinale. Les niveaux d'énergie sont donc classés par les deux impulsions k_{\square} et k_{\parallel} . Pour implémenter complètement la symétrie C_{4v} , les énergies sont aussi labellisées selon leur comportement sous la réflexion dans la direction des plaquettes ainsi que le long de l'axe longitudinal. Cela nous donne les nombres quantiques de parité $\vec{R} = (r_x, r_y) = (\pm 1, \pm 1)$. En notant chaque secteur de symétrie $\vec{K} = (k_{\parallel}, k_{\square})$ (et en n'oubliant pas que les secteurs $k_{\parallel} = \pm \pi/2$ sont exactement dégénérés), d'après la Figure III.9 de gauche nous trouvons six états de basse énergie avec les nombres quantiques

- $\vec{K} = (0, 0)$ et $\vec{R} = (+, +)$: 2 états
- $\vec{K} = (0, \pi)$ et $\vec{R} = (-, +)$: 1 état

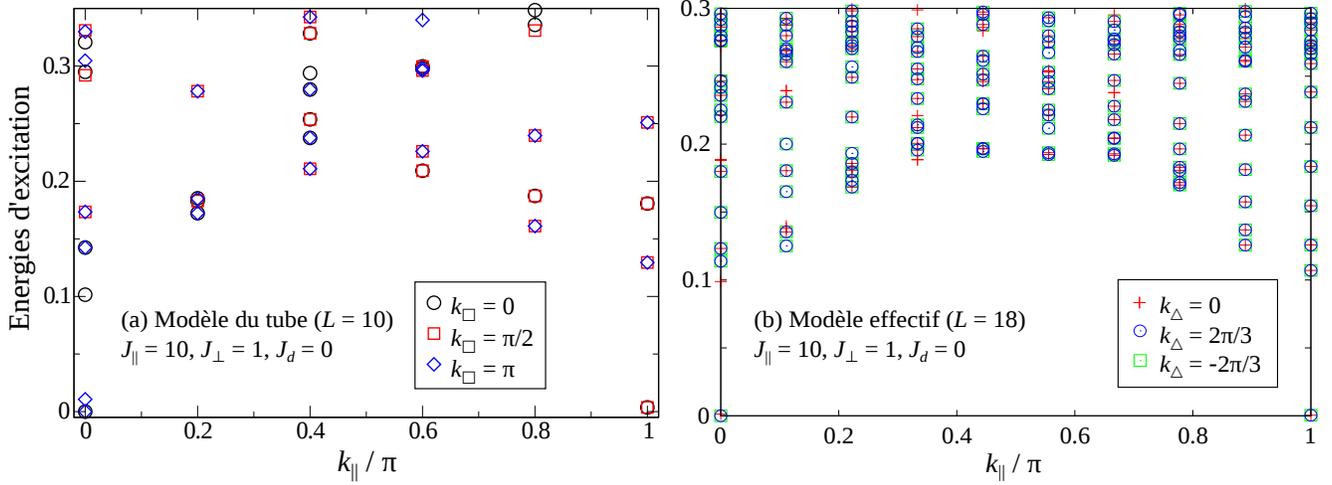


FIGURE III.9 – Spectres d'énergies en fonction de l'impulsion longitudinale k_{\parallel} pour $J_{\parallel} = 1$, $J_{\perp} = 10$ et $J_d = 0$. A gauche, résultats de diagonalisation exacte pour le modèle du tube (III.7) de taille $L = 10$, obtenus dans les différents secteurs labellisés par l'impulsion transverse k_{\square} . A droite, énergies pour le modèle effectif au second ordre (B.1) avec $L = 18$ et dont les niveaux sont indexés par l'impulsion k_{Δ} . Les deux spectres sont en très bon accord et montrent un état fondamental six fois dégénéré.

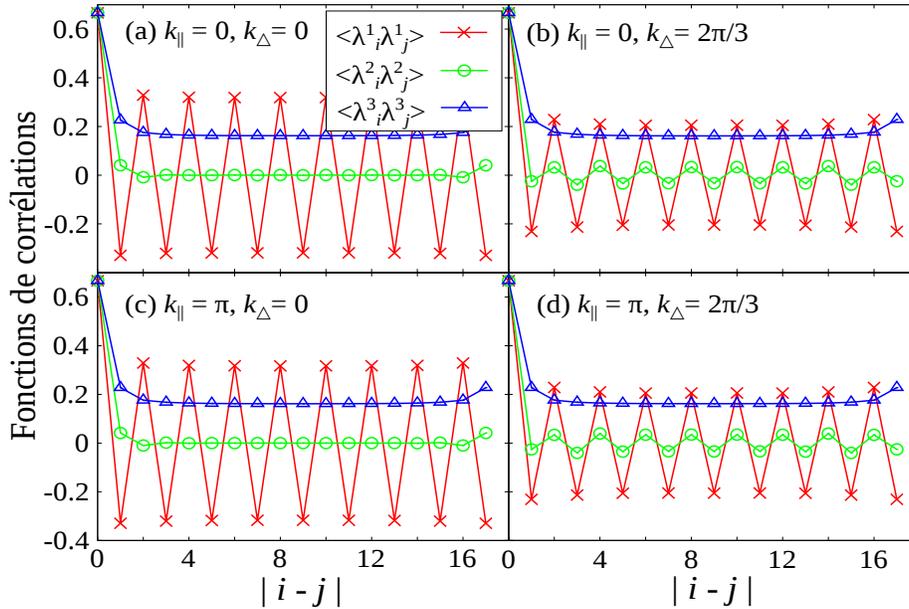


FIGURE III.10 – Fonctions de corrélation calculées dans l'état fondamental du modèle effectif au second ordre (B.1) pour $L = 18$ et $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0.1$. Les résultats ont été obtenus dans chaque secteur de symétrie (a) $k_{\parallel} = 0$, $k_{\Delta} = 0$, (b) $k_{\parallel} = 0$, $k_{\Delta} = 2\pi/3$, (c) $k_{\parallel} = \pi$, $k_{\Delta} = 0$, and (d) $k_{\parallel} = \pi$, $k_{\Delta} = 2\pi/3$, sachant que les secteurs $k_{\Delta} = \pm 2\pi/3$ sont exactement dégénérés. Les croix, cercles et triangles représentent respectivement les corrélations $\langle \lambda_i^1 \lambda_j^1 \rangle$, $\langle \lambda_i^2 \lambda_j^2 \rangle$ et $\langle \lambda_i^3 \lambda_j^3 \rangle$ (voir Eq. (III.38) pour le lien avec les observables du tube).

- $\vec{K} = (\pi, \pi)$ et $\vec{R} = (+, +)$: 1 état
- $\vec{K} = (\pi, \pi/2)$ et $\vec{R} = (N.A., +)$: 1 état
- $\vec{K} = (\pi, -\pi/2)$ et $\vec{R} = (N.A., +)$: 1 état

où *N.A.* indique que ce nombre quantique n'est pas disponible (symétries qui ne commutent pas). Si nous appliquons les opérations de symétrie de C_{4v} aux six états $|\Psi_{\alpha\beta}\rangle$ nous voyons qu'ils correspondent bien aux nombres quantiques de ces six états.

Finalement, le *spin imbalance* est confirmé par le calcul des fonctions de corrélation $\langle \lambda_i^1 \lambda_j^1 \rangle$, $\langle \lambda_i^2 \lambda_j^2 \rangle$, et $\langle \lambda_i^3 \lambda_j^3 \rangle$ (voir les relations (III.38)) calculées séparément dans chaque secteur de symétrie pour le Hamiltonien effectif (B.1). Les résultats sont tracés sur la Figure III.10. Les corrélations $\lambda_i^1 \lambda_j^1$ du *spin imbalance* sont bien oscillantes comme attendues, tandis que la chiralité est complètement nulle. Pour les corrélations $\lambda_i^3 \lambda_j^3$ de l'opérateur Q^{1324} , la valeur uniforme non nulle n'indique pas d'ordre comme discuté auparavant. Il y a juste une valeur moyenne constante, qu'il faudrait en fait retrancher aux corrélations calculées, ce qui donnerait alors zéro. Notons aussi que suivant les valeurs numériques de $\lambda_i^1 \lambda_j^1$ le *spin imbalance* n'est manifestement pas quantifié à la valeur ± 1 attendue, en contradiction avec ce que nous avons mis en avant tout au long du chapitre. En fait, cela est probablement dû au fait que le système est trop petit, puisque la fonction d'onde obtenue par diagonalisation exacte est une superposition des différents états de *spin imbalance* et que ceux-ci ne sont orthogonaux que pour des systèmes suffisamment grands. En effet, nous verrons que les résultats DMRG sur des systèmes beaucoup plus grands montreront bien cette quantification.

4.1.4 Symétrie SU(2) cachée et sélection des états de *spin imbalance*

La dérivation des modèles effectifs a mis en évidence, pour $J_d \leq 0$, de phases de *spin imbalance* quantifié dans la limite de couplage fort. Revenons dans un premier temps au modèle effectif au point symétrique (III.35). Au-delà de la symétrie S_4 , ce Hamiltonien possède une symétrie SU(2) pour des conditions aux bords ouvertes. En appliquant une transformation unitaire *non locale* V introduite par KENNEDY [209] et que nous présentons dans l'Annexe C, ce modèle est exactement équivalent à un modèle de Heisenberg ferromagnétique de spin 1

$$V H_{\text{eff}}^{(1)} V^{-1} = -\frac{J_{\parallel}}{4} \sum_j \vec{T}_j \cdot \vec{T}_{j+1}, \quad (\text{III.39})$$

où \vec{T}_j est un opérateur de spin 1. Par conséquence, la dégénérescence de l'état fondamental du modèle effectif que nous avons dérivé est de $2L + 1$ où L est la taille du tube. Dans le cas de conditions aux bords périodiques, cette transformation n'est plus valable, mais la dégénérescence, réduite, reste proportionnelle à L . Remarquons qu'une telle symétrie SU(2) cachée a été observée pour le modèle XY $S = 1$, là encore avec des conditions ouvertes mais dans la représentation de spin-1/2, contre celle de spin-1 ici [210].

Bien que la dégénérescence soit élevée, nous sommes en principe capable d'écrire tous les états fondamentaux du modèle, en partant de l'état complètement polarisé $|F\rangle = |11\dots 1\rangle$ et en appliquant l'opérateur T_{tot}^- plusieurs fois. Bien sûr, pour obtenir les états dans le langage du tube il faut appliquer la transformation unitaire non locale sur ces états ferromagnétiques. Si nous notons les $2L + 1$ états comme $|F_p\rangle \propto (T_{\text{tot}}^-)^p |F\rangle$ avec $p = 1, \dots, 2L$, l'idée est que la transformation non locale V appliquée à ces états va nous donner des états similaires à ceux de la phase de Haldane. C'est-à-dire que nous obtenons des états avec un ordre de Néel caché, le nombre de 0 entre deux spins ayant +1 et -1 est arbitraire (ce n'est pas complètement vrai ici, puisqu'en faisant le calcul nous nous apercevons qu'il

y aura également des parois de domaines dans l'état de Néel caché). Le point important est que, en faisant cette transformation, la plupart des états ainsi obtenus seront désordonnés, tandis que nous attendons des états avec des corrélations $\lambda_j^\alpha \lambda_{j+1}^\alpha$ non nulles vu les résultats pour le Hamiltonien effectif au second ordre. En fait, les six états de *spin imbalance* sont présents parmi ces états dégénérés, et l'effet des termes d'ordre deux est de les sélectionner.

Si nous prenons l'état ferromagnétique complètement polarisé, *i.e.* l'état $|111\dots\rangle$, et que nous appliquons la transformation non locale V , l'état résultat est ordonné : c'est un produit de $(|+\rangle + |0\rangle)/\sqrt{2}$ sur les plaquettes impaires et $(|+\rangle - |0\rangle)/\sqrt{2}$ sur les plaquettes paires. En utilisant les relations (III.26), nous arrivons à l'état de *spin imbalance* produit de $|\Psi_{14}\rangle$ sur les plaquettes paires et $|\Psi_{23}\rangle$. En partant de l'état polarisé $|\bar{1}\bar{1}\bar{1}\dots\rangle$, nous aurions obtenu le même état mais translaté d'une plaquette. En partant d'un état ferromagnétique qui n'est plus polarisé, la transformation V nous conduit à un état désordonné. Les quatre autres états de *spin imbalance* peuvent être mis en évidence de la même manière, en partant cette fois des états ferromagnétiques polarisés dans les bases T^x et T^y . Une autre façon de le voir sans écrire explicitement les états est de regarder comment se traduisent les corrélations de *spin imbalance* $\lambda_j^\alpha \lambda_{j+1}^\alpha$ dans le langage du modèle ferromagnétique. Suivant KENNEDY, les corrélations locales alternées deviennent, après transformation, non locales

$$\begin{aligned} V[(-1)^r \lambda_1^1 \lambda_r^1] V^{-1} &= (-1)^r \mathcal{O}_{\text{string}}^x(r), \\ V[(-1)^r \lambda_1^4 \lambda_r^4] V^{-1} &= (-1)^r \mathcal{O}_{\text{string}}^z(r), \\ V[(-1)^r \lambda_1^6 \lambda_r^6] V^{-1} &= (-1)^r \mathcal{O}_{\text{string}}^y(r), \end{aligned} \quad (\text{III.40})$$

où \mathcal{O}^μ est appelé le *string order parameter* \mathcal{O}^μ et est défini par [209]

$$\mathcal{O}_{\text{string}}^\mu(r) = -T_1^\mu \exp\left(i\pi \sum_{l=2}^{r-1} T_l^\mu\right) T_r^\mu, \quad (\text{III.41})$$

où $\mu = x, y, z$. C'est cet opérateur qui permet de détecter l'ordre non local caché dans la phase de Haldane de la chaîne de Heisenberg antiferromagnétique de spin-1 [208]. Dans notre cas, nous savons que les corrélations sont saturées pour le *spin imbalance*, *i.e.* $\lambda_j^\alpha \lambda_{j+1}^\alpha = \pm 1$ pour $\alpha = 1, 4, 6$, cela veut dire que les états correspondants doivent saturer le *string order parameter*. Or, \mathcal{O}^μ sera saturé à ± 1 pour les deux états ferromagnétiques complètement polarisés dans la direction μ , comme attendu d'après l'écriture des états. Les états non polarisés ne vont pas saturer le *string order parameter*. Evidemment, ces états ferromagnétiques polarisés ne sont plus états propres du modèle effectif quand les termes de deuxième ordre sont ajoutés. Mais puisqu'il s'agit d'un modèle SU(2) ferromagnétique perturbé faiblement, les vrais états propres vont rester très proches des six états parfaitement factorisables de *spin imbalance* quantifié.

D'autre part, nous avons dit lors de la dérivation du modèle (III.30) qu'il n'est *a priori* valable que pour une asymétrie assez grande, et que dans le cas contraire l'état $|0\rangle$ ne peut pas être négligé et va introduire des fluctuations. Pour voir que ce n'est en fait pas le cas, il faut repartir du Hamiltonien au point symétrique (III.35). L'effet d'un terme $J_d > 0$ est d'introduire un « champ magnétique » selon

$$H_{\text{eff},Q}^{(1)} = \frac{J_{\parallel}}{4} \sum_j \left(\lambda_j^1 \lambda_{j+1}^1 + \lambda_j^4 \lambda_{j+1}^4 + \lambda_j^6 \lambda_{j+1}^6 - \frac{J_d}{\sqrt{3}} \lambda_j^8 \right). \quad (\text{III.42})$$

Vu la forme de la matrice λ_j^8 , le rôle de ce terme linéaire est de supprimer les processus incluant l'état $|0\rangle$ pour un grand J_d , et au final nous retrouvons bien un modèle d'Ising écrit cette fois avec les matrices de Gell-Mann

$$H_{\text{eff}}^{(1),Q} = \frac{J_{\parallel}}{4} \sum_j \lambda_j^1 \lambda_{j+1}^1. \quad (\text{III.43})$$

Mais d'un autre côté, nous savons que ce modèle est en fait ferromagnétique avec une symétrie $SU(2)$. Un tel modèle est très sensible à n'importe quelle petite perturbation, et donc même pour un petit J_d le modèle Ising (III.43) (ou de manière équivalente (III.30)) sera tout de suite valide. La quantification presque parfaite $\langle (-1)^j \mu_j^{1234} \rangle = \pm 1$ va donc être valable dans tout le régime $J_d > 0$.

4.2 Cas d'un spin S : dernier plateau d'aimantation

4.2.1 Etude d'une plaquette pour un spin S

Nous nous tournons maintenant vers des spins S plus élevés. Comme souvent dans les problèmes où S devient grand, l'approche de couplage fort devient difficile à mettre en œuvre pour un plateau d'aimantation générique, à cause du nombre croissant d'états de basses énergies sur une plaquette élémentaire. Cependant, nos résultats précédents sur le cas $S = 1/2$ peuvent être directement appliqués à un spin S quelconque sur le dernier plateau d'aimantation par spin $m = S - 1/4$. Lorsque nous diagonalisons le Hamiltonien (III.21) pour un spin S , nous retrouvons quatre états propres de la forme (III.22) en faisant les remplacements $\uparrow \rightarrow S$ et $\downarrow \rightarrow S - 1$:

$$\begin{aligned}
 |\bar{S}, \bar{S}, \pi/2\rangle &= \frac{1}{2}(|\bar{S}SSS\rangle + \omega |S\bar{S}SS\rangle + \omega^2 |S\bar{S}\bar{S}\rangle + \omega^3 |SS\bar{S}\bar{S}\rangle), \\
 |1, 1, \pi\rangle &= \frac{1}{2}(|\bar{S}SSS\rangle - |S\bar{S}SS\rangle + |SS\bar{S}\bar{S}\rangle - |S\bar{S}\bar{S}\rangle), \\
 |1, 1, -\pi/2\rangle &= \frac{1}{2}(|\bar{S}SSS\rangle + \omega^3 |S\bar{S}SS\rangle + \omega^2 |SS\bar{S}\bar{S}\rangle + \omega |SS\bar{S}\bar{S}\rangle), \\
 |2, 1, 0\rangle &= \frac{1}{2}(|\bar{S}SSS\rangle + |S\bar{S}SS\rangle + |SS\bar{S}\bar{S}\rangle + |SS\bar{S}\bar{S}\rangle),
 \end{aligned} \tag{III.44}$$

où nous avons noté $S - 1$ comme \bar{S} . Les énergies de ces états s'écrivent

$$\begin{aligned}
 E_{k_{\square}=0} &= 6S^2 J_{\perp} + 2S^2 J_d, \\
 E_{k_{\square}=\pm\pi/2} &= 2S(3S - 2)J_{\perp} + 2S(S - 1)J_d, \\
 E_{k_{\square}=\pi} &= 2S(3S - 2)J_{\perp} + 2S^2 J_d.
 \end{aligned} \tag{III.45}$$

De la même façon, des états propres de l'opérateur Q^{1324} sont écrits après ces mêmes remplacements sur les états (III.25), avec les valeurs propres $\pm 2S^3$ et 0. Nous allons maintenant voir que pour tout spin $S > 1/2$ les modèles effectifs montrent l'apparition d'une nouvelle phase lorsque J_{\parallel}/J_{\perp} est modérément petit et que $J_d \geq 0$. Pour $J_d < 0$ la situation est la même que pour $S = 1/2$, à savoir un état fondamental désordonné unique.

4.2.2 Régime $J_d > 0$

Pour $J_d > 0$, le Hamiltonien effectif au second ordre dans la base Q est un modèle XYZ donné en (III.33) et dont les coefficients J_{μ} sont des fonctions compliquées de J_{\perp} , J_d et S . A titre d'exemple, nous les traçons sur la Figure III.11 en fonction de J_{\parallel}/J_{\perp} pour le cas $S = 1$ et $J_d/J_{\perp} = 0, 5$. A partir de là, plusieurs commentaires sont à faire.

Premièrement, contrairement au cas $S = 1/2$ où J_x est toujours le couplage dominant dans le régime perturbatif, ici nous pouvons trouver des couplages $|J_z| \sim |J_y| > |J_x|$ pour des valeurs $J_{\parallel}/J_{\perp} \lesssim 1$ raisonnables. Cela est illustré sur la fenêtre secondaire de la Figure III.11, qui montre la valeur du couplage critique $J_{\parallel,c}/J_{\perp}$ tel que $|J_z| = J_x$, en fonction de J_d/J_{\perp} . Les deux termes J_z et J_y sont

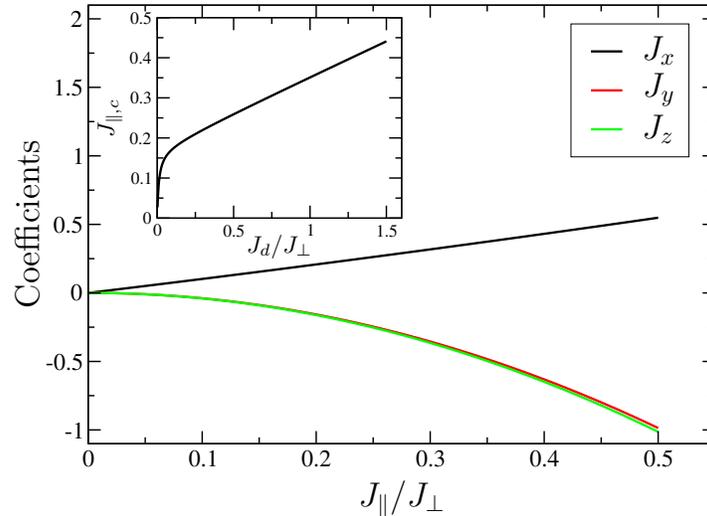


FIGURE III.11 – Valeurs des paramètres J_x , J_y et J_z du Hamiltonien effectif XYZ (III.33) calculés au second ordre $J_{\parallel}^2/J_{\perp}$ pour le plateau $m = 3/4$ du tube $S = 1$. Loin dans le régime de couplage fort $J_{\parallel}/J_{\perp} \ll 1$, le terme J_x positif domine et donne la phase de *spin imbalance* alterné. Pour des valeurs modérément petites $J_{\parallel}/J_{\perp} \lesssim 1$, une transition de phase vers un état ferromagnétique où J_z domine a lieu et l’opérateur Q^{1324} s’ordonne. Dans la fenêtre secondaire nous montrons la dépendance en J_d/J_{\perp} du couplage longitudinal critique.

négatifs et favorisent un ordre ferromagnétique. Nous espérons donc voir une transition d’une phase Ising antiferromagnétique dans la direction x à une autre phase Ising, mais ferromagnétique et dans la direction y ou z , selon lequel des deux couplages J_y ou J_z a la plus grande valeur absolue. Suivant la Figure III.11, J_z domine mais, les deux couplages étant extrêmement proches, il est difficile à ce stade d’exclure la possibilité d’avoir une seconde transition où J_y est plus négatif, donnant ainsi une phase ordonnée pour la chiralité. Des termes de troisième ordre pourraient faire que les deux courbes se croisent à plus grand J_{\parallel}/J_{\perp} . Nous n’avons cependant aucune indication numérique que cela pourrait être le cas (voir la Section 5), J_z semble toujours gagner. Cette nouvelle phase est donc caractérisée par un ordre uniforme de l’opérateur S^{1324} , avec un état fondamental deux fois dégénéré où toutes les plaquettes sont dans le même état d’un singulet résonant soit $|+\rangle$, soit $|-\rangle$ (voir Eq. III.25).

Concernant la transition de phase, puisque notre modèle effectif a une forme XYZ, elle se fait à travers un point $U(1)$ où $J_x = -J_z$, et sera donc caractérisée par une charge centrale $c = 1$. Dans l’image traditionnelle des transitions de phases, entre deux phases ordonnées avec des paramètres d’ordre ayant différentes symétries, nous attendons plutôt une transition du premier ordre, ou alors une phase intermédiaire où les deux paramètres d’ordre sont non nuls. Cependant, ici nous verrons que les résultats numériques pointent bien vers une transition continue $c = 1$, malgré les symétries différentes des deux phases.

4.2.3 Point symétrique $J_d = 0$

Nous nous plaçons maintenant au point symétrique $J_d = 0$. Au premier ordre, il n’y a aucune différence comparé au cas $S = 1/2$ et il est donc nécessaire d’aller à l’ordre suivant pour lever la dégénérescence due à la symétrie $SU(2)$ cachée. Le Hamiltonien effectif au second ordre a la même forme que celui vu précédemment en (III.36) (toujours en ne prenant que les interactions entre plus

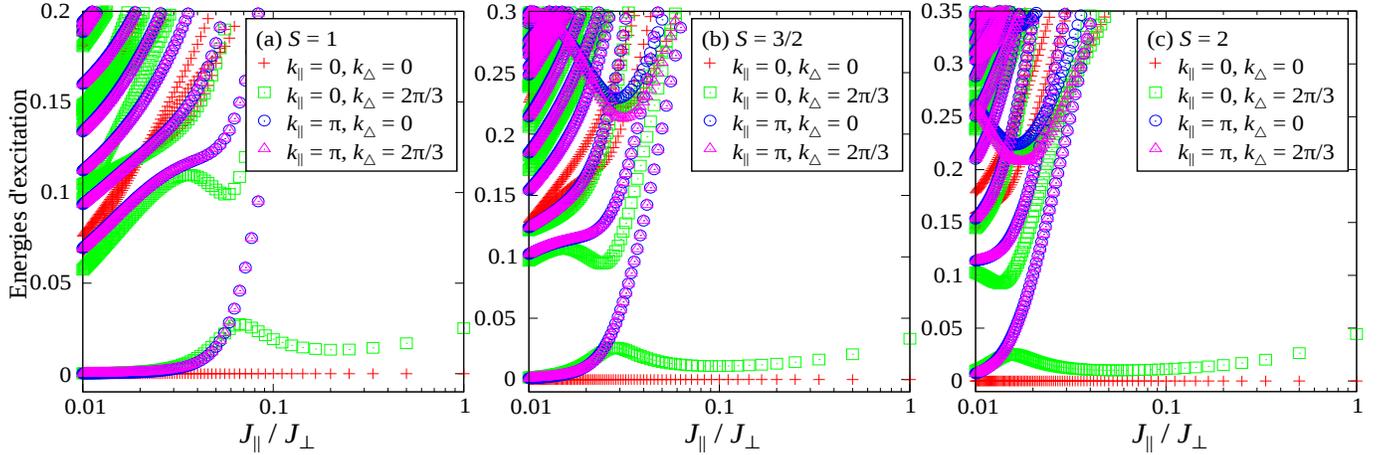


FIGURE III.12 – Spectre de basse énergie du Hamiltonien effectif au second ordre (B.1) en fonction de J_{\parallel}/J_{\perp} pour (a) $S = 1$, (b) $S = 3/2$, et (c) $S = 2$ sur un système de taille $L = 16$. L'échelle de l'axe horizontal est logarithmique pour une meilleure lisibilité. Chaque symbole correspond à un secteur de symétrie différent, labellisé selon l'impulsion longitudinale k_{\parallel} et transverse k_{Δ} . Les niveaux d'impulsions $k_{\Delta} = \pm 2\pi/3$ sont exactement dégénérés. Lorsque $J_{\parallel}/J_{\perp} \ll 1$ nous retrouvons la phase de *spin imbalance* alterné six fois dégénérée, puis une transition a lieu vers une phase à $k_{\parallel} = 0$ trois fois dégénérée.

proches voisins), avec l'introduction d'une dépendance en S pour les coefficients. Ils s'écrivent

$$\begin{aligned}
 q_1 &= \frac{J_{\parallel}}{4} - \frac{J_{\parallel}^2}{J_{\perp}} \left(\frac{32S^2 - 16S - 3}{32} + \frac{5}{256S} \right), & q_2 &= -\frac{J_{\parallel}^2}{J_{\perp}} \left(\frac{32S^2 - 1}{32} + \frac{3}{256S} \right), \\
 q_3 &= -\frac{J_{\parallel}^2}{J_{\perp}} \left(\frac{32S^2 + 1}{32} - \frac{3}{256S} \right).
 \end{aligned} \tag{III.46}$$

L'inclusion de ces termes d'ordre supérieur favorise encore l'apparition de la phase de *spin imbalance* alterné, associée à une valeur finie des paramètres d'ordre $(-1)^j \lambda_j^{1,4,6} \sim (-1)^j \mu_j^{\alpha\beta\gamma\delta}$. Rappelons que cela provient du fait que le terme q_1 est toujours le terme dominant dans le Hamiltonien (III.36), et qu'il est positif.

Cependant, pour un spin S cela n'est vrai que suffisamment loin dans le régime de couplage fort, *i.e.* pour $J_{\parallel}/J_{\perp} \ll 1$. En augmentant le terme longitudinal, nous trouvons maintenant un régime $J_{\parallel}/J_{\perp} \lesssim 1$ où q_3 , qui est négatif, devient le couplage de plus grande valeur absolue. Ce n'était pas le cas pour $S = 1/2$. Cela implique une phase ordonnée associée à λ_j^3 , ou encore à l'opérateur Q^{1324} suivant les relations (III.38). Il s'agit encore une fois de l'extension de la phase que nous venons de trouver pour $J_d/J_{\perp} > 0$. Comme précédemment, il est possible d'obtenir le spectre d'énergie par diagonalisation exacte. Les plus bas niveaux dans les différents secteurs de symétries $k_{\parallel} = 0, \pi$ et k_{Δ} sont donnés sur la Figure III.12 pour $S = 1, 3/2, 2$. Comme attendu, nous retrouvons la phase de *spin imbalance* à petit J_{\parallel}/J_{\perp} . Lorsque le couplage augmente, nous pouvons voir que les trois états à $k_{\parallel} = \pi$ deviennent des états excités (ne pas oublier que les secteurs $k_{\Delta} = \pm 2\pi/3$ sont exactement dégénérés), et nous trouvons bien un état $k_{\parallel} = 0$ trois fois dégénéré que nous associons à la phase Q . Les fonctions d'onde factorisables idéales sont donc formées à partir des états (III.25) pour un spin- S selon $|\Psi_{\nu}\rangle = \otimes_i |\nu\rangle_i$, $\nu = +, -, 0$, et pour un spin S quelconque les valeurs moyennes correspondantes des opérateurs $Q^{\alpha\beta\gamma\delta}$ sont écrites dans la Table III.1.

	Q_j^{1234}	Q_j^{1324}	Q_j^{1423}
$ \Psi_+\rangle$	0	$2S^3$	$2S^3$
$ \Psi_-\rangle$	$-2S^3$	$-2S^3$	0
$ \Psi_0\rangle$	$2S^3$	0	$-2S^3$

TABLE III.1 – Valeurs moyennes des opérateurs $Q^{\alpha\beta\gamma\delta}$ pour les états (III.25) généralisés à un spin S quelconque.

Concernant la nature de la transition, ce point est cette fois plus délicat que pour $J_d > 0$. Les deux phases ordonnées ont encore une fois des paramètres d'ordre différents, et dans l'image des transitions de phase de LANDAU cela serait du premier ordre. Nous avons cependant vu que ce n'était pas le cas hors du point symétrique, et donc la transition pourrait *a priori* être continue. L'étude du modèle effectif (III.36) ne nous ayant pas apporté d'information, nous ne sommes pas en mesure de proposer un scénario. Nous verrons dans la section suivante que les résultats DMRG, s'ils plaident pour une transition continue, ne permettent pas de définitivement trancher.

5 Résultats numériques

Nous allons maintenant confirmer les prédictions précédentes par des calculs DMRG de S. CAPPONI sur le modèle (III.7). Dans une première partie, nous étudierons en détail le cas $S = 1/2$, puis nous irons vers des spins plus élevés. La plupart des simulations seront alors faites pour $S = 1$ mais nous donnerons quelques résultats pour $S = 3/2$.

5.1 Cas $S = 1/2$

Nous commençons l'étude du spin-1/2 en traçant sur la Figure III.13 des courbes d'aimantation pour un couplage $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0, 2$ et plusieurs valeurs de J_d/J_{\perp} pour $L = 64$. Il est très clair que deux plateaux d'aimantation finis sont présents, un correspondant au gap de spin à $m = 0$ et le plateau $m = 1/4$ que nous étudions. Nous avons vérifié qu'il reste bien fini dans la limite thermodynamique. Il est facile de montrer que le champ de saturation h_{sat} est indépendant de J_d pour $J_d \leq 0$, $h_{sat} = 4S(J_{\perp} + J_{\parallel})$, et est donné par $h_{sat} = 4S(J_{\perp} + 2J_d + J_{\parallel})$ pour $J_d > 0$. Nous allons maintenant traiter séparément les trois régimes de J_d .

5.1.1 Régime $J_d < 0$

Nous avons vérifié que pour $J_d < 0$ nous avons un état fondamental désordonné unique, en calculant à la fois les quantités locales et les corrélations des opérateurs définis en (III.29). Les résultats, que nous ne montrons pas car présentant très peu d'intérêt, confirment clairement cette prédiction de couplage fort. Toutes les corrélations décroissent exponentiellement avec une longueur de corrélation de l'ordre de quelques sites, et les quantités locales ne présentent aucun ordre. En utilisant l'entropie d'intrication de von Neumann nous avons également constaté que la fonction d'onde est très proche d'un état produit, en accord avec l'état fondamental qui est un produit des états $|0\rangle$. Cette phase inclut donc le point $J_d = -J_{\perp}$ du tube non frustré [205].

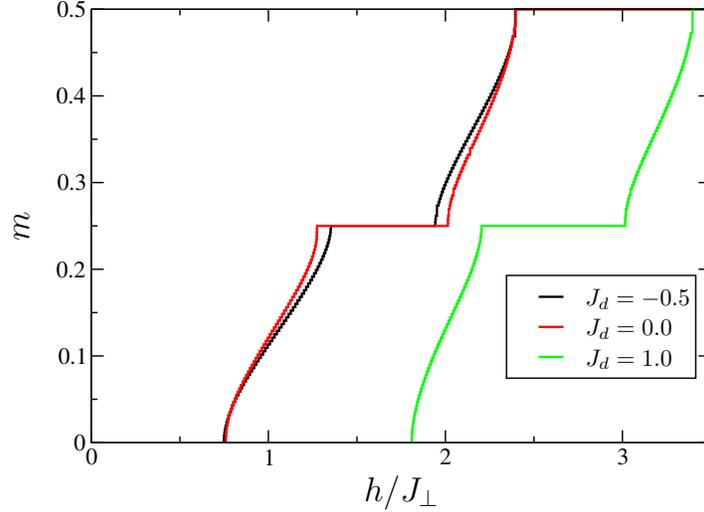


FIGURE III.13 – Courbe d’aimantation $m(h)$ pour le tube $S = 1/2$ avec $L = 64$ et un couplage longitudinal $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,2$. Nous retrouvons bien un large plateau à $m = 1/4$ ainsi qu’un plateau à $m = 0$ correspondant au gap de spin. Pour $J_d \leq 0$ le champ de saturation ne dépend pas de J_d .

5.1.2 Régime $J_d > 0$

Nous passons maintenant au régime opposé $J_d < 0$, et traçons sur la Figure III.14 les valeurs moyennes des opérateurs locaux $S_{\alpha,j}^z$ and $Q_j^{\alpha\beta\gamma\delta}$ pour $J_d/J_{\perp} = 1$ et $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,1$ et une taille $L = 96$. Il est évident que la simulation est bloquée dans un des deux états fondamentaux dégénérés [162], comme ce que nous avons vu pour le tube triangulaire dans le chapitre précédent. Les valeurs des $S_{\alpha,j}^z$ correspondent bien au *spin imbalance* $\langle (-1)^j \mu_j^{1234} \rangle = \pm 1$. Puisque la simulation sélectionne un des deux états nous pouvons utiliser les valeurs moyennes des opérateurs plutôt que leurs corrélations pour caractériser la fonction d’onde.

Il est important de noter que $\langle S_{1,j}^z \rangle$ et $\langle S_{3,j}^z \rangle$ prennent des valeurs extrêmement proches des valeurs $+1/2$ sur les plaquettes paires et 0 sur les plaquettes impaires, et inversement pour $\langle S_{2,j}^z \rangle$ et $\langle S_{4,j}^z \rangle$. La différence est de l’ordre de 0,01, et nous avons vérifié qu’elle ne change pas lorsque nous varions J_{\parallel}/J_{\perp} . Cela rejoint nos discussions précédentes sur la quantification de l’amplitude du *spin imbalance* alterné et la suppression des fluctuations de l’opérateur $(-1)^j \mu_j^{1234}$. Puisque cette valeur moyenne est quasiment saturée, la fonction d’onde doit être extrêmement proche d’un état produit avec $|\Psi_{24}\rangle$ sur les plaquettes paires et $|\Psi_{13}\rangle$ sur les impaires. Nous avons calculé l’entropie d’intrication d’une plaquette par rapport au reste du système et elle est effectivement très proche de zéro. Pour les valeurs moyennes des opérateurs $Q_j^{\alpha\beta\gamma\delta}$ nous trouvons bien que $\langle Q_j^{1234} \rangle = -\langle Q_j^{1423} \rangle$ est très proche de $-1/8$, tandis que $Q_j^{1324} = 0$ comme attendu d’après les relations (III.31). Encore une fois, ces valeurs moyennes non nulles ne font qu’accompagner le *spin imbalance* mais n’indiquent pas un ordre de l’opérateur Q .

5.1.3 Point symétrique $J_d = 0$

Pour finir nous nous plaçons au point symétrique S_4 . La Figure III.15 montre les quantités locales calculées pour $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,1$ et $L = 96$. Comme pour $J_d > 0$ la simulation se bloque dans un des six états fondamentaux de *spin imbalance* alterné. Les aimantations $\langle S_{j,3}^z \rangle$ et $\langle S_{j,4}^z \rangle$ sont proches de $+1/2$ sur les plaquettes impaires et 0 sur les paires et l’inverse pour les sites 1 et 2. Nous en déduisons

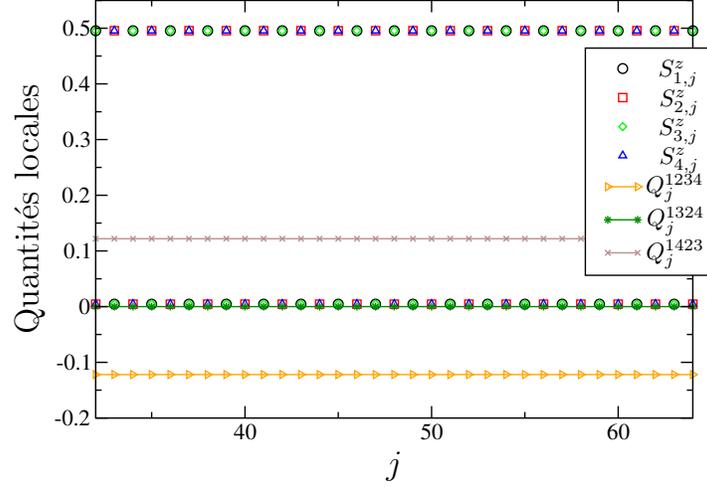


FIGURE III.14 – Quantités locales $S_{\alpha,j}^z$ and Q_i^{jklm} le long des chaînes pour $J_d/J_{\perp} = 1$ et $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0, 1$ pour un tube $S = 1/2$ de taille $L = 96$. Les valeurs alternées de $\langle S_{\alpha,j}^z \rangle$, évaluées au milieu du système (les effets de bords sont très faibles), révèlent que la simulation est bloquée dans l'un des deux états de *spin imbalance* prédits dans l'approche de couplage fort. Le fait qu'elles soient très proches des valeurs $+1/2$ et 0 confirment notre discussion sur la quantification du *spin imbalance* et la sélection d'état-produits. Les deux valeurs moyennes non nulles $\langle Q_j^{1234} \rangle = -\langle Q_j^{1423} \rangle \simeq -1/8$ sont également les bonnes (voir Eq. III.31).

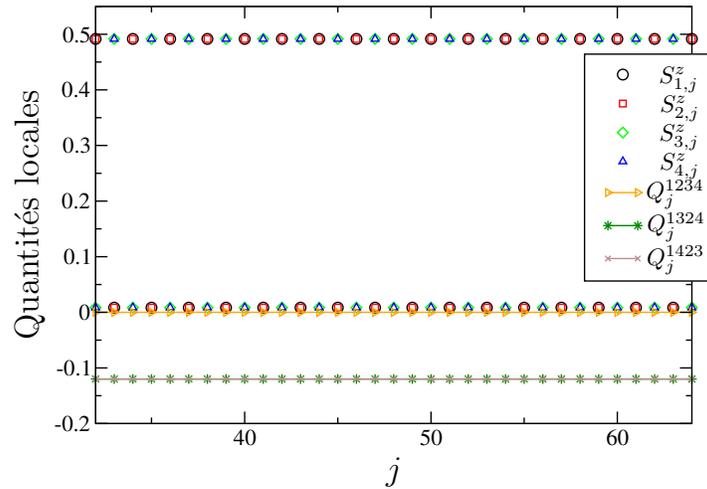


FIGURE III.15 – Quantités locales $S_{\alpha,j}^z$ and Q_i^{jklm} le long des chaînes pour $J_d/J_{\perp} = 0$ et $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0, 1$, $S = 1/2$ et $L = 96$. Comme précédemment les valeurs alternées de $S_{\alpha,j}^z$, évaluées au milieu du système (les effets de bords sont très faibles), montrent que la simulation est bloquée dans l'un des six états fondamentaux du point symétrique. Nous trouvons encore des valeurs numériques très proches de $+1/2$ et 0 et obtenons bien un *spin imbalance* quantifié. Les valeurs $\langle Q_i^{1324} \rangle = \langle Q_i^{1423} \rangle \simeq -1/8$ sont en conséquence bien saturées.

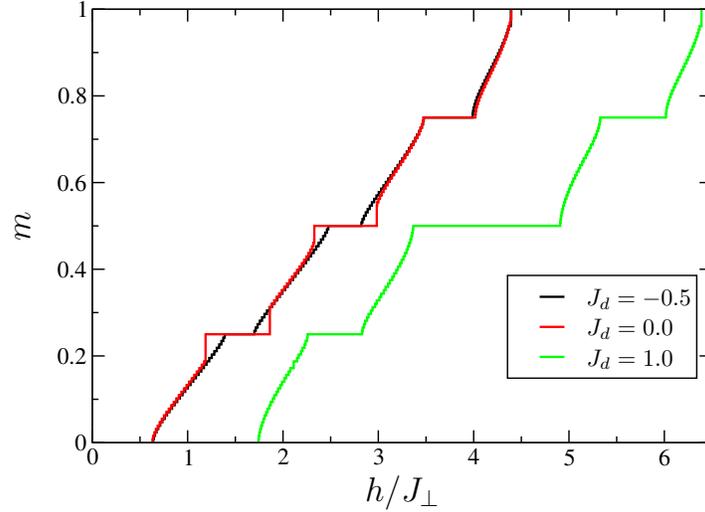


FIGURE III.16 – Courbe d’aimantation $m(h)$ pour le tube $S = 1$ avec $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0, 1$ et $L = 32$. De larges plateaux aux aimantations $m = 0, 1/4, 1/2, 3/4$ sont visibles. Pour $J_d \leq 0$ le champ de saturation ne dépend pas de J_d .

la fonction d’onde associée, qui est donc le produit des $|\Psi_{12}\rangle$ sur les plaquettes paires et $|\Psi_{34}\rangle$ sur les impaires. Le paramètre d’ordre (presque) saturé correspondant est $\langle (-1)^j \mu_j^{2314} \rangle \simeq +1$, et pour les opérateurs $Q^{\alpha\beta\gamma\delta}$ les deux non nuls sont $\langle Q_i^{1324} \rangle = \langle Q_i^{1423} \rangle \simeq -1/8$. Remarquons que cet état n’est un état fondamental qu’au point symétrique, et nous avons pu observer chacun des six états dans les différentes simulations.

5.2 Cas d’un spin- S

Nous traitons maintenant le cas de spins plus élevés en prenant $S = 1$. Nous donnons des résultats pour le dernier plateau $m = S - 1/4$ et confirmons l’apparition pour des valeurs $J_{\parallel}/J_{\perp} \lesssim 1$ d’une seconde phase où l’opérateur $Q^{\alpha\beta\gamma\delta}$ s’ordonne uniformément. Nous discuterons la nature de la transition de phase, en particulier au point symétrique où nous n’avons pas de prédictions de couplage fort. Ces résultats sont présentés essentiellement pour $S = 1$, plus facile numériquement, mais nous avons vérifié que les mêmes conclusions s’appliquent pour $S = 3/2$. Nous présenterons aussi des calculs qui révèlent des phases de *spin imbalance* alterné et quantifié sur tous les plateaux d’aimantation pour $S = 1$ et $S = 3/2$.

Nous commençons par montrer sur la Figure III.16 des courbes d’aimantation pour $S = 1$ et $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0, 1$ pour une taille $L = 32$. Les plateaux à $m = 1/4, 1/2, 3/4$ apparaissent clairement, et nous retrouvons les bonnes valeurs pour les champs de saturation. Nous notons la présence de hauts sauts d’aimantation pour les plateaux $m = 1/4, 1/2$ au point symétrique et pour lesquels nous n’avons pas d’explication.

5.2.1 Dernier plateau d’aimantation : $J_d > 0$

Pour $J_d > 0$, nous espérons donc observer une transition de phase vers la phase avec l’ordre uniforme de l’opérateur $Q^{\alpha\beta\gamma\delta}$. Si nous suivons les résultats de l’analyse de couplage fort, pour $J_d/J_{\perp} = 1$ le point de transition est estimé à $J_{\parallel}/J_{\perp} \simeq 0,35$ (voir la fenêtre secondaire de la Figure III.11). Puisque

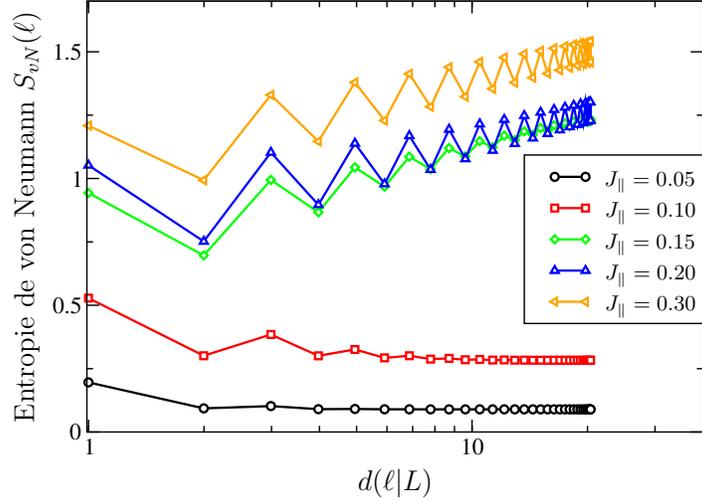


FIGURE III.17 – Entropie de von Neumann $S_{vN}(\ell)$ en fonction de la longueur de bloc conforme $d(\ell|L)$ pour un tube $S = 1$ et $L = 64$ pour plusieurs valeurs de J_{\parallel}/J_{\perp} et $J_d/J_{\perp} = 1$. Pour un faible couplage, le système est dans la phase de *spin imbalance* alterné et l'entropie sature. Lorsqu'il augmente, une transition de phase a lieu et la charge centrale est $c = 1$ pour une large plage de couplages, ce qui est en fait un artefact numérique (voir texte).

nous avons vu que la transition doit correspondre à un point $U(1)$, nous pouvons utiliser l'entropie de von Neumann $S_{vN}(\ell)$ pour la localiser, comme pour le tube triangulaire. Rappelons que pour une phase critique, et donc le point critique que nous attendons, l'entropie a la forme $S_{vN}(\ell) \simeq (c/6) \log d(\ell|L)$, où $d(\ell|L)$ est la distance conforme et c la charge centrale [161].

Nous traçons l'entropie sur la Figure III.17 pour J_d/J_{\perp} et plusieurs valeurs de J_{\parallel}/J_{\perp} entre 0,05 et 0,3. Pour le plus petit couplage 0,05, nous associons le comportement saturé de l'entropie à la phase gappée de *spin imbalance*. A partir de $J_{\parallel}/J_{\perp} \simeq 0,15$, la forme de l'entropie change et nous retrouvons un comportement logarithmique. Après avoir supprimé la partie oscillante, qui provient d'une modulation de l'énergie de liens [211], nous obtenons une charge centrale très proche de 1 pour les couplages jusqu'à $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,3$ ($c = 0,96, 0,99, 0,93$ pour respectivement $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,15, 0,2, 0,3$). Si le fait de trouver une charge centrale $c = 1$ au point de transition est en accord avec notre prédiction d'un point $U(1)$, nous ne retrouvons pas sur ces résultats la phase gappée uniforme que nous attendons pour les couplages plus grands. En fait, la large phase $c = 1$ observée ici est sans aucun doute un artefact numérique, et se comprend très bien si nous revenons au modèle XYZ (III.33) et aux valeurs des paramètres J_{μ} . En effet, nous avons vu que les couplages J_y et J_z étaient très proches (la différence est d'environ $0,04J_{\parallel}^2/J_{\perp}$), et le modèle XYZ où J_z domine est donc très proche d'un modèle XYY, qui a lui une symétrie $U(1)$. Dans ce cas, le gap du système, qui s'ouvre proportionnellement à $J_z - J_y$, sera très petit. Une simulation numérique pour une taille L plus petite que la grande longueur de corrélation associée au petit gap affichera donc un comportement critique. Nous pouvons cependant raisonnablement estimer le couplage critique d'après le saut dans la valeur de la charge centrale à environ $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,15$, ce qui n'est pas trop éloigné de la valeur prédite en perturbation.

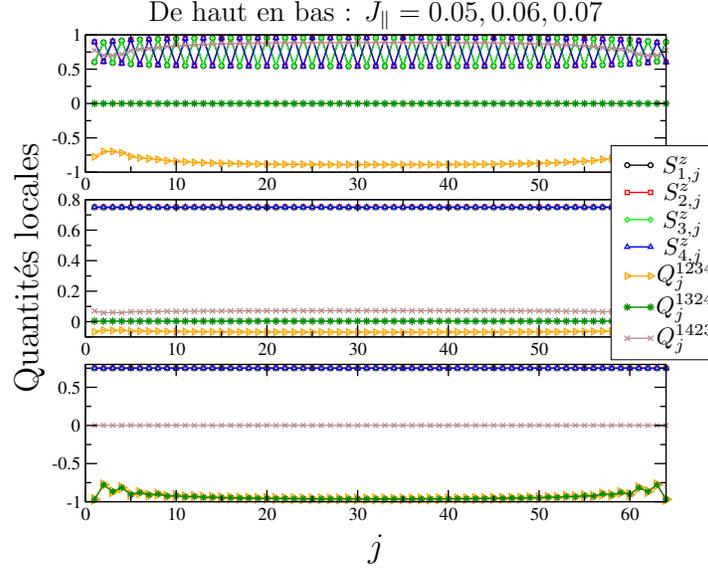


FIGURE III.18 – Evolution des observables locales $S_{\alpha,j}^z$ et $Q_j^{\alpha\beta\gamma\delta}$ au point symétrique $J_d = 0$, $L = 64$ et $S = 1$, avec $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,05, 0,06, 0,07$ de haut en bas. Le *spin imbalance* disparaît entre $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,05 - 0,06$ puis le système entre dans la phase où l'opérateur Q s'ordonne. Suivant les valeurs de la Table III.1, nous concluons que pour $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,07$ la simulation est bloquée dans un état proche de l'état $|\Psi_{-}\rangle$.

5.2.2 Dernier plateau d'aimantation : $J_d = 0$

Au point symétrique S_4 , nous commençons par montrer sur la Figure III.18 l'évolution des observables locales $\langle S_{\alpha,j}^z \rangle$ and $\langle Q_j^{\alpha\beta\gamma\delta} \rangle$ lorsque le couplage longitudinal augmente. Nous voyons qu'à $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,05$ le *spin imbalance* alterné est présent mais réduit, ce qui indique que nous sommes proches de la transition. A partir de $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,06$ il est complètement absent. Cela nous donne une estimation grossière de la valeur du point critique, qui est en très bon accord avec les valeurs attendues d'après les spectres d'excitation de la diagonalisation exacte (voir le panneau de gauche de la Figure III.12 quand les niveaux excités commencent à s'écraser sur le fondamental trois fois dégénéré à $J_{\parallel}/J_{\perp} \simeq 0,06$). Nous pouvons aussi comparer les valeurs trouvées pour les opérateurs $Q_j^{\alpha\beta\gamma\delta}$ aux valeurs dans les états-produits de la Table III.1 pour $S = 1$. Nous voyons que la simulation pour $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,07$ est bloquée dans l'état $|\Psi_{-}\rangle$. Le fait que les valeurs moyennes des $Q_j^{\alpha\beta\gamma\delta}$ soient divisées par deux par rapport aux états parfaitement ordonnés nous dit que, bien que l'état-produit soit une très bonne image de la vraie fonction d'onde, cela reste approximatif et donc le paramètre d'ordre associé n'est pas saturé et ses fluctuations ne sont pas nulles. Cela est à comparer à la phase de *spin imbalance* où le paramètre d'ordre donne bien la valeur quantifiée. Suivant le Hamiltonien (III.36), même si le terme q_3 domine et provoque l'ordre uniforme, les autres termes q_1 et q_2 ne sont néanmoins pas négligeables dans le sens qu'ils vont justement donner des fluctuations autour de cet état. Nous reviendrons sur ces idées plus loin.

Nous avons ensuite utilisé l'entropie de von Neumann pour obtenir une valeur précise du point de transition. Sur la Figure III.19, nous traçons l'entropie pour plusieurs valeurs de J_{\parallel}/J_{\perp} autour de la transition de phase. Nous voyons que des deux côtés de la transition, pour $J_{\parallel}/J_{\perp} \leq 0,054$ et $J_{\parallel}/J_{\perp} \geq 0,07$ l'entropie sature, confirmant l'existence de deux phases gappées. Pour des couplages

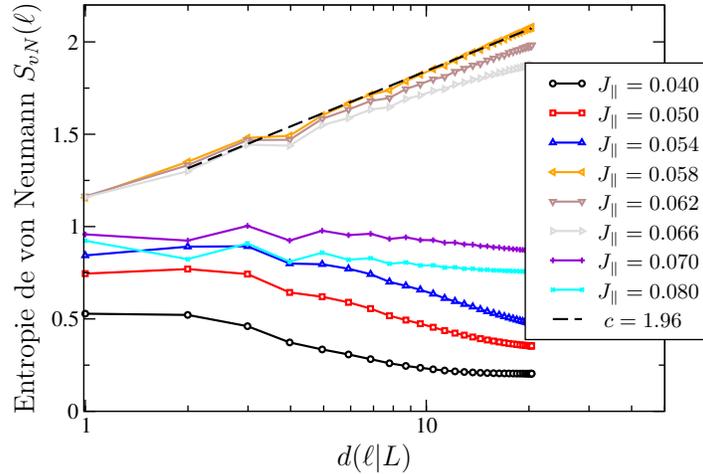


FIGURE III.19 – Evolution de l’entropie de von Neumann $S_{vN}(\ell)$ en fonction de la longueur de bloc conforme $d(\ell|L)$ pour un tube $S = 1$ et $L = 64$ au point $J_d = 0$ quand $J_{||}/J_{\perp}$ varie de 0,04 à 0,08. Nous obtenons une entropie qui sature des deux côtés d’un comportement critique autour de $J_{||}/J_{\perp} = 0,058$, ce qui confirme la transition entre deux phases gappées, la phase de *spin imbalance* et la phase Q . L’entropie maximale pour $J_{||}/J_{\perp} = 0,058$ donne une charge centrale $c = 1,96$ (ligne en pointillés).

entre ces deux valeurs, nous retrouvons un comportement logarithmique indiquant la présence d’un point critique. Pour l’entropie la plus élevée à $J_{||}/J_{\perp} = 0,058$, l’entropie est très bien fittée avec une charge centrale atypique $c = 1,96$. La question est alors de savoir si cette criticalité exotique est réelle. Avec cette valeur $c = 2$, le point critique pourrait avoir une symétrie $SU(3)$. En revenant au modèle (III.36), nous voyons qu’il possède une symétrie $SU(3)$ exacte au point $q_1 = q_2 = q_3$, et si la transition dans notre cas avait lieu à ce point ou à son voisinage cela pourrait expliquer les résultats de l’entropie. Cependant, nous avons ces termes avec des signes différents, puisque q_1 est positif mais q_2 et q_3 sont négatifs. De plus, au second ordre en perturbation nous avons vu dans (III.46) que q_2 et q_3 sont légèrement différents. Nous n’avons pas été en mesure de trouver une transformation préservant les relations de commutation $SU(3)$ et changeant le signe de q_2 et q_3 dans le Hamiltonien effectif. Il n’est pas donc pas possible de proposer une explication convaincante au comportement critique observé. Nous avons de plus vu dans le régime $J_d > 0$ que la transition est continue bien que les deux phases aient des symétries différentes, et nous ne pouvons donc pas non plus argumenter en faveur d’une transition du premier ordre. Finalement, nous pensons plutôt que ce résultat est un artefact numérique, signalant peut-être la présence d’un point critique exotique dans le voisinage de notre modèle. Pour de plus grands systèmes le comportement critique pourrait disparaître et être remplacé par une transition du premier ordre, comme discuté dans la référence [123] par exemple.

5.2.3 Autres plateaux d’aimantation

Nous terminons cette section numérique en montrant sur la Figure III.20 les aimantations locales $\langle S_{\alpha,j}^z \rangle$ au point symétrique pour $L = 32$ et un couplage $J_{||}/J_{\perp} = 0,01$. A gauche les courbes ont été obtenues pour $S = 1$ sur les plateaux d’aimantation $m = 1/4, 1/2, 3/4$ de haut en bas et à droite pour $S = 3/2$ sur les plateaux $m = 1/4, 1/2, 3/4, 1, 5/4$, toujours de haut en bas.

Tous les plateaux montrent un *spin imbalance* alterné qui est quantifié selon $\langle (-1)^j \mu_j^{\alpha\beta\gamma\delta} \rangle \in \mathbb{Z}$ (avec le bon choix des indices $(\alpha\beta\gamma\delta)$ selon l’état fondamental dégénéré dans lequel la simulation est

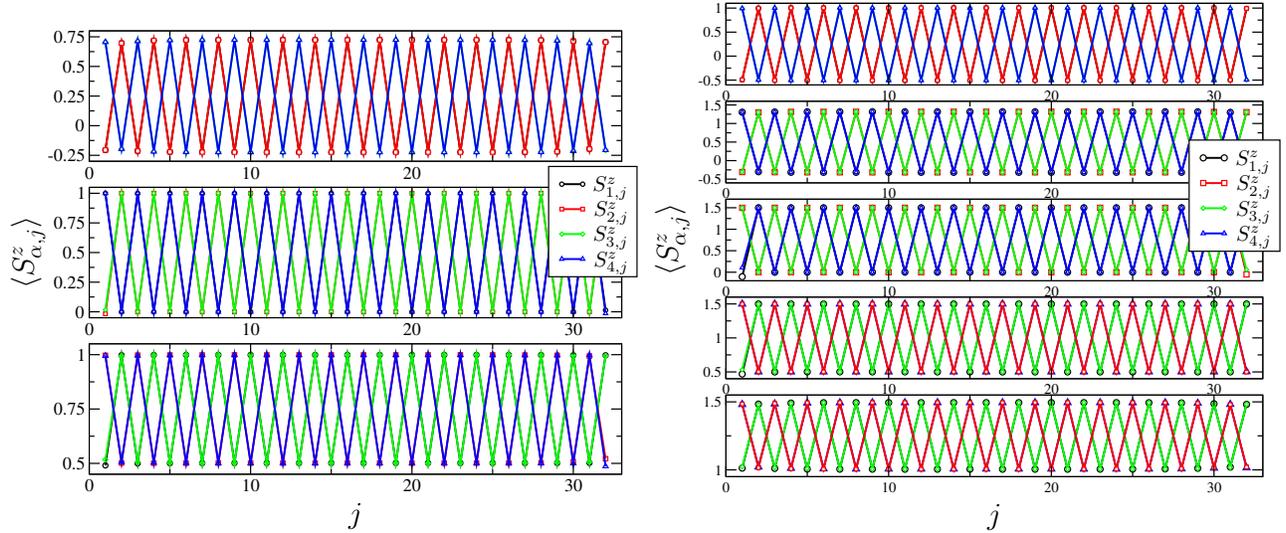


FIGURE III.20 – Aimantations locales $\langle S_{\alpha,j}^z \rangle$ au point symétrique $J_d = 0$ et $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0,01$ pour un tube $L = 32$. La figure de gauche correspond à $S = 1$ et celle de droite à $S = 3/2$. Les panneaux de haut en bas correspondent, à gauche aux plateaux d’aimantation $m = 1/4, 1/2, 3/4$, et à droite aux aimantations $m = 1/4, 1/2, 3/4, 1, 5/4$. Tous les plateaux montrent clairement des phases de *spin imbalance* alterné quantifié.

bloquée), à part pour le plateau $m = 1/2$ du spin-3/2 pour lequel une petite déviation est présente. Comme nous l’avons dit précédemment, l’approche de couplage fort n’est pas d’une grande aide pour les plateaux intermédiaires où le nombre d’états de basse énergie à prendre en compte est élevé, et nous n’avons pu traiter que les cas $m = 3/4$ pour $S = 1$ et $m = 5/4$ pour $S = 3/2$. Ce que nous pouvons néanmoins remarquer sur ces résultats, c’est qu’en partant du plus haut plateau où deux spins sont polarisés à $+S$ et les deux autres ont une aimantation $S - 1/2$, le profil d’aimantation sur le plateau suivant en diminuant m est obtenu en passant simplement de $S - 1/2$ à $S - 1$, et ainsi de suite. Cela se vérifie pour tous les plateaux excepté le plus bas à $m = 1/4$, à la fois pour $S = 1$ et $S = 3/2$. Cela nous dit que, sauf pour ce dernier cas, les états fondamentaux peuvent être compris au niveau du champ moyen, simplement en minimisant le terme longitudinal diagonal $S_{\alpha,j}^z S_{\alpha+1,j}^z$, et donc ces états devraient encore une fois être des états-produits à partir d’états-plaquettes. Pour les plateaux ne suivant pas cette structure, nous n’avons pas de proposition quant à quelles formes auraient les états fondamentaux, mais insistons sur le fait que le *spin imbalance* reste bien quantifié. Enfin, ces profils d’aimantations suggèrent que la dégénérescence devrait être la même que sur le plateau du haut, à savoir six.

Hors du point symétrique, les aimantations locales sont triviales et nous ne les montrons donc pas. Un simple raisonnement sur le couplage de quatre spins nous dit que, pour des plateaux avec un S_{\boxtimes}^z total pair, l’état fondamental d’une plaquette est unique et pour le tube cela donne un état unique et désordonné. Si le S_{\boxtimes}^z total est impair, alors les deux états d’impulsions k_{\square} sont états fondamentaux. Lorsque les plaquettes sont couplées, la dérivation du Hamiltonien effectif à l’ordre un conduit systématiquement à un modèle d’Ising (III.30), et en conséquence un *spin imbalance* alterné est toujours présent, d’amplitude minimale $\langle (-1)^j \mu_j \rangle = \pm 1$, comme pour le spin-1/2 et $J_d > 0$. Par exemple (nous ne montrons pas les résultats), pour $S = 1$ le Hamiltonien effectif Ising pour $m = 1/4$ (i.e. $S_{\boxtimes}^z = 1$), affiche un *spin imbalance* alterné caractérisé par $\langle S_{1,3}^z \rangle = 1/2$ et $\langle S_{2,4}^z \rangle = 0$ et inversement sur la

plaquette suivante. Au final, cela nous dit également que pour un plateau sur deux il y a donc une discontinuité avec le point symétrique $J_d = 0$, qui lui est toujours dans une phase de *spin imbalance* comme nous venons de le discuter. De par l'image habituelle des phases gappées, cette phase doit avoir une extension non nulle lorsque une asymétrie est ajoutée, mais nous n'avons pas étudié cette question plus en détail. Il y aura également une discontinuité pour les plateaux impairs, puisque l'amplitude du *spin imbalance* n'est pas la même à $J_d = 0$ qu'à $J_d > 0$, où elle est toujours minimale. Il y a également une discontinuité dans l'amplitude du *spin imbalance* pour les plateaux impairs, toujours entre $J_d = 0$ et $J_d > 0$.

6 Comparaison avec l'intégrale de chemin

Nous voulons maintenant tenter de faire la connexion avec les résultats de l'approche semi-classique. Dans ce que nous avons fait, celle-ci est capable de détecter des ordre à $k_{\parallel} = 0$, et peut en effet décrire la phase où $Q^{\alpha\beta\delta\gamma}$ s'ordonne ferromagnétiquement. Suivant la discussion de la Section 3, cette phase correspond au profil d'énergie libre avec deux minima à $\gamma = 0, \pi$, que nous ne trouvons pas loin dans le régime perturbatif mais pour des valeurs $J_{\parallel}/J_{\perp} \lesssim 1$. Dans cette phase, l'effet tunnel entre ces minima doit être fortement supprimé. La symétrie \mathbb{Z}_2 (\mathbb{Z}_3) associée pour $J_d > 0$ ($J_d = 0$) est brisée, ce qui est cohérent avec les modèles effectifs dérivés et les résultats numériques. D'un autre côté, nous avons expliqué précédemment que la phase alternée ne peut pas être trouvée dans notre calcul. Cependant, le même mécanisme proposé pour l'émergence d'une quantification du *spin imbalance* est à l'œuvre.

Nous avons mentionné que pour décrire une phase à $k_{\parallel} = \pi$ il est nécessaire de doubler la cellule unité. Cela se fait en considérant les opérateurs de spins sur deux sous-réseaux A et B sur chaque chaîne et il faut donc travailler avec huit champs $\Pi_{\alpha,p}(x, \tau)$ où $\alpha = 1, \dots, 4$ labelle la chaîne et $p = A, B$ le sous-réseau, et il en va de même pour les champs angulaires $\varphi_{\alpha,p}(x, \tau)$. Dans le calcul nous aurions donc à considérer, après la transformation (III.14), les champs $\tilde{\Pi}_{\alpha,p}$ sur les deux sous-réseaux. Nous pouvons alors construire les champs homogènes et alternés $\tilde{\Pi}_{\alpha,h/s} = \tilde{\Pi}_{\alpha,A} \pm \tilde{\Pi}_{\alpha,B}$. Les résultats numériques nous indiquent sans ambiguïté que le champ alterné $\tilde{\Pi}_{2,s}$ est bloqué à une de ses valeurs propres différentes de zéro. Son champ conjugué $\phi_{2,s}$ est donc délocalisé. C'est aussi ce que dit le Hamiltonien effectif pour $J_d > 0$, puisque les états fondamentaux sont très proches d'un état produit des états-plaquettes (III.27). Cette vision est renforcée par le processus de sélection à partir d'un modèle effectif ferromagnétique ayant la symétrie $SU(2)$ et que nous avons mis en avant pour montrer que les fluctuations du *spin imbalance* sont supprimées dès que J_d est non nul. Les simulations DMRG pour les différents plateaux étudiés ont montré que les fonctions d'onde sont systématiquement très proches d'états-produits, l'intrication entre une plaquette et le reste du système étant très proche de zéro. Combiné avec les états (III.27) cela nous assure que les fluctuations sont essentiellement nulles. Le même raisonnement nous dit bien sûr que les fluctuations du *spin imbalance* homogène, donc de $\tilde{\Pi}_{2,h}$, sont elles aussi supprimées, mais la valeur moyenne est nulle et donc le champ est bloqué sur sa valeur propre zéro. Il faut faire la différence avec la phase Q provenant du modèle XYZ, où nous avons encore $\langle \tilde{\Pi}_{2,h} \rangle = 0$ mais cette fois il peut fluctuer. C'est également cohérent avec l'interprétation de cette phase que nous avons donnée ci-dessus avec l'absence d'effet tunnel entre les minima du potentiel. Dans le cas du tube triangulaire, le *spin imbalance* alterné provenait d'un opérateur $\tau_{i-2}^x \tau_{i-1}^x \tau_i^x \tau_{i+1}^x \tau_{i+2}^x \tau_{i+3}^x$ perturbant un modèle XXZ, et rien n'empêchait donc d'avoir des fluctuations du paramètre d'ordre. La courte étude numérique des autres plateaux d'aimantation pour $S = 1$ et $S = 3/2$ pour un petit couplage longitudinal et au point symétrique a révélé pour chaque plateau une phase similaire à $k_{\parallel} = \pi$ avec une fonction d'onde factorisable en produit d'états-plaquettes. Au fur et à mesure que m diminue, le

champ $\tilde{\Pi}_{2,s}$ se bloque à des valeurs propres de plus en plus élevées, et ces phases rentrent donc bien dans le schéma global que nous proposons.

Il n'est malgré tout pas facile de comprendre comment cette délocalisation de $\phi_{2,s}$ se produit si nous partons du modèle (III.7). Physiquement, il est évident que le champ $\phi_{2,s}$ doit avoir un terme de masse $m_{2,s}^2 \propto J_{\parallel}$ et un calcul avec le doublement de la cellule unité le confirme. Une explication possible est que l'état alterné est en fait représentatif d'un modèle modifié, et que le Hamiltonien que nous étudions ici n'est pas suffisant dans le calcul d'intégrale de chemin. L'idée est qu'il faudrait considéré un modèle avec d'autres termes, probablement plus frustrants, pour lequel l'état alterné apparaîtrait clairement comme le fondamental. Comme il s'agit d'une phase gappée, cette phase s'étendrait jusqu'au cas du tube que nous venons d'étudier. Par exemple, nous pouvons nous rendre compte qu'ajouter un terme $H'_{\parallel} = J'_{\parallel} \sum_j \sum_{\alpha} \vec{S}_{\alpha,j} \cdot (\vec{S}_{\alpha+1,j-1} + \vec{S}_{\alpha+1,j+1})$ au Hamiltonien, c'est-à-dire ajouter des couplages longitudinaux entre les différentes chaînes, va favoriser un *spin imbalance* homogène cette fois. Un calcul simple pour $J_d > 0$ montre en effet que le facteur J_{\parallel} du modèle d'Ising (III.30) devient $J_{\parallel} - J'_{\parallel}$. Ce nouveau terme ajoute de la frustration au problème et les deux phases de *spin imbalance* sont en compétition. Dans l'approche semi-classique, l'effet de ce terme est de réduire la masse du champ $\tilde{\Pi}_{2,h}$, qui devient $\lambda_2 = 4a(J_{\parallel} - J'_{\parallel}) + 2aJ_d$. Lorsque ce terme se réduit, il devient probable que les termes au-delà de l'approximation gaussienne vont jouer un rôle et favoriser, en accord avec ce qui est numériquement observé, un blocage du champ à une valeur propre non nulle.

Pour conclure, nous souhaitons insister sur le lien direct entre la dégénérescence continue de l'état classique et les conséquences sur le système quantique. Pour un système générique non frustré, dans la formulation en intégrale de chemin la présence d'un plateau d'aimantation est expliquée par la délocalisation du champ angulaire représentant le mode de Goldstone (le champ ϕ_4 dans notre cas). En conséquence, son conjugué est bloqué (à zéro) et un plateau apparaît. C'est ce mécanisme que nous avons expliqué au chapitre précédent sur l'exemple de la chaîne de Heisenberg. Habituellement, ce scénario ne se produit pas pour les autres champs, ce phénomène ne s'étant pas produit dans le tube triangulaire par exemple. Dans le modèle que nous venons d'étudier, la situation est inhabituelle puisque en un sens certains modes « mous » se comportent comme des modes de Goldstone additionnels. Bien sûr, il s'agit d'un effet dû à la dégénérescence de l'état classique puisque ces modes ne sont associés à aucune symétrie. Il se peut malgré tout que la frustration rende leur potentiel suffisamment faible pour qu'ils ne soient pas localisés, l'effet tunnel permettant ainsi au champ de s'enrouler librement. Le champ conjugué, directement relié à une observable de *spin imbalance*, ne fluctuera lui que très peu. Cette relation entre un plateau d'aimantation et la délocalisation du mode de Goldstone n'est pas spécifique aux modèles unidimensionnels [145], et de tels modes mous ont été observés, à travers une description d'ondes de spins, dans d'autres systèmes frustrés. C'est par exemple le cas pour le modèle de Heisenberg sur le réseau Kagomé [23]. Cela nous suggère que le même type de comportement que celui vu pour le tube carré frustré pourrait se retrouver pour d'autres modèles magnétiques frustrés, en une dimension ou plus.

7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié le comportement sous champ magnétique d'un tube carré de spin- S avec des interactions diagonales frustrantes sur les plaquettes. L'intérêt de ce modèle est qu'il permet de mettre en évidence les conséquences de la dégénérescence de l'état fondamental classique sur les propriétés quantiques. En utilisant une méthode d'intégrale de chemin, nous avons discuté l'émergence de pseudo-modes de Goldstone, qui sont les moments conjugués de variables de *spin*

imbalance. Lorsque le potentiel de localisation de ces modes est suffisamment faible, l'effet tunnel entre les minima du potentiel devient important et ils peuvent se délocaliser. En conséquence, le *spin imbalance* est bloqué à des valeurs particulières et ses fluctuations sont très fortement supprimées. L'origine de ce comportement provient ainsi directement de la frustration présente dans le modèle.

Afin d'être plus quantitatif, nous avons utilisé une approche de couplage fort dans le cas général d'un spin S quelconque. Pour le plus haut plateau d'aimantation, le nombre réduit d'états de basse énergie sur une plaquette rend possible la dérivation de modèles effectifs suffisamment simples. Grâce à cela, nous avons retrouvé la présence de phases de *spin imbalance* alternés pour de faibles valeurs de J_{\parallel}/J_{\perp} . La quantification est comprise en terme d'un modèle d'Ising antiferromagnétique dérivé au premier ordre en perturbation pour $J_d > 0$. Au point symétrique $J_d = 0$, un modèle effectif plus compliqué est obtenu, pour lequel il est néanmoins possible de trouver la phase de *spin imbalance* alterné, en se basant notamment sur des résultats numériques exacts. Dans ce second cas, la présence d'une symétrie $SU(2)$ cachée dans le modèle effectif au premier ordre nous a permis de mettre en évidence un mécanisme de sélection des états de *spin imbalance* par les corrections d'ordres plus élevés, ainsi que la propriété intéressante de factorisation de ces états, qui le sont aussi hors du point symétrique. Pour des valeurs plus grandes de J_{\parallel}/J_{\perp} et un spin $S > 1/2$, nous avons également constaté la présence d'une phase homogène trois fois dégénérée, qui est bien comprise dans le calcul semi-classique dans un régime où la délocalisation du pseudo-Goldstone n'est plus permise.

Les résultats numériques par DMRG ont confirmé ces prédictions dans le régime de couplage fort. En se plaçant sur le plus haut plateau d'aimantation, nous avons en effet observé qu'un *spin imbalance* alterné, quantifié à des valeurs entières, apparaît. De plus, ces résultats, ainsi que des mesures d'intrication entre les plaquettes, indiquent que les états fondamentaux dégénérés sur ce plateau possèdent la propriété intéressante d'être très proches d'états-produits, d'où la suppression des fluctuations du *spin imbalance*. Cela révèle que le mécanisme discuté dans l'intégrale de chemin est bien à l'œuvre pour ce tube de spins. Les simulations ont de plus montré que ce scénario d'une fonction d'onde factorisable accompagnée d'un *spin imbalance* quantifié se produit en fait sur tous les plateaux. Les profils d'aimantation calculés suggèrent que les états peuvent être construits au niveau du champ moyen. Malheureusement, pour un plateau générique le nombre élevé d'états de basse énergie complique la dérivation et l'étude de modèles effectifs, et il n'est donc pas possible de voir plus en détail pourquoi ces états factorisables sont les états fondamentaux.

Finalement, nous pensons que ce tube peut être un bon exemple de modèle très frustré pour lequel des états très proches d'états produits sont obtenus, soit de manière exacte [173, 174], soit de manière approchée [175, 211]. Nous espérons donc que les mécanismes en jeu pour notre modèle peuvent être retrouvés dans d'autres cas, notamment en plus haute dimension, où l'état classique est massivement dégénéré.

Chapitre IV

Modèle étendu de spin-1/2 sur le réseau Kagomé dans la limite Ising

Ce chapitre est consacré à l'étude d'un modèle anisotrope de spin-1/2 avec des interactions jusqu'au troisième voisin sur le réseau Kagomé, et, pour résumer en une phrase, s'inscrit dans la problématique de la recherche de phases « exotiques » dans les systèmes bidimensionnels, à partir de Hamiltoniens qui sont raisonnablement « simples ». Plus précisément, ce travail suit le grand intérêt actuel pour les phases de liquides de spins quantiques en deux dimensions, qui peuvent afficher un nouveau type d'ordre appelé topologique, associé à la présence d'excitations fractionnaires, qui sont des quasi-particules portant une charge qui est une fraction de la quantité physique élémentaire dans le problème. La plupart de ces nouveaux états ont été proposés à partir d'études de champ moyen, et ont par la même occasion entraîné le développement de nouveaux concepts et techniques permettant de lister de manière systématique ces états.

La suite logique de ces nombreux travaux sur la classification de ces états désordonnés magnétiquement est leur réalisation dans des modèles de spin. Nous donnerons un résumé par la suite, mais aujourd'hui un certain nombre de Hamiltoniens ont été identifiés comme ayant de telles phases topologiques dans certains régimes de paramètres. Cependant, dans la majorité des cas le Hamiltonien n'est pas ce que nous pourrions appeler « simple ». Il peut s'agir soit de modèles de dimères, et donc les spins ne sont plus les variables microscopiques, de termes compliqués à plusieurs spins ou encore de réseaux complexes. Dans cette optique, deux axes d'étude sont particulièrement intéressants. D'une part, un objectif est de proposer des Hamiltoniens pouvant posséder ces phases mais n'ayant pas de propriétés particulières, au-delà de symétries globales simples comme $SU(2)$ ou $U(1)$. Avec les progrès actuels dans les réalisations expérimentales de modèles sur réseau grâce aux atomes froids, tendre vers de tels modèles réalistes pourrait permettre d'effectuer une jonction entre la théorie et l'expérience à plus ou moins long terme. Un autre axe important est l'obtention de résultats théoriques parfaitement fiables théoriquement. A deux dimensions, il est rare de pouvoir résoudre analytiquement de manière exacte un Hamiltonien donné, et cela entraîne le besoin de résultats numériques précis. S'il existe de nombreuses techniques développées actuellement pour les problèmes 2D, seuls la diagonalisation exacte et le Monte-Carlo peuvent proposer des résultats non biaisés [212]. La première méthode étant malheureusement fortement limitée en taille, il devient intéressant de proposer des modèles qui, même si parfois artificiels, peuvent être simulables en Monte-Carlo et ainsi disposer de résultats exacts, à l'incertitude statistique près. De cette manière, les prédictions analytiques sur les propriétés de ces nouvelles phases ou transitions de phases peuvent être testées de manière non biaisée sur des systèmes de grandes tailles, et dans le même temps les travaux numériques peuvent aussi servir eux-mêmes à

découvrir de nouveaux états.

Ce chapitre est organisé de la manière suivante. La première section est utilisée pour rappeler les concepts importants de liquides de spins, d'ordre topologique et d'excitations fractionnaires. Puis nous ferons une brève revue des modèles pour lesquels des phases topologiques, principalement celles appelées \mathbb{Z}_2 , ont été trouvées. Nous introduirons également la notion d'entropie topologique, proposée récemment et qui se développe actuellement comme une quantité cruciale dans la détection de ces phases topologiques. Dans la section suivante, nous introduirons en détail le modèle abordé au cours de cette thèse, qui ne possède que des interactions à deux spins avec une symétrie $U(1)$ globale et est de plus simulable en Monte-Carlo. En partant de la limite Ising, nous verrons comment apparaît la physique des modèles de dimères quantiques, pour lesquels des résultats exacts démontrant la présence d'un liquide de spins \mathbb{Z}_2 sont disponibles. Nous présenterons ensuite les résultats déjà obtenus dans la littérature pour le cas sans champ magnétique. Pour un champ non nul, la courbe d'aimantation possède deux plateaux aux aimantations $m = 1/6$ et $m = 1/3$. Dans la section suivante, nous verrons que le premier de ces plateaux est dans une phase cristalline. Nous en profiterons pour présenter un résultat intéressant du point de vue méthodologique quant au comportement de l'entropie de Renyi dans une phase solide, ainsi que les précautions numériques qui doivent être prises lors de l'utilisation de cette observable. Finalement, nous terminerons en listant les différentes perspectives d'étude, à la fois sur le plateau $m = 1/6$ mais également sur ce modèle en général.

1 Motivations

1.1 Quelques concepts

1.1.1 Liquides de spins

Il est bien connu que l'ordre magnétique, qui existe à basse température avant que les fluctuations *thermiques* le détruisent, peut être absent même à température nulle. Les fluctuations quantiques peuvent en effet détruire les différents ordres possibles qui brisent la symétrie $SU(2)$, comme l'ordre de Néel ou les nématiques [26, 27]. Prendre cette définition pour un liquide de spin est cependant trop large, puisque suivant le théorème de Mermin-Wagner [10] n'importe quel modèle à une dimension ou à $T > 0$ en deux dimensions répond à cette définition. De fait (et pour d'autres raisons, voir la suite), la problématique des liquides de spins est différente en une dimension. Nous parlerons ici uniquement du cas 2D, et nous renvoyons à la revue [42] pour un exposé complet sur les systèmes 1D. Historiquement, l'intérêt pour ces phases non magnétiques est venu de leur importance dans la compréhension de la supraconductivité à haute température, comme proposé par ANDERSON en 1987 [213]. A part la dimensionnalité, d'autres ingrédients permettant d'éliminer l'ordre magnétique sont bien identifiés : une petite valeur du spin, un réseau avec une faible coordinence (par exemple le réseau Kagomé) ou un large groupe de symétrie continue de rotation du spin. Le dernier ingrédient, dont nous avons parlé dans le Chapitre I, est la frustration, avec par exemple le modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau carré étudié dès 1988 suite à la proposition de ANDERSON [214]. L'impossibilité de satisfaire toutes les contraintes de l'ordre de Néel combiné à l'importance des fluctuations quantiques peut ainsi conduire à sa disparition.

Les phases quantiques paramagnétiques peuvent être divisées en deux classes, avec d'un côté les *Valence Bond Crystals* (VBC), qui brisent la symétrie de translation du réseau (entre autres), et les liquides de spins qui la préservent. Quelle est l'image physique de ces phases ? Pour cela, il faut revenir à l'idée de ANDERSON, qui en 1973 a proposé comme alternative à l'ordre de Néel un état appelé *Resonating Valence Bond* (RVB) [215]. Le constituant de base d'un tel état est l'appariement de paires

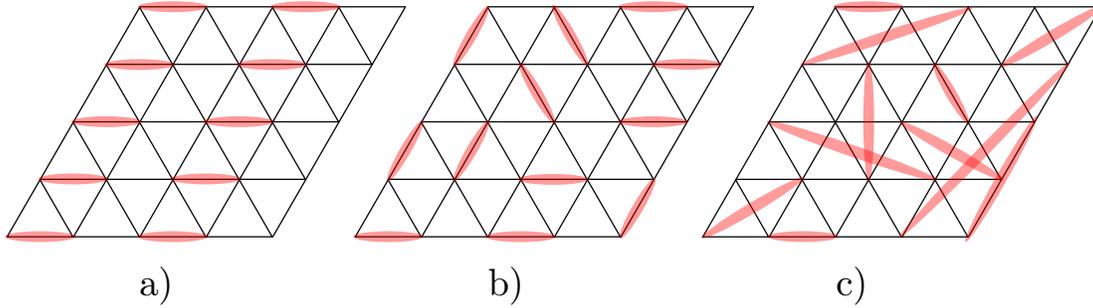


FIGURE IV.1 – Illustration des états VBC et RVB. A gauche a), les dimères (ellipses rouges) s’ordonnent sur le réseau pour former un VBC (état colonnaire). Au centre b) et à droite c), les configurations représentées ne présentent pas d’ordre spatial. Un état RVB est formé par une superposition des différentes configurations possibles de dimères. Si seulement des singulets à courte portée se forment comme en b), l’état est un SRRVB, tandis que si la distribution en taille est large comme en c), nous parlerons de LRRVB (voir texte).

de spins \vec{S}_i et \vec{S}_j pour former un singulet $(|\uparrow_i\downarrow_j\rangle - |\downarrow_i\uparrow_j\rangle)/\sqrt{2}$, ou dimère, et couvrir le réseau. La symétrie $SU(2)$ est restaurée et l’ordre magnétique absent. Il y a alors deux possibilités. Si les singulets s’ordonnent sur le réseau, ils forment un VBC, brisant en particulier la translation, que nous illustrons sur la Figure IV.1 a). Si les fonctions de corrélations à deux spins sont à courte portée, celles à quatre spins, ou corrélations de dimères, sont à longue portée, signalant la formation du VBC. Un tel état est dégénéré, et possède un gap d’ordre J vers des excitations de magnons (voir dans la section suivante quel serait un autre type d’excitation). L’autre possibilité est que les fluctuations entre les différentes configurations de dimères soient très fortes, l’état résultant étant une superposition de toutes ces configurations faites de singulets qui « résonnent » : c’est un état RVB [215] (Figures IV.1 b) et c)), et les symétries spatiales sont restaurées. Deux familles d’états RVB peuvent être identifiées, selon la distribution de la longueur des singulets. S’ils ne peuvent être formés qu’à partir de spins proches spatialement, nous parlons d’états *Short-Range Resonating Valence Bond* (SRRVB), tandis que si toutes les distances sont possibles l’état est appelé *Long-Range Resonating Valence Bond* (LRRVB). Le premier cas mènera typiquement à des liquides de spins gappés (par exemple le liquide gappé \mathbb{Z}_2 que nous décrivons plus loin), et le second à des liquides de spins non gappés, dits algébriques. Pour les VBC, seules les configurations à courte portée ont un poids non négligeable. Remarquons que nous avons ici mis de côté le cas des états paramagnétiques triviaux pouvant se comprendre dans la limite de cellules découplées, comme le cas du composé (voir la Figure I.12). Un tel état, essentiellement formé de dimères décorrélés, est unique et ne brise aucune symétrie du réseau, et il est donc différent d’un VBC.

Il est tentant de penser que de tels états RVB désordonnés ne sont pas intéressants. Pour montrer que cela n’est pas le cas, il faut revenir à l’extension à deux dimensions du théorème LSM [35, 41]. Rappelons que ce théorème nous dit que, si le spin par cellule unité est demi-entier, alors soit l’état fondamental est unique et non gappé (symétrie continue brisée, phase critique ou point critique), soit il est nécessairement gappé *et* dégénéré. En fait, la caractéristique principale de ces états paramagnétiques triviaux est qu’ils contiennent un nombre pair de spins-1/2 par cellule unité (deux dans notre exemple). Ils ne rentrent donc pas dans le cadre du théorème puisque le spin par cellule unité est entier, et donc un état gappé unique n’est pas interdit. Par contre, pour un modèle qui rentre dans les conditions du théorème, le fait d’être gappé et désordonné *interdit* que l’état fondamental soit un état trivial.

Autrement dit, si un état RVB est l'état fondamental d'un tel modèle, bien qu'en apparence il ne possède pas de caractéristique particulière puisque les symétries spatiales sont préservées, il y a quand même un certain ordre d'après le théorème. Une telle phase liquide n'est donc en fait pas triviale, et nous verrons dans la section suivante la notion d'ordre *topologique*. Bien sûr, lorsque le spin par cellule unité est entier c'est également possible, mais, dans ce cas, un gap et une absence d'ordre cristallin *n'impliquent pas* la présence d'un état paramagnétique non trivial.

1.1.2 Fractionalisation et ordre topologique

Un concept souvent associé aux liquides de spins est celui de *fractionalisation*. Il correspond à l'existence d'excitations élémentaires, ou quasi-particules, caractérisées par des nombres quantiques qui sont des fractions des degrés de liberté physiques élémentaires. Un exemple typique est celui de l'effet Hall fractionnaire $\nu = 1/3$, dont les excitations portent une charge électrique de valeur $e/3$. Pour les modèles magnétiques, ces excitations fractionnaires sont appelées spinons, et portent un nombre quantique $S^z = 1/2$ (à mettre en contraste avec les excitations dans l'état de Néel par exemple, qui sont des *spin waves*, ou magnons, gapless portant un $S^z = 1$). Finalement, dans des modèles électroniques comme celui de Hubbard se produit le phénomène de séparation entre le spin et la charge, qui peut ensuite donner lieu à des excitations fractionnaires comme les spinons. Pour être plus précis, derrière cette idée de fractionalisation se pose en fait la question de savoir si ces excitations vont être *déconfinées*, c'est-à-dire si elles vont pouvoir être séparées spatialement à un coût en énergie fini. Dans ce cas-là, ces excitations peuvent bien être traitées comme des objets indépendants, *i.e.* des quasi-particules. Par contre, s'il n'est pas possible de les séparer d'une distance arbitraire avec une énergie finie, ces excitations seront dites *confinées*. Nous illustrons cette idée sur la Figure IV.2. A ce stade, il est utile de discuter l'importance de la dimensionnalité. En effet, en une dimension cette fractionalisation est en fait très naturelle, et s'interprète comme des parois de domaines ou des solitons. La chaîne de MAJUMDAR-GOSH [45, 46] est un exemple typique de VBC 1D possédant des spinons déconfinés [216]. Le phénomène de séparation entre le spin et la charge est également une propriété courante des modèles électroniques 1D [1]. Pour le cas 2D, cette question de confinement/déconfinement est plus riche. En regardant la Figure IV.2, il est aisé de se convaincre que la pénalité en énergie augmentera avec la distance, puisque l'état colonnaire est perturbé sur toute la longueur du chemin qui sépare les deux spinons. Pour les VBC en 2D, les spinons sont confinés, et les excitations sont alors de simples magnons gappés. Pour les états SRRVB, cela dépendra des paramètres du modèle, mais l'idée est que autour d'un spinon, il peut y avoir une réorganisation locale des dimères telle que le coût en énergie reste fini lorsque les spinons sont séparés. Ces états constituent en fait un bon prototype de la fractionalisation \mathbb{Z}_2 [217].

Un intérêt de la présence d'excitations fractionnaires déconfinées est qu'elle entraîne [218] l'apparition d'un ordre *topologique*, une notion introduire par WEN dans l'étude d'un liquide de spin chiral [219, 220] et développée par la suite dans d'autres travaux [221]. Il est utile de replacer cette notion d'ordre dans le contexte plus habituel de ce qui a été pendant longtemps l'image standard en matière condensée. Dans le cadre de la théorie de Landau, les différentes phases possibles de la matière se comprennent selon le concept clé qu'à chaque ordre peut être associée la brisure d'une ou plusieurs symétries [222]. Il se trouve que si cette théorie est très bien adaptée à une température finie, elle ne permet pas de décrire à température nulle ces phases paramagnétiques exotiques supportant des excitations fractionnaires déconfinées. En effet, les fluctuations quantiques vont pouvoir agir de manière cohérente, et ainsi quand même induire un ordre dans la fonction d'onde, au contraire des fluctuations thermiques, qui sont sans cohérence de phase. Un bon point de départ pour aborder cette notion est

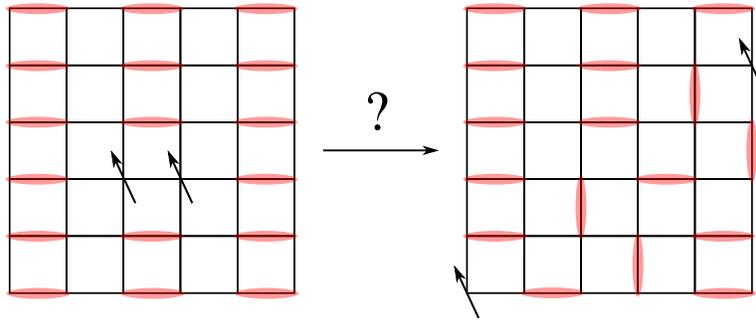


FIGURE IV.2 – Illustration du concept d’excitation fractionnaire et de la problématique du confinement/déconfinement, à partir du cas d’un état VBC colonnaire sur le réseau carré. Un dimère (singulet) est excité en un triplet (par exemple par application d’un champ magnétique externe). Par des réarrangement locaux successifs, les deux spins *up* peuvent être éloignés progressivement. Puisque le changement total est $\Delta S^z = 1$, chacun de ces deux *spinons* porte une excitation fractionnaire $S^z = 1/2$. S’ils peuvent être séparés d’une distance arbitraire pour un coût en énergie restant fini, les spinons seront dits *déconfinés*. Dans le cas contraire, ils seront *confinés*, ce qui est généralement le cas pour un VBC mais pas forcément pour un liquide RVB.

de partir d’un état pour lequel toutes les excitations sont gappées, et qui est dégénéré. Habituellement, cette dégénérescence se comprend par la notion de Landau de symétrie spontanément brisée. C’est le cas pour une phase VBC, qui brise une ou plusieurs symétries du réseau. Historiquement, la première déviation à cette image est venue de l’effet Hall quantique fractionnaire, pour lequel il a été montré que l’état fondamental peut être dégénéré, sans toutefois qu’aucune symétrie discrète ne soit présente dans le Hamiltonien [221]. Dit autrement, il n’y a pas d’opérateur local distinguant ces différents états dégénérés. Cette dégénérescence, et il en va de même pour le liquide de spin chiral, est de plus robuste vis-à-vis de petites perturbations du Hamiltonien (sauf à passer par une transition de phase), même si elles brisent explicitement toutes les symétries du modèle [219, 220], en contradiction avec l’image d’un ordre classique. Cela indique la présence d’un ordre sous-jacent d’un type nouveau, et la notion d’ordre topologique a ainsi été introduite. Une propriété très spéciale est que le nombre d’états dégénérés dépend de la topologie du système [219]. Il sera différent sur un cylindre (surface de genre 0) de sur un tore (genre 1). De plus, sur un système de taille finie les différents états dégénérés sont séparés en énergie d’une quantité d’ordre $\exp(-L/\xi)$, contre $\exp(-L^2/\xi^2)$ pour des états issus d’une brisure de symétrie, où L est la dimension du système et ξ la longueur microscopique pertinente.

Nous pouvons maintenant utiliser ces différentes notions pour définir plus précisément un liquide de spin \mathbb{Z}_2 , dont nous allons continuer à parler par la suite¹. Il ne brise aucune symétrie, ne présente pas de corrélations à longue portée, que ce soit pour les corrélations entre spins, entre dimères ou d’ordre plus élevé. Il possède un ordre topologique, et sa dégénérescence est de deux sur un cylindre et quatre sur un tore. La physique sous-jacente est celle des états RVB à courte portée [215]. Les excitations sont gappées et de deux types. Premièrement des spinons déconfinés, qui peuvent être vus comme les racines carrées des opérateurs de spins S_i^+ , ou, dit autrement, ces derniers peuvent formellement se réécrire comme le produit de deux opérateurs de création de spinons. Cette image simple permet de voir comment apparaît une symétrie de jauge \mathbb{Z}_2 , puisqu’il est alors possible de changer localement le

1. Il existe en fait une grande variété de liquides \mathbb{Z}_2 , certains étant gappés et d’autres non. Nous ne parlerons ici que de la phase \mathbb{Z}_2 gappée qui se retrouve dans les modèles de dimères quantiques comme sur le réseau triangulaire.

signe des opérateurs des spinons sans changer celui des opérateurs de spins, d'où la description de la phase déconfinée par une théorie de jauge \mathbb{Z}_2 [223]. Cela nous amène au deuxième type d'excitations, appelées *visons*. Ce sont des vortex, *i.e.* des défauts topologiques, du champ de jauge \mathbb{Z}_2 . Ils portent un flux de π et par conséquent lorsqu'un spinon fait le tour d'un vison, la fonction d'onde prend une phase de -1 [223]. En fait, lorsque deux visons sont créés, puis qu'un des visons fait le tour du système puis qu'ils sont annihilés, l'état résultant est différent de celui d'origine : c'est la dégénérescence topologique. Il existe également un lien entre visons et spinons, les deux excitations ne pouvant pas être toutes deux présentes et se propager librement. Lorsque les visons prolifèrent, les spinons sont alors confinés. Par contre, lorsque les visons sont gappés il y a obligatoirement fractionalisation [223].

1.2 A la recherche des phases topologiques

1.2.1 Dans quels modèles ?

Bien que les concepts introduits dans la section précédente soient déjà intéressants par eux-mêmes, il est nécessaire de se poser la question de savoir si ces phases fractionnaires sont en pratique réalisées dans des modèles microscopiques. Nous ne considérerons ici que les modèles 2D, puisque nous avons dit précédemment que le cas 1D est particulier. Nous nous limiterons également au cas des phases topologiques \mathbb{Z}_2 dans les modèles de spins et de dimères. Pour les modèles bosoniques et électroniques, SENTHIL et MOTRUNICH ont proposé plusieurs Hamiltoniens microscopiques, avec des interactions simples et uniquement une conservation de la charge et du spin, présentant diverses phases fractionnaires stables ainsi que de séparation entre charge et spin [224].

Nous allons tout d'abord parler de modèles exactement solubles. Le modèle de spin le plus simple possédant une fractionalisation \mathbb{Z}_2 est le modèle *toric code*, proposé par KITAEV en 1997 [225]. Prenons des spins-1/2 qui vivent sur les *liens* d'un réseau carré. Le Hamiltonien s'écrit

$$H = -J \sum_v A_v - J \sum_p B_p \quad (\text{IV.1})$$

où $A_v = \prod_{j \in v} \sigma_j^x$ avec un produit sur les quatre liens issus d'un vertex, $B_p = \prod_{j \in p} \sigma_j^z$ avec un produit sur les quatre liens formant une plaquette carrée, et dans le Hamiltonien les sommes se font respectivement sur tous les vertex et toutes les plaquettes. L'état fondamental est exactement connu, dégénéré 4^g fois sur une surface de genre g et possède un ordre topologique \mathbb{Z}_2 . Un autre modèle de spin-1/2, toujours introduit par KITAEV, est donné par [226]

$$H = -J_x \sum_{\text{x-links}} \sigma_j^x \sigma_k^x - J_y \sum_{\text{y-links}} \sigma_j^y \sigma_k^y - J_z \sum_{\text{z-links}} \sigma_j^z \sigma_k^z \quad (\text{IV.2})$$

sur le réseau hexagonal, dont les trois types de liens $\langle jk \rangle$ sont notés « x-links », « y-links » et « z-links ». Bien que ces deux modèles possèdent bien des phases exotiques, il est évident qu'ils ne sont pas des modèles de spins « réalistes ». Notamment, ils peuvent se réécrire comme des théories de jauge. Il n'est pas donc pas évident de savoir si ces phases peuvent se retrouver dans des modèles plus simples sans structures de jauge particulières, avec seulement des symétries globales $U(1)$ ou $SU(2)$.

Une autre classe de modèles possédant des phases \mathbb{Z}_2 gappées est celle des modèles de dimères quantiques, qui ont pour objectif de décrire la physique des états SRRVB. Par définition, dans ces états les dimères ne sont pas ordonnés et cela se traduit par la possibilité d'un déconfinement des spinons (contrairement aux VBC). De nombreux exemples ont été proposés et étudiés sur les réseaux triangulaires [217, 227, 228, 229] et Kagomé [230, 231, 232]. La plupart de ces travaux mettant en

évidence une phase \mathbb{Z}_2 sont basés sur l'existence d'un point particulier où l'état fondamental est exact [233]. Nous y reviendrons dans la discussion du modèle de spin-1/2 sur le réseau Kagomé que nous allons présenter dans la Section 2. Il faut remarquer que ces deux réseaux ne sont pas bipartites, et l'existence de la phase \mathbb{Z}_2 est étroitement liée avec cette propriété (elle est absente pour les mêmes modèles sur le réseau carré [234]). Là encore, le « problème » est que ces modèles peuvent émerger comme une certaine limite de théories de jauge \mathbb{Z}_2 [235]. Même si ces modèles ont une forte motivation physique, ils possèdent néanmoins une certaine structure qui n'est pas présente dans un modèle de spin générique.

Finalement, plusieurs modèles microscopiques possédant une invariance par rotation, $SU(2)$ ou $U(1)$, pourraient accueillir des liquides de spins \mathbb{Z}_2 . Comme évoqué à plusieurs reprises, il s'agit d'une des possibilités proposées pour le modèle de Heisenberg $S = 1/2$ sur le réseau Kagomé [168, 169, 170]. D'autres travaux pointent eux vers un liquide de spin gapless $U(1)$ [236], un liquide de spin chiral topologique [237] ou divers VBC avec des mailles élémentaires pouvant comporter jusqu'à 36 sites [238, 239]. Un autre candidat est le modèle de Heisenberg $J_1 - J_2$ avec $S = 1/2$ sur le réseau carré [171], bien que de très récents résultats tendent vers un état VBC [172]. D'autres modèles de spin-1/2 avec une invariance $SU(2)$ contiennent des phases \mathbb{Z}_2 , mais soit possèdent des interactions particulières (termes à 12 spins!), soit les réseaux sont compliqués [240, 241]. Bien que cette liste ne soit pas exhaustive, nous voyons que le nombre de modèles microscopiques simples, *i.e.* avec des interactions à courte portée et à deux corps, et pas de symétries spéciales autre que la symétrie de rotation de spin, est assez limité.

1.2.2 Comment les détecter ?

Une différence clé avec l'ordre conventionnel est l'absence de paramètre d'ordre local pouvant détecter un ordre topologique, comme peuvent l'être les facteurs de structures pour les cristaux. Dans une phase topologique, nous avons dit qu'il n'est pas possible de distinguer les états dégénérés avec une observable locale. Pour un VBC, l'ordre à longue portée apparaîtra dans les fonctions de corrélations à quatre spins, tandis que pour un ordre topologique toutes les fonctions de corrélations tendront vers zéro. Cela pose la question suivante : comment détecter un liquide de spin topologique ? Des approches de champ moyen et le développement de nouveaux outils mathématiques ont permis d'étudier de manière systématique les différents types de spin liquides [242]. Cependant, à cause des fluctuations quantiques le champ moyen ne peut pas nous dire quel type de Hamiltonien possède telle phase fractionnaire, et il est donc nécessaire de proposer de nouveaux paramètres d'ordre afin de les détecter et de les distinguer. Nous nous attacherons ici à répondre à cette question du point de vue numérique (à noter que des propositions ont été faites pour détecter expérimentalement la fractionalisation pour les électrons [243]). Evidemment, la dégénérescence est un bon nombre quantique caractérisant ces phases topologiques. Cependant, cette information n'est que partielle, en plus d'être compliquée à mesurer dans des simulations (et pareil pour la séparation en énergie [244]). Jusqu'à récemment, l'approche habituelle consistait plutôt à mettre en évidence l'absence d'ordre conventionnel [245], combinée avec le théorème de HASTINGS. Cette indication indirecte ne renseigne cependant pas sur la nature de la phase topologique. De plus, cette méthode n'est pas la plus adaptée, comme le montre l'exemple du modèle de Heisenberg sur le réseau Kagomé. Pour les phases de type VBC, ne pas trouver d'ordre dans un facteur de structure particulier n'élimine que l'ordre correspondant. Il est donc très difficile en pratique d'éliminer toutes les possibilités, surtout vu le grand nombre de VBC proposés ainsi que leurs parfois grandes cellules élémentaires.

Une bonne observable utilise le fait que l'ordre topologique a récemment été réexaminé du point

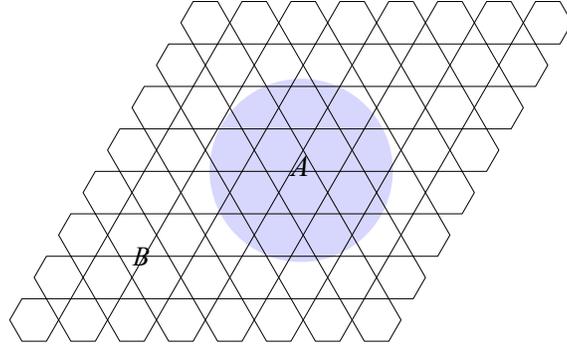


FIGURE IV.3 – Partition du système entre deux sous-systèmes A (intérieur du disque bleu) et son complémentaire B sur le réseau Kagomé. Dans une phase topologique, les entropies de von Neumann et de Renyi calculées pour le disque A de périmètre ℓ_A seront de la forme (IV.3) et (IV.4).

de vue de l'intrication. Une caractéristique importante de ces phases est leur intrication « globale », ou à longue portée, en opposition avec l'intrication à courte portée des phases VBC. Cette propriété particulière se retrouve dans les termes sous-dominants de l'entropie de von Neumann $S_{vN}(A) = -\text{Tr}\{\rho_A \ln(\rho_A)\}$ d'une partition A du système. En effet, LEVIN et WEN (LW) d'un côté, et KITAEV et PRESKILL (KP) de l'autre, ont montré que cette dernière se comporte comme [166, 167]

$$S_{vN}(A) = a\ell_A - \gamma + \dots, \quad (\text{IV.3})$$

où ℓ_A est la dimension linéaire du sous-système A , de frontière régulière (pas d'angles, typiquement un disque) avec son complémentaire B (voir Figure IV.3), et les trois points représentent des termes négligeables quand ℓ_A est assez grand. Le coefficient a de la loi des aires dépend des paramètres microscopiques du modèle, tandis que la constante additive $\gamma > 0$ est universelle et est appelée « entropie d'intrication topologique » puisqu'elle reflète la présence d'intrication non locale [246]. Les références [166, 167] ont montré que $\gamma = \ln \mathcal{D}$, où \mathcal{D} est la dimension quantique totale de la théorie des champs topologique sous-jacente, et constitue donc un bon nombre quantique pouvant être vu comme un paramètre d'ordre. En combinant les entropies calculées pour plusieurs régions A , LW et KP ont chacun proposé une construction permettant d'isoler l'entropie topologique pour un modèle sur réseau, où la définition de ℓ_A peut poser problème. La même constante se retrouve également dans les entropies de Renyi $S_q(A) = \ln(\text{Tr}\{\rho_A^q\})/(1 - q)$, avec [247]

$$S_q(A) = a_q \ell_A - \gamma + \dots, \quad (\text{IV.4})$$

avec l'entropie de von Neumann qui correspond à la limite $q \rightarrow 1$, et les a_q ne sont pas universels. Cette constante permet donc numériquement de détecter une phase topologique, et depuis son introduction de nombreux travaux se sont attachés à la calculer dans différents modèles [169, 170, 171, 229, 248, 249, 250].

2 Présentation du modèle BFG

Le modèle que nous allons étudier est une extension au cas d'un champ magnétique du modèle introduit par BALENTS, FISHER et GIRVIN (BFG) en 2002 [251]. L'objectif était de proposer un modèle microscopique qui, dans un certain régime de paramètres, peut se décrire par un modèle de dimères

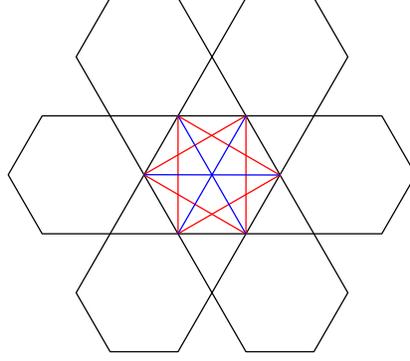


FIGURE IV.4 – Structure du réseau Kagomé. Dans le modèle BFG (IV.5) toutes les interactions sur un hexagone sont prises en compte. Nous indiquons sur l’hexagone central les quinze liens correspondant : six entre premiers voisins (noir), six entre deuxièmes voisins (rouge) et trois pour les troisièmes voisins (bleu).

connu pour posséder une phase de liquide de spin topologique \mathbb{Z}_2 . Pour cela, ils ont considéré un modèle XXZ antiferromagnétique de spin-1/2 sur le réseau Kagomé, avec des interactions entre premiers, deuxièmes et troisièmes voisins sur les plaquettes hexagonales (voir Figure IV.4). Le Hamiltonien s’écrit

$$\begin{aligned}
 H &= H_0 + H_{xy}, \\
 H_0 &= \sum_{\hexagon} \left[J_z \sum_{\langle i,j \rangle \in \hexagon} S_i^z S_j^z - h \sum_{i \in \hexagon} S_i^z \right], \\
 H_{xy} &= \sum_{\hexagon} J_{xy} \sum_{\langle i,j \rangle \in \hexagon} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+),
 \end{aligned} \tag{IV.5}$$

où \vec{S}_i est l’opérateur de spin-1/2. Nous avons donc pris tous les liens $\langle i, j \rangle$ dans un hexagone avec des interactions égales, et sommions ensuite sur toutes les plaquettes. Nous avons séparé les termes diagonaux et hors-diagonaux dans les deux termes H_0 et H_{xy} .

Dans le cas où $J_z = 2J_{xy} = J$ et $h = 0$, puisque chaque spin d’un hexagone est couplé à tous les autres, le modèle peut se réécrire, à une constante près

$$H = \frac{1}{2} J \sum_{\hexagon} \vec{S}_{\hexagon}^2, \tag{IV.6}$$

où nous avons introduit le spin total d’un hexagone $\vec{S}_{\hexagon} = \sum_{i \in \hexagon} \vec{S}_i$. Il est clair que déjà classiquement ce modèle est très compliqué à résoudre puisque toute configuration pour laquelle $\vec{S}_{\hexagon} = \vec{0}$ sur chaque hexagone minimise l’énergie. En rapport avec le chapitre précédent, cette dégénérescence massive pourrait donner lieu au phénomène d’ordre par le désordre. Quantiquement le problème $S = 1/2$ est également compliqué. L’idée est alors d’introduire une anisotropie dans les interactions de façon à ce que le terme diagonal J_z domine devant les termes de saut J_{xy} . Dans la limite (classique) Ising $J_z \gg J_{xy}$, nous pouvons examiner dans un premier temps le seul terme diagonal H_0 puis traiter le terme H_{xy} en perturbation. Cela permet de faire émerger la physique des modèles de dimères quantiques.

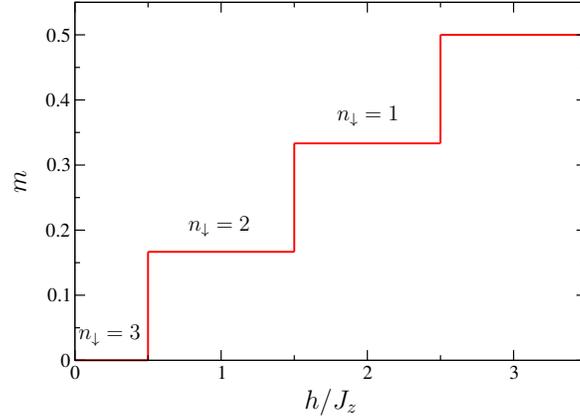


FIGURE IV.5 – Courbe d’aimantation pour un seul hexagone, qui montre des plateaux d’aimantation à $m = 0, 1/6, 2/6$, en plus du plateau de saturation $m = 1/2$. Les plateaux ont une largeur J_z , et pour chacun nous indiquons le nombre de spins *down*, qui correspond au nombre de dimères par site dans le réseau triangulaire associé (voir texte).

2.1 Des spins aux dimères : modèle effectif

2.1.1 Limite Ising et *mapping* vers les dimères

Puisque la partie diagonale dans (IV.5) peut s’écrire

$$H_0 = \frac{1}{2} J_z \sum_{\hexagon} (S_{\hexagon}^z)^2 - h \sum_{\hexagon} \sum_{i \in \hexagon} S_i^z - \frac{3}{4} N_{\hexagon} J_z, \quad (\text{IV.7})$$

où N_{\hexagon} est le nombre d’hexagones du réseau, pour un seul hexagone tout état tel que $S_{\hexagon}^z = 0, 1, 2, 3$ (selon h) minimise l’énergie. La forme de ce modèle est en fait choisie de sorte que tout état satisfaisant cette contrainte locale sur chaque hexagone soit un état fondamental. Pour le réseau entier cela conduit à une dégénérescence qui croît exponentiellement avec la taille [251], et qui sera levée par l’ajout du terme H_{xy} . Les états violant cette contrainte locale sont plus hauts en énergie, avec un gap J_z vers les premiers états où deux hexagones ne la satisfont pas (un site appartient à deux hexagones).

Regardons plus précisément ce qu’il se passe sur un seul hexagone en fonction de h . Les niveaux d’énergie de la plaquette, indexés par leur S_{\hexagon}^z , sont donnés par

$$E_0 = -\frac{3}{4} J_z, \quad E_1 = -\frac{1}{4} J_z - h, \quad E_2 = \frac{5}{4} J_z - 2h, \quad E_3 = \frac{15}{4} J_z - 3h. \quad (\text{IV.8})$$

En champ nul, l’état fondamental a $S_{\hexagon}^z = 0$ et la contrainte est donc d’avoir trois spins *up* et trois spins *down*. Lorsque le champ augmente, l’état $S_{\hexagon}^z = 1$ avec deux spins *down* devient plus bas en énergie au champ critique $h_{c1} = \frac{1}{2} J_z$. Il y a ensuite un nouveau croisement de niveau vers l’état $S_{\hexagon}^z = 2$ avec un seul spin *down* au champ $h_{c2} = \frac{3}{2} J_z$, et enfin le champ de saturation vers l’état complètement polarisé $S_{\hexagon}^z = 3$ vaut $h_{sat} = \frac{5}{2} J_z$. La courbe d’aimantation pour un hexagone, représentée sur la Figure IV.5, présente donc des plateaux pour les aimantations $m = 0, 1/6, 2/6, 3/6$, ou bien $m = (3 - n_\downarrow)/6$ avec n_\downarrow le nombre de spins *down* sur l’hexagone. Déjà pour un seul hexagone, les dégénérescences sur chaque plateau sont élevées et valent respectivement 30, 15 et 6. Tous ces plateaux ont une largeur J_z , et pour le réseau de taille infinie, nous nous attendons donc à les observer dans le régime Ising $J_z \gg J_{xy}$.

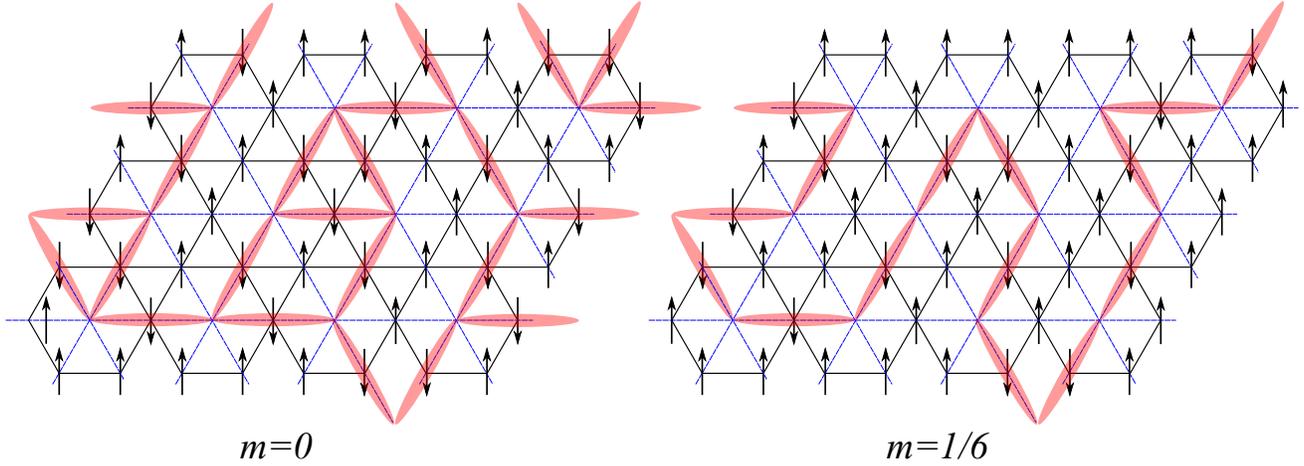


FIGURE IV.6 – Illustration du *mapping* vers le langage de dimères du modèle BFG (IV.5) pour $J_{xy} = 0$. En noir nous avons dessiné le réseau Kagomé, en pointillés bleus le réseau triangulaire formé en joignant les centres des hexagones, et sur les liens duquel vivent les dimères, en rouge. À gauche, le cas $m = 0$ avec trois dimères par site, et à droite le plateau intermédiaire $m = 1/6$ avec deux dimères par site.

En fait, une façon commode de visualiser la contrainte et construire les nombreux états fondamentaux dégénérés est d’effectuer un *mapping*, exact dans cette limite Ising, vers un modèle de dimères de la manière suivante. Le réseau formé par les centres des hexagones est le réseau triangulaire, et chaque site du réseau Kagomé est sur un lien du réseau triangulaire. Pour chaque spin *down*, nous mettons un dimère sur le lien correspondant, tandis que pour un spin *up* les liens sont vides. La contrainte locale se reformule alors dans le langage des dimères sur le réseau triangulaire en une contrainte telle que, pour le plateau d’aimantation $m = (3 - n_{\downarrow})/6$, chaque site doit avoir n_{\downarrow} dimères (pour le réseau Kagomé, n_{\downarrow} dimères doivent émaner du centre de chaque hexagone). Nous représentons ce *mapping* sur la Figure IV.6 pour les plateaux $m = 0$ et $1/6$ (respectivement trois et deux dimères). Nous allons voir que, lorsque la dynamique est ajoutée, cela permet de se ramener à des modèles de dimères quantiques bien connus (bien qu’habituellement une contrainte *hardcore* d’un unique dimère par site est utilisée) [217, 233].

2.1.2 Ajout de la dynamique : modèle effectif

Nous allons maintenant examiner l’effet du terme J_{xy} en le traitant en perturbation. Pour commencer, il est évident que les contributions de premier ordre sont nulles. En effet, nous avons vu que le sous-espace de basse énergie est donné par la contrainte locale des $S_{\square}^z = p$. Or, le terme de saut appliqué une fois a pour conséquence d’échanger deux spins *up* et *down* chacun sur un hexagone différent. L’état résultant n’est donc plus un état de basse énergie puisque deux hexagones sont maintenant excités avec chacun un $S_{\square}^z = p \pm 1$, et le recouvrement avec les autres états fondamentaux est donc nul. Ce mouvement est représenté sur la première étape de la Figure IV.7 pour $m = 0$. Avec un ou deux dimères la situation est exactement la même.

Les processus du deuxième ordre vont générer des contributions non nulles, et nous pouvons en distinguer deux types. Le premier est un processus diagonal ne faisant que décaler l’énergie totale. Il consiste à échanger une paire de spins antiparallèles sur une plaquette « sablier », ce qui excite deux hexagones adjacents. L’énergie de cet état virtuel est plus haute de J_z . Les deux spins sont ensuite à

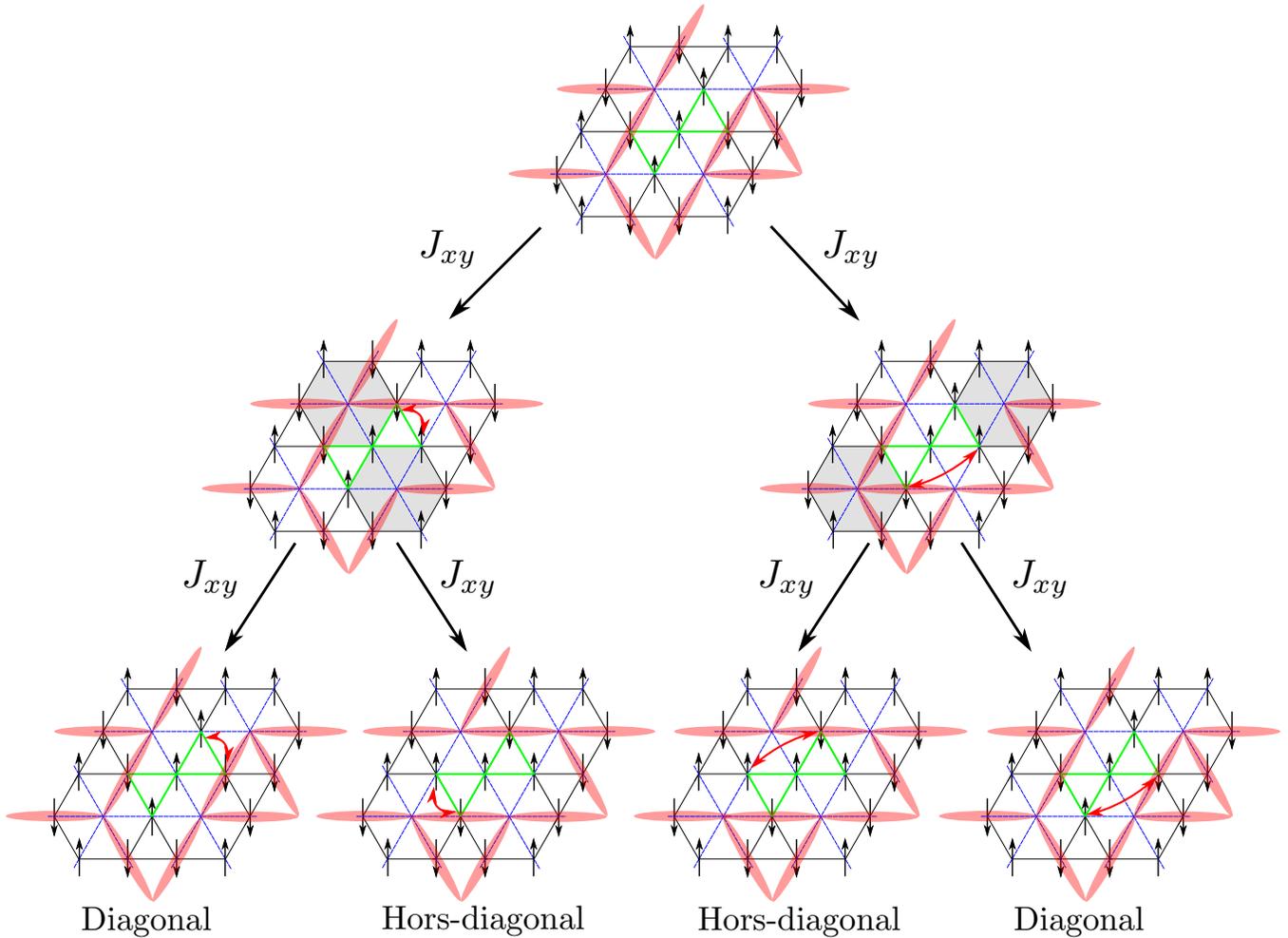


FIGURE IV.7 – Processus en perturbation aux premier et deuxième ordres en J_{xy} pour le modèle BFG (IV.5) illustrés pour le cas $m = 0$ (figure du haut). L'application d'un seul *spin flip* (flèche rouge) sur deux spins premiers ou deuxièmes voisins d'une plaquette « sablier » (en vert), avec deux spins *up* et deux spins *down* à ses extrémités, excite deux hexagones adjacents, qui ne respectent plus la contrainte locale (en gris, figures du milieu). Les contributions de premier ordre sont donc nulles. Au deuxième, ordre, deux processus sont possibles (figures du bas). Soit les spins de la même paire sont à nouveau échangés pour redonner la configuration initiale, et cela donne donc un terme diagonal, soit les deux autres spins de la plaquette sablier sont à leur tour échangés et cela mène à une nouvelle configuration respectant la contrainte locale et distincte de celle de départ. Pour les dimères, le processus hors-diagonal correspond à l'échange de deux dimères situés sur des liens parallèles du réseau triangulaire (tirets bleus).

nouveau échangés pour redonner le même état de départ. Ce sont les deux processus diagonaux de la Figure IV.7, illustrés pour les premiers et deuxièmes voisins. Pour un plateau d'aimantation m donnée, cela correspond à abaisser l'énergie totale d'une quantité $\Delta E_{\text{diag}}^{(2)} = -(9 - 36m^2)N_{\square}J_{xy}^2/J_z$ et nous les négligerons par la suite vu qu'ils n'ont aucun effet sur la levée de dégénérescence. Le second type de processus va mener à l'apparition de termes hors diagonaux, et nécessite d'avoir deux paires de spins antiparallèles sur une plaquette de type « sablier » représentées en vert sur la Figure IV.7. Les deux spins d'une première paire sont échangés dans un premier temps, créant de nouveaux deux hexagones excités, puis les deux spins de l'autre paire sont à leur tour échangés, ce qui conduit à un état différent de celui de départ et qui respecte bien la contrainte locale. Il y a au total quatre façons d'obtenir le même état final, puisque le processus est possible avec soit un lien entre plus proches voisins, ou soit entre seconds voisins, et que nous aurions pu inverser l'ordre d'échange des paires de spins. En conséquence, le Hamiltonien effectif au deuxième ordre, purement hors-diagonal, est donné par

$$H_{\text{eff}}^{(2)} = -J_{\text{ring}} \sum (S_1^+ S_2^- S_3^+ S_4^- + \text{h.c.}), \quad (\text{IV.9})$$

où la somme se fait sur toutes les plaquettes avec deux spins *up* et deux spins *down*, et nous avons numéroté 1,2,3,4 les quatre spins aux extrémités de la plaquette sablier, en vert sur la Figure IV.7. Le terme de saut est donné par $J_{\text{ring}} = 4J_{xy}^2/J_z > 0$.

Il est intéressant de remarquer que $-J_{\text{ring}}$ est négatif, et donc le modèle effectif n'est pas frustré. De plus, il devient également pertinent d'étudier le modèle originel (IV.5) avec un terme $J_{xy} < 0$ puisque le signe de J_{ring} ne dépend pas de celui de J_{xy} . Même en partant d'un échange J_{xy} ferromagnétique, donc sans problème de signe en Monte-Carlo, la physique du modèle effectif devrait être bien reproduite. Au vu de la dérivation du modèle effectif, nous notons aussi qu'il n'est en fait pas nécessaire de considérer des termes entre tous les sites d'un hexagone dans H_{xy} . Au deuxième ordre en perturbation, les sauts entre troisièmes voisins ne jouent aucun rôle hors-diagonal, et se restreindre à des termes entre premiers voisins ne provoque qu'un changement $J_{\text{ring}} \rightarrow J_{\text{ring}}/2$, ainsi qu'un changement de la constante $\Delta E_{\text{diag}}^{(2)}$.

2.1.3 Modèle de dimères quantiques sur réseau triangulaire

Dans le langage des dimères, le Hamiltonien effectif que nous venons de dériver est simplement le modèle le plus simple de dimères quantiques [233] sur le réseau triangulaire, qui s'écrit dans le cas général

$$H_{\text{eff}}^{(2)} = -t \sum_{\triangleleft} (|\triangleleft\rangle\langle\triangleleft| + |\triangleleft\rangle\langle\triangleleft|) + V \sum_{\triangleleft} (|\triangleleft\rangle\langle\triangleleft| + |\triangleleft\rangle\langle\triangleleft|). \quad (\text{IV.10})$$

Partant du Hamiltonien BFG, le terme potentiel V est nul, et $t = J_{\text{ring}}$. Nous voyons en effet d'après la Figure IV.7 que l'échange des deux paires de spins revient à faire sauter deux dimères parallèles sur deux autres liens parallèles. Le modèle effectif est donc le même pour chacun des trois plateaux d'aimantation, la seule différence provenant de la contrainte sur le nombre de dimères par site.

Une caractéristique importante du réseau triangulaire est l'existence de secteurs topologiques pour le modèle (IV.10) [217]. En effet, plaçons le système sur un tore, et traçons dans la direction x une ligne qui coupe les liens du réseau triangulaire, en vert sur la Figure IV.8. Le nombre de dimères touchés par cette ligne définit une parité $p_x = 0, 1$. Il est alors évident que le terme de saut du Hamiltonien (IV.10) conserve cette parité, puisqu'il fait varier le nombre de dimère de deux. Nous pouvons de la même façon définir la parité $p_y = 0, 1$ par une ligne verticale. Ces deux parités définissent alors quatre secteurs topologiques (p_x, p_y) complètement déconnectés : une configuration de dimères donnée appartient à un secteur topologique, et l'application du Hamiltonien sur la fonction d'onde donnera

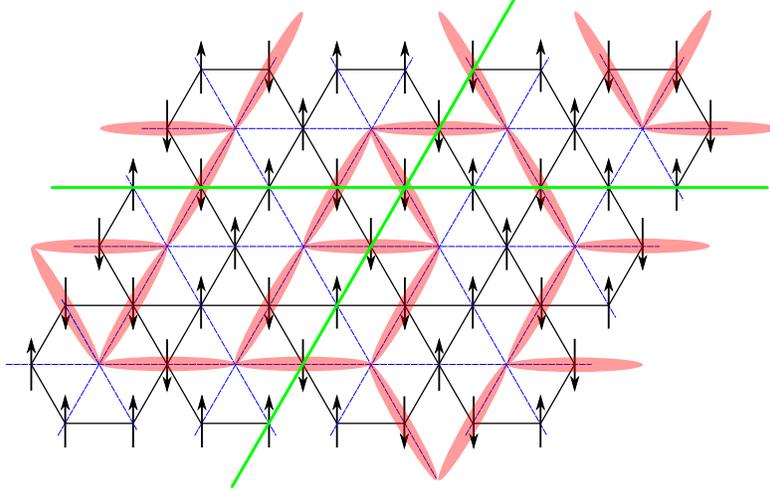


FIGURE IV.8 – Définition des secteurs topologiques pour le modèle de dimères quantiques sur le réseau triangulaire illustrée dans le cas $m = 0$. En traçant une ligne horizontale (en vert), le nombre de dimères croisés définit une parité p_x , et de même p_y dans la direction verticale. Tout pavage de dimères appartient alors à un des quatre secteurs topologiques (p_x, p_y) . Ces secteurs sont déconnectés les uns des autres sous l’action du Hamiltonien (IV.10), qui ne peut changer le nombre de dimères croisés que de deux.

une autre configuration toujours dans ce même secteur. Bien sûr, dans le modèle BFG ces secteurs, définis en comptant le nombre de spins *down* sur des lignes, n’existent strictement parlant que pour $J_{xy} = 0$. Dès qu’un terme hors-diagonal non nul est ajouté, la contrainte $S_{\square}^z = p$ n’est plus exacte car il y aura une densité finie d’hexagones avec des défauts, et le modèle (IV.5) ne conserve donc pas la parité.

L’intérêt d’arriver à ce type de Hamiltonien est que, indépendamment de la question du nombre de dimères par site, les modèles de dimères quantiques contiennent une physique de liquide \mathbb{Z}_2 sur les réseaux non bipartites. De plus, au point $t = V$, appelé point ROKHSAR-KIVELSON (RK), la fonction d’onde est exactement connue. Elle est donnée par la combinaison à poids égal de tous les pavages possibles [233]

$$|\Psi_{RK}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_p}} \sum_c |c\rangle, \quad (\text{IV.11})$$

où $|c\rangle$ dénote une certaine configuration de dimères et N_p est le nombre total de pavages. Pour le réseau triangulaire, MOESSNER et SONDDHI ont étudié le cas des dimères *hardcore* et ont montré la présence d’un liquide de spin topologique \mathbb{Z}_2 au point RK [217]. Le liquide de spin étant gappé, il s’étend dans un régime fini en fonction de t/V . Nous reviendrons plus tard sur le diagramme de phases dans ce cas, mais nous allons maintenant résumer les résultats obtenus précédemment en champ nul suite à l’introduction du modèle BFG (IV.5).

2.2 Modèle en champ nul, liquide de spin \mathbb{Z}_2 et entropie topologique

BFG ont employé la même stratégie que MOESSNER et SONDDHI pour le modèle à trois dimères. En modifiant le modèle effectif de façon à se placer au point RK, ils ont également trouvé une phase topologique \mathbb{Z}_2 de liquide de spin gappé, en utilisant à la fois des arguments de dualité vers une théorie

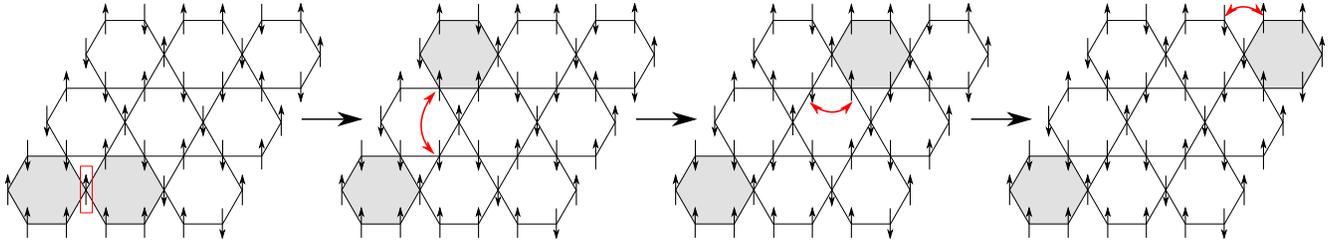


FIGURE IV.9 – Illustration des excitations de spinons dans le modèle (IV.5) en champ nul. En partant d'un état fondamental (pour $J_{xy} = 0$) où tous les hexagones satisfont la contrainte locale d'aimantation nulle, l'application d'un opérateur S_i^+ sur un site (rectangle rouge) crée deux hexagones excités (en gris). L'application successive des termes de saut permet de les séparer spatialement. Dans la phase déconfinée, ces deux spinons peuvent se propager librement comme des (quasi-)particules indépendantes. Puisque l'excitation initiale avait un $\Delta S^z = 1$, chacun porte bien une charge fractionnaire $S^z = 1/2$.

de jauge \mathbb{Z}_2 et des résultats de Monte-Carlo classique, possible au point RK grâce à la forme connue de l'état fondamental. Ils ont montré que les excitations de visons sont gappées, avec un gap d'ordre J_{ring} , ce qui implique que les spinons sont bien déconfinés. Le gap des spinons est lui d'ordre J_z , ce qui se comprend bien à partir de la Figure IV.9 où nous représentons ces excitations. Bien sûr, si le fait que la phase fractionnaire est gappée assure qu'elle s'étend hors du point RK, cela ne garantit en aucun cas qu'elle est toujours présente au point $V = 0$, correspondant au modèle de départ (IV.5). Nous verrons ainsi plus tard que ce n'est pas le cas avec le modèle à deux dimères. Cependant, il se trouve qu'elle survit jusqu'à des valeurs de V/t négative, et le modèle BFG est bien dans la phase topologique.

Tout d'abord, des diagonalisations exactes du Hamiltonien effectif modifié ont montré la présence d'un gap pour les visons dans un large régime de paramètre incluant le modèle BFG, ainsi que des corrélations de spins et de visons exponentielles [252]. Ces différents résultats pointent vers une phase fractionnaire, mais les petites tailles de système ne permettaient pas de conclure définitivement.

La confirmation est ensuite venue grâce à des simulations de Monte-Carlo quantique. Tout d'abord, en 2006, ISAKOV *et al.* ont proposé un diagramme de phases numérique pour $h = 0$ à température nulle [253]. Pour $J_{xy}/J_z > 0,0252$, le calcul de la densité superfluide montre que le système est dans une phase superfluide où la symétrie $U(1)$ du modèle est brisée. A la valeur critique $(J_{xy}/J_z)_c = 0,0252$, une transition a lieu vers une phase isolante. La transition est continue et d'exposants dynamique $z = 1$ et de longueur de corrélation $\nu = 0,67$, caractéristiques de la classe d'universalité 3D XY (nous verrons plus loin que ce n'est en fait pas le cas). En montrant l'absence d'ordre dans la phase isolante, ils ont conclu que cette phase doit correspondre à la phase fractionnaire. Leur estimation de la longueur de corrélation des visons est en bon accord avec les valeurs trouvées numériquement au point RK et par diagonalisation exacte. Ils ont ensuite étendu leur étude à température finie [244].

Finalement, ISAKOV, HASTINGS et MELKO ont présenté dans deux publications en 2011 et 2012 de nouveaux résultats Monte-Carlo, confirmant la nature topologique de la phase isolante [254, 255]. Ils ont cette fois considéré le modèle (IV.5) avec le terme de saut restreint aux plus proches voisins. La valeur critique de la transition entre la phase isolante et la phase superfluide est changée à $(J_{xy}/J_z)_c = 0,0707$. En utilisant les récentes avancées sur le calcul des entropies de Renyi en Monte-Carlo (voir l'Annexe D) ainsi que les constructions de LW et KP [166, 167], ils ont calculé l'entropie topologique γ (voir (IV.4)) pour le modèle BFG et ont montré qu'elle prenait une valeur proche de $\ln(2)$ dans la phase isolante (voir Figure IV.10), la valeur attendue pour le liquide \mathbb{Z}_2 [254]. Dans la seconde publication,

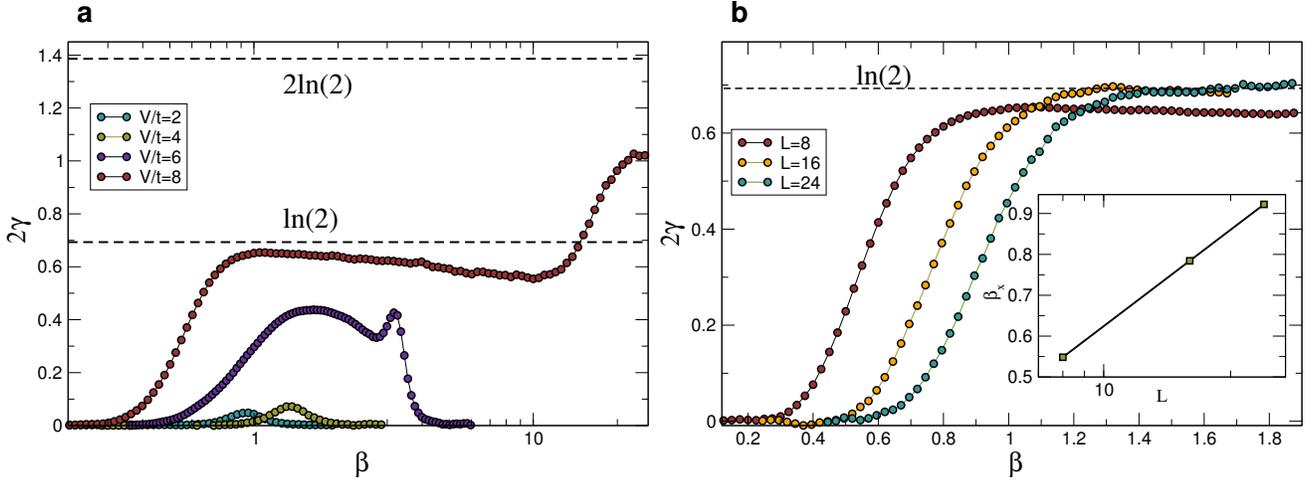


FIGURE IV.10 – Mesure de l’entropie d’intrication topologique 2γ par Monte Carlo quantique. A gauche (a), la valeur calculée pour un système de taille $L = 8$ en fonction de la température inverse $\beta = t/T$, pour plusieurs valeurs de $V/t = (J_{xy}/J_z = t/(2V))$ dans notre notation). Pour une phase topologique \mathbb{Z}_2 , deux plateaux à $\ln(2)$ et $2\ln(2)$ sont attendus. La différence observée pour $V/t = 8$ (dans la phase isolante) s’explique par des effets de taille finie mais n’empêche pas l’identification claire de la phase topologique. Dans la phase superfluide $V/t \leq 6$, l’entropie topologique devient progressivement nulle. A droite (b), illustration des effets de taille finie pour le plateau à $\ln(2)$. Pour $L = 16, 24$, la valeur trouvée est correctement quantifiée. Figure tirée de la référence [254].

ils ont étudié précisément la nature de la transition superfluide-liquide de spin \mathbb{Z}_2 [255]. En effet, le fait que les excitations dans la phase topologique portent une charge fractionnaire joue un rôle important. Les opérateurs de création et d’annihilation des spinons (notons les ϕ et ϕ^\dagger) peuvent en effet être vus comme les racines carrées des opérateurs de spins S^\pm . Lors de la transition vers la phase superfluide, ce ne sont pas ces derniers qui subissent la transition XY mais bien les opérateurs fractionnaires, et cela modifie les exposants critiques définis à partir des S^\pm . Il a été montré que cela n’affecte pas l’exposant ν , d’où la valeur 0,67 que nous avons mentionnée précédemment. Par contre, l’exposant η gouvernant le comportement de la fonction de corrélation $G(r_{ij}) = \langle S_i^+ S_j^- \rangle$, qui doit décroître comme $1/r_{ij}^{1+\eta}$ à grande distance, est fortement modifié [256], d’où une nouvelle classe d’universalité nommée 3D XY*. Sur la Figure IV.11, la fonction de corrélation est mesurée pour $r_{ij} = L/6$ afin de minimiser les effets de taille finie, et donne un exposant $\eta = 1,493$, à comparer avec $\eta = 0,038$ de la transition 3D XY, en bon accord avec ce qui est attendu pour un opérateur *composite* dans une transition XY [256].

2.3 Modèle avec champ et plateaux d’aimantation

Après avoir résumé les résultats en champ nul, revenons sur la courbe d’aimantation pour un seul hexagone de la Figure IV.5, ainsi que sur celle obtenue par Monte-Carlo quantique sur un système de taille $L = 6$ présentée sur la Figure IV.12 (pour les détails, voir la Section 3 suivante). A partir des aimantations des plateaux, nous pouvons déjà obtenir des informations sur quelles types de phases vont être possibles. En utilisant la généralisation à deux dimensions du théorème LSM [41], nous pouvons déjà dire quelles phases *peuvent* être trouvées sur chacun de ces plateaux. Bien que cela ait déjà été fait dans le Chapitre I, nous rappelons ici le principe. Nous calculons pour chaque plateau la

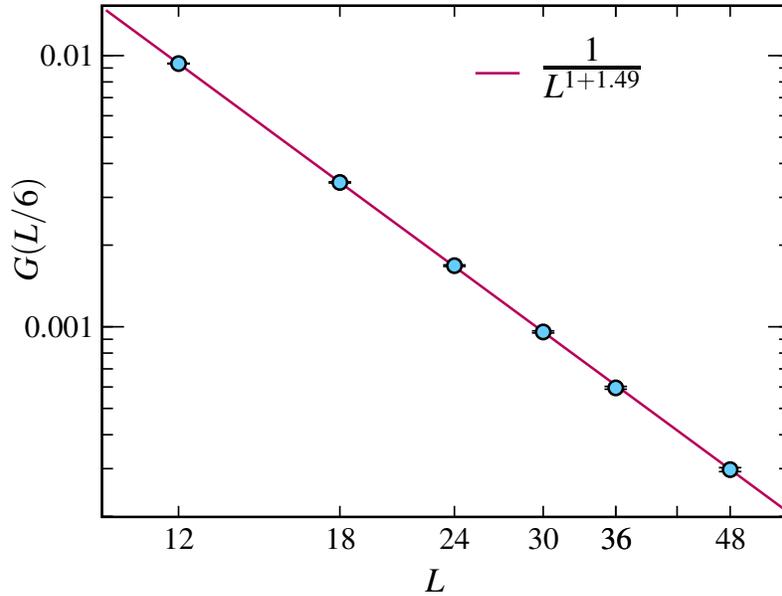


FIGURE IV.11 – Calcul Monte-Carlo quantique de l'exposant η de la fonction de corrélation $G(r_{ij}) = \langle S_i^+ S_j^- \rangle \sim 1/r_{ij}^{1+\eta}$. Pour minimiser les effets de taille finie, la distance est fixée telle que $r_{ij} = L/6$, et donne $\eta = 1,493$. Figure tirée de la référence [255].

quantité $N(S - m)$, où $N = 3$ puisque le réseau Kagomé a trois sites par cellule unité (un triangle pointant vers le haut). Pour le plateau $m = 1/6$ ($n_\downarrow = 2$), cela donne 1 et le théorème ne nous donne aucune indication. Pour le plateau $m = 1/3$ ($n_\downarrow = 1$), nous trouvons $1/2$, et l'état sera donc forcément ordonné, c'est-à-dire soit un solide, soit un état topologique. Nous allons maintenant présenter des résultats obtenus pour le plateau $m = 1/6$, pour lequel nous avons trouvé qu'il est (malheureusement) dans une phase conventionnelle avec formation d'un ordre cristallin.

3 Plateau $m = 1/6$: modèle de boucles

Cette section est consacrée à l'étude du plateau $m = 1/6$. Dans le langage des dimères, cela correspond à avoir deux dimères par site, et le modèle de dimères correspondant est donc un modèle de *boucles* puisque tout dimère doit alors obligatoirement appartenir à un chemin fermé de dimères, *i.e.* une boucle. Tous les résultats dans cette section ont été obtenus pour le modèle BFG en se restreignant à des termes hors-diagonaux J_{xy} entre premiers voisins uniquement. Comme nous l'avons déjà dit, cela n'a pas d'influence sur la physique et ce choix est guidé uniquement par des raisons pratiques, nous avons trouvé numériquement plus aisé de prendre ce cas-là plutôt que celui avec tous les couplages, ou avec premiers et seconds voisins. Les simulations ont été faites pour des systèmes de taille $L \times L$ triangles pointant vers le haut (voir géométrie du réseau Kagomé sur la Figure IV.3), c'est-à-dire $N = 3L^2$ sites.

Revenons sur la Figure IV.12 où nous montrons une courbe d'aimantation pour $L = 6$. Nous voyons bien les deux plateaux à aimantations finies $m = 1/6, 1/3$ ainsi que le gap de spin pour J_{xy}/J_z suffisamment petit. A partir des tailles des plateaux pour $L = 6, 12, 18$, nous avons estimé grossièrement les couplages J_{xy}/J_z critiques auxquels les plateaux disparaissent. Nous retrouvons bien la valeur

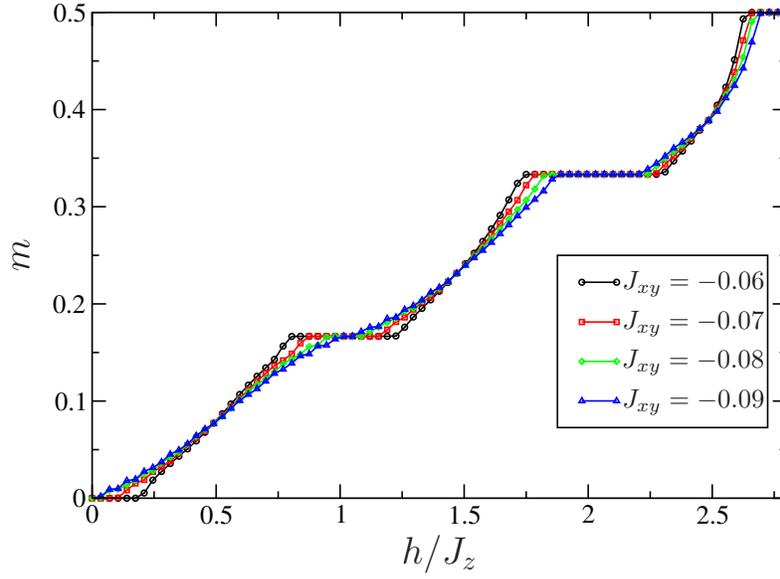


FIGURE IV.12 – Courbes d’aimantation obtenues pour le modèle (IV.5) pour une taille $L = 6$ et plusieurs valeurs de J_{xy} , où les termes hors-diagonaux ne sont pris qu’entre plus proches voisins.

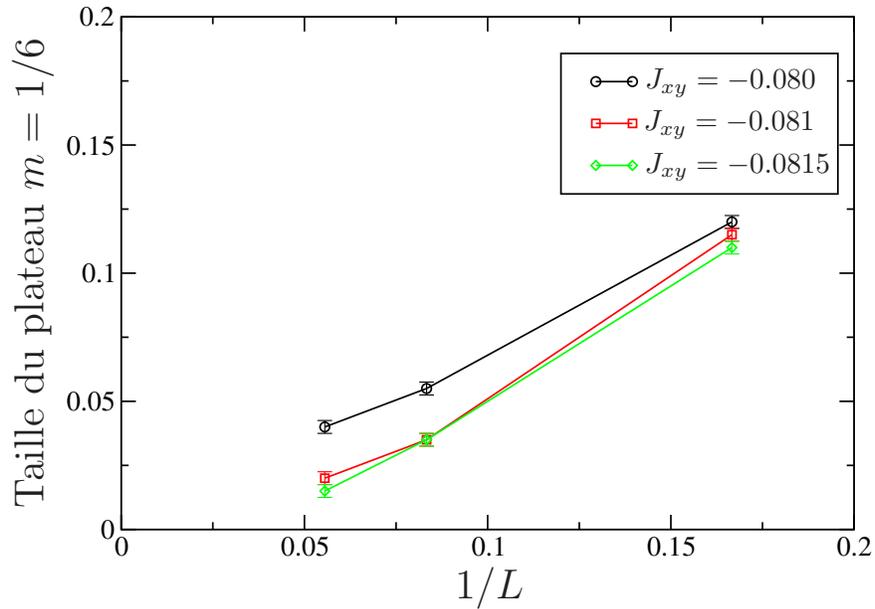


FIGURE IV.13 – Evolution de la taille du plateau $m = 1/6$ en fonction de $1/L$ pour plusieurs valeurs de J_{xy}/J_z . Cela nous permet de voir que le plateau reste fini pour $J_{xy}/J_z = -0,08$ et disparaît pour $(J_{xy}/J_z)_c \simeq -0,081$. Les barres d’erreurs ont été estimées à partir de la discrétisation de la grille de h .

$(J_{xy}/J_z)_c \simeq -0,071$ du plateau $m = 0$, pour le plateau $m = 1/6$ cela donne $(J_{xy}/J_z)_c \simeq -0,081$ (voir la Figure IV.13) et pour le dernier plateau $m = 1/3$ $(J_{xy}/J_z)_c \simeq -0,11$. La valeur pour $m = 1/6$, bien qu'imprécise vu la méthode, nous resservira par la suite car nous verrons qu'il n'est pas évident de localiser précisément la transition. Dans la suite, toutes les simulations ont été faites pour un champ magnétique $h/J_z = 1,03$, ce qui correspond au milieu du plateau.

3.1 Phase solide

Nous présentons maintenant les résultats permettant d'identifier la présence de la phase solide. Pour cela, nous représentons sur la Figure IV.14 les corrélations spin-spin connexes $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ calculées pour $L = 8$. Il y apparaît clairement un ordre diagonal, avec les spins *down* qui se mettent tous sur le même sous-réseau, et nous parlerons d'un cristal *striped*. Dans l'image des dimères, cela correspond à des boucles de dimères qui font toutes le tour du système dans la même direction (Figure IV.15).

L'ordre solide est encodé dans le facteur de structure $S(\vec{q})$, où

$$S(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_{j,k} (\langle S_j^z S_k^z \rangle - \langle S_j^z \rangle \langle S_k^z \rangle) e^{i\vec{q}(\vec{r}_j - \vec{r}_k)}, \quad (\text{IV.12})$$

où \vec{r}_j est la position du spin j , $\vec{q} = (q_x, q_y)$ le vecteur d'onde et l'aimantation locale est bien sûr $\langle S_j^z \rangle = 1/6$ sur le plateau. Rappelons que dans une phase ordonnée, *i.e.* avec un ordre à longue portée à un certain vecteur d'onde \vec{Q} , $S(\vec{Q})$ doit diverger comme N , et donc le paramètre d'ordre est $S(\vec{Q})/N$ qui va tendre vers une constante. Pour ce solide, qui est trois fois dégénéré puisqu'il y a trois directions pour la formation des *stripes*, les vecteurs d'onde correspondants sont $\vec{Q}_1 = (0, 4\pi/\sqrt{3})$, $\vec{Q}_2 = (2\pi, 2\pi/\sqrt{3})$ et $\vec{Q}_3 = (2\pi, -2\pi/\sqrt{3})$. De plus, la forme de ce cristal ne restreint pas les tailles nécessaires pour les simulations puisqu'il peut se développer quel que soit L . Nous traçons sur la Figure IV.16 l'évolution de $S(\vec{Q})/N$ avec L pour plusieurs valeurs de J_{xy} à l'intérieur de la phase plateau. Même pour des petites tailles avec au maximum $L = 9$, nous pouvons voir que le paramètre d'ordre reste bien fini dans la limite thermodynamique. Le fait que nous puissions observer la saturation de $S(\vec{Q})/N$ pour ces tailles nous dit que la longueur de corrélation du solide est assez faible, et devrait être de l'ordre de quelques sites seulement. A l'opposé, il existe des situations où la saturation n'est pas observée même pour de grandes tailles, par exemple pour la phase VBC dite $\sqrt{12} \times \sqrt{12}$ dans le modèle de dimères *hardcore* (voir la Section 4).

Deux commentaires d'ordre pratique sont à faire. Premièrement, la valeur $S(\vec{Q})$ utilisée ici est la moyenne des valeurs aux trois vecteurs d'ondes \vec{Q}_α . Cela est naturel quand la simulation est ergodique, et c'est le cas pour les tailles considérées ici, nous avons bien vérifié que les trois valeurs sont égales dans les barres d'erreur. En fait, des simulations sur des modèles de même type avec une forte anisotropie J_z ont montré que ce n'est justement pas toujours le cas, voir par exemple la référence [257] où le même type de solide *striped* est obtenu pour un modèle sur le réseau triangulaire. Dans ce cas, il faut prendre la plus grande valeur de $S(\vec{Q}_\alpha)$, déterminée à partir des *times series* des simulations, pour construire le paramètre d'ordre [257]. Pour des valeurs plus petites de J_{xy}/J_z que celles utilisées ici, nous avons constaté une rapide dégradation de l'efficacité des simulations, malgré l'utilisation de l'algorithme de plaquettes (voir l'Annexe D). L'autre point, relié au premier, est le comportement non monotone de $S(\vec{Q})/N$. Là encore, ce comportement a été observé dans la référence [257], et interprété comme le moment où le système simulé devient assez grand pour « voir » le développement des *stripes*. Cela rend l'extrapolation du paramètre d'ordre compliqué dans la pratique.

Ce que nous pouvons néanmoins faire, c'est comparer l'ordre de grandeur trouvé pour $S(\vec{Q})/N$ avec ce que serait la valeur d'une superposition à poids égaux des trois états parfaitement ordonnés

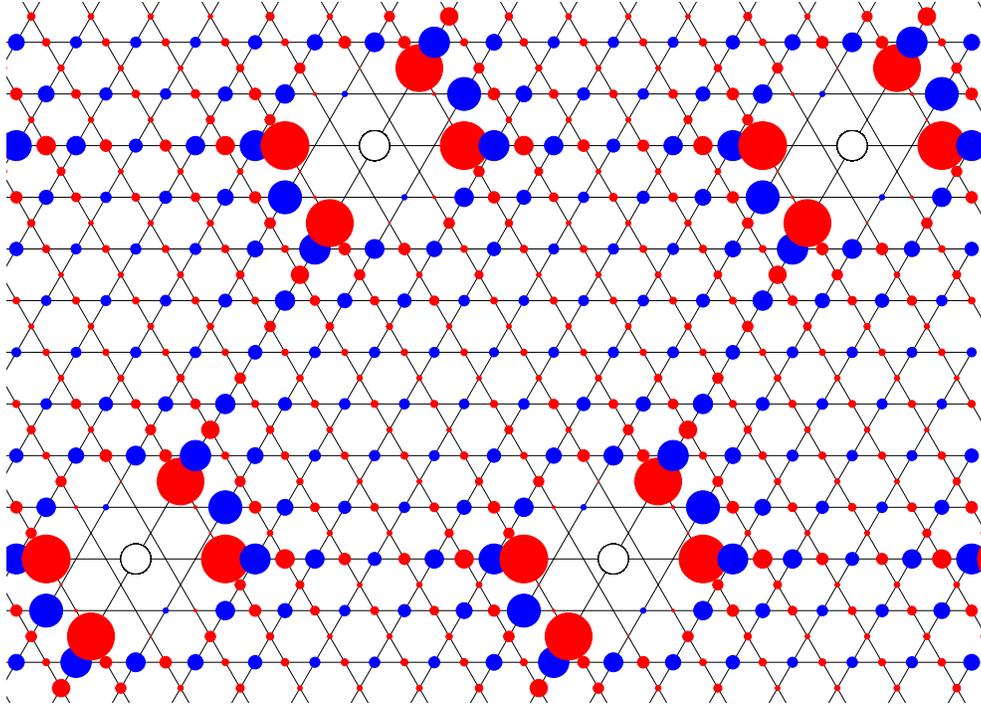


FIGURE IV.14 – Corrélations en espace réel obtenues pour $J_{xy}/J_z = 0,078$ pour un système de taille $L = 8$ à la température $J_{\text{ring}}/8$. Le cercle vide indique le site de référence, autour duquel les corrélations des sites les plus proches ne sont pas montrées par souci de lisibilité. Les disques bleus correspondent aux corrélations parallèles et les rouges aux corrélations antiparallèles. La formation de lignes de dimères (spins en bleu) apparaît clairement. Les corrélations ont été étendues par périodicité.

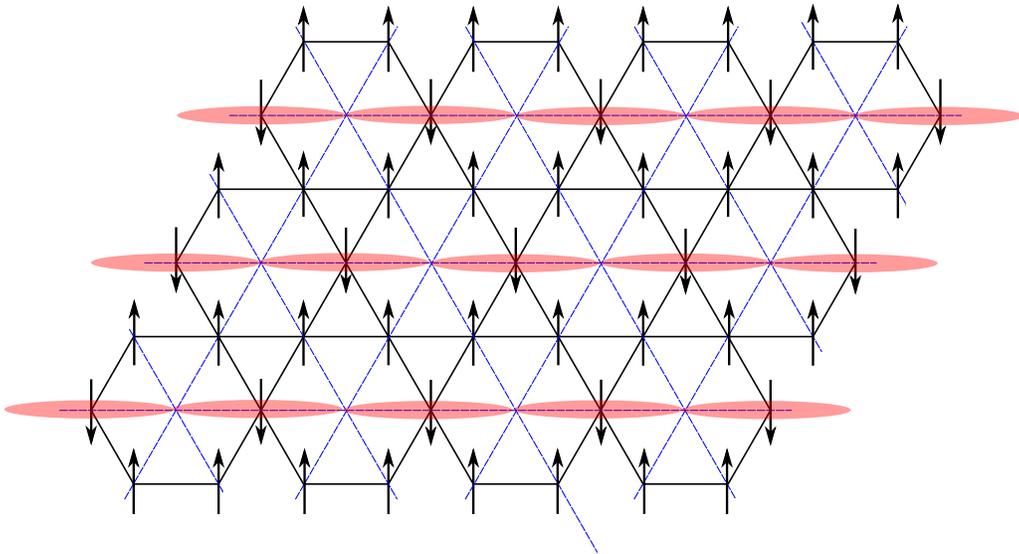


FIGURE IV.15 – Représentation du solide *striped* dans l'image du modèle de dimères, où il correspond à un VBC.

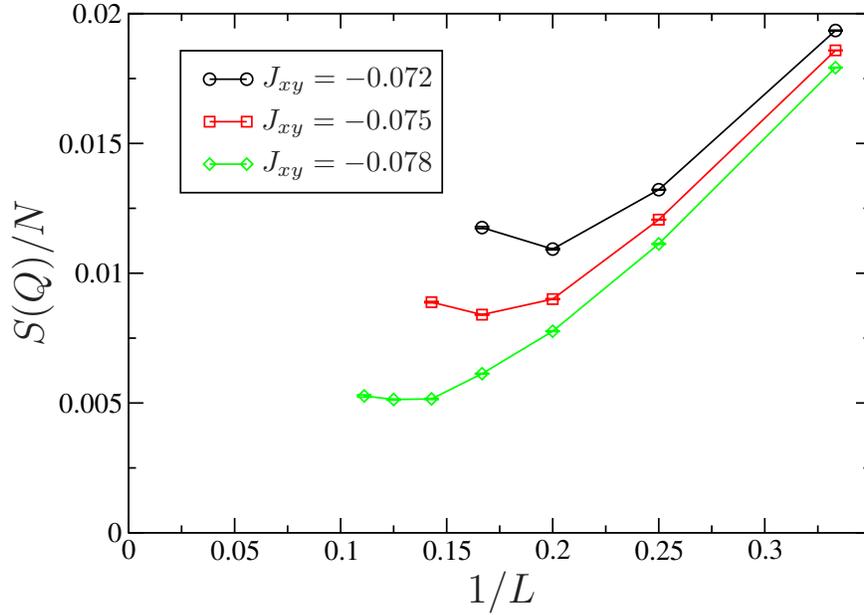


FIGURE IV.16 – Evolution du paramètre d'ordre $S(\vec{Q})/N$ en fonction de la taille L du système. Malgré la restriction à de petites tailles, nous pouvons déjà observer le régime de saturation du paramètre d'ordre, confirmant ainsi la présence d'une phase solide *striped*.

(ce qu'une simulation ergodique doit normalement obtenir, l'écart en énergie des trois états étant normalement exponentiellement petit avec la taille du système). Si nous prenons par exemple le vecteur \vec{Q}_1 , il est facile de calculer que $S(\vec{Q}_1)/N = 8/81 \simeq 0,0987$, qui est donc aussi la valeur dans la superposition. Par rapport aux valeurs tirées de la Figure IV.16 il y a donc une réduction d'un facteur dix environ (à comparer avec les états-produits de *spin imbalance* du Chapitre III où la différence avec le paramètre d'ordre dans l'état idéal était proche de zéro).

3.2 Entropie de Rényi

3.2.1 Comportement pour une brisure de symétrie discrète

Avant de donner les résultats obtenus pour le modèle BFG, la première question à se poser est de savoir quelle est la forme de l'entropie dans une phase qui brise une symétrie discrète. Pour ce problème peu étudié, des résultats sont disponibles uniquement pour l'entropie de von Neumann (du moins à notre connaissance). Dans ce cas, sur le modèle de la relation (IV.3), pour une frontière lisse entre les deux sous-systèmes l'entropie obtient un terme sous-dominant constant [258, 259]

$$S_{vN}(A) = a\ell_A + d + \dots, \quad (\text{IV.13})$$

où $d = \ln g$ est cette fois positif, avec g la dégénérescence de l'état fondamental. Pour l'entropie de Rényi, dans le cadre d'une collaboration avec KEISUKE TOTSUKA, ce dernier a proposé, à partir d'arguments généraux sur la décomposition de Schmidt d'une superposition des g états fondamentaux, qu'elle devrait également obtenir une correction positive

$$S_q(A) = a_q\ell_A + d_q + \dots, \quad (\text{IV.14})$$

où ce terme possède une dépendance en q et vaut

$$d_q = \frac{q}{q-1} \ln g. \quad (\text{IV.15})$$

A ce stade, il est important de bien différencier cette correction pour une brisure de symétrie discrète et celle signalant un ordre topologique. En particulier, la construction de LW [167] proposée pour isoler l'entropie topologique ne permet *pas* de calculer d_q , la différence étant justement issue de la distinction entre intrication à courte portée (une phase solide, brisant des symétries discrètes) et longue portée (une phase topologique). Cela expliquerait pourquoi dans la référence [229], FURUKAWA et MISGUICH n'ont pas pu mettre en évidence la présence de la correction $d = \ln 12$ dans la phase VBC du modèle de dimères quantiques (avec un dimère par site) sur le réseau triangulaire. La formule (IV.14) n'est de plus valide que pour une superposition d'états à poids égaux. En particulier, si la simulation converge vers un seul des états fondamentaux, par exemple si la géométrie choisie ne peut accommoder qu'un seul des états, alors la correction disparaît et il ne reste que la loi des aires.

Finalement, il est utile de donner aussi la forme de l'entropie de Rényi dans une phase brisant une symétrie continue, par exemple la symétrie $U(1)$ de notre modèle. Dans ce cas, et même pour une frontière lisse, il existe une correction logarithmique et l'entropie se comporte comme [260]

$$S_q(A) = a_q \ell_A + b \ln \ell_A + d_q + \dots, \quad (\text{IV.16})$$

où, en l'absence de coins, il a été suggéré que b est relié au nombre de modes de Goldstone issus de la brisure de symétrie (bien que cela ne soit à l'heure actuelle pas confirmé numériquement [260]).

3.2.2 Résultats et discussion

Nous allons maintenant donner des résultats concernant l'entropie de Rényi, en nous limitant au calcul de S_2 . Les détails de l'implémentation du calcul des entropies de Rényi en SSE ainsi que des exemples sur des modèles bien connus sont données dans l'Annexe D. Nous montrons sur la Figure IV.17 l'entropie pour le système total pour un petit système $L = 3$, afin de comparer aux résultats exacts, cela constituant la limite de ce qui est faisable en diagonalisation exacte. Nous voyons que l'accord entre les deux est excellent, sachant que de plus l'entropie a été obtenue sur une seule simulation, ce qui n'est pas optimal du tout vu les valeurs déjà élevées de S_2 . Comme pour le facteur de structure, nous retrouvons le fait que des températures basses sont nécessaires pour être dans l'état fondamental (ici cela donne $\beta \simeq 320$, bien qu'une valeur légèrement plus basse puisse être employée pour $L = 3$), ce qui explique en partie la difficulté d'obtenir des résultats très précis (voir plus bas).

Nous traçons sur la Figure IV.18 l'entropie de Rényi du demi-système en fonction de la taille du système L , obtenue pour une géométrie où le sous-système A est un cylindre (voir l'Annexe D). Les deux courbes correspondent à des valeurs J_{xy}/J_z de 0,078 et 0,085, c'est-à-dire respectivement dans et hors de la phase plateau. S'il faut reconnaître que malheureusement la qualité des données n'est pas complètement satisfaisante, ces résultats vont quand même nous permettre de discuter la pertinence de calculer S_2 . En effet, nous savons d'après le calcul des corrélations spin-spin diagonales et du facteur de structure que le plateau est dans une phase solide dégénérée trois fois, et il n'est donc pas nécessaire de calculer d'autres observables. Nous voyons que dans la phase cristalline à $J_{xy}/J_z = 0,078$, l'entropie présente deux régimes différents. Il apparaît clairement que pour $L \geq 7$, une extrapolation de d_2 donnera bien un terme positif, tandis que pour de plus petites tailles elle sera au contraire négative. Si nous tentons d'extraire la valeur de d_2 par un *fit* de la forme (IV.14), la qualité des données ne permet malheureusement pas de conclure quant à l'accord avec la valeur attendue. Un

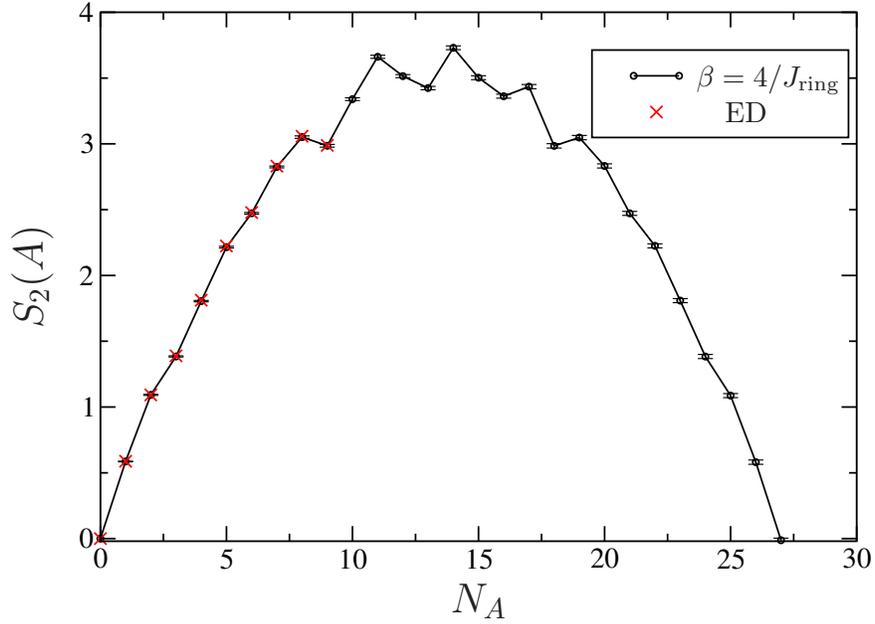


FIGURE IV.17 – Entropie de Rényi S_2 calculée pour J_{xy}/J_z sur un système de taille $L = 3$ à la température $T = J_{\text{ring}}/4$, et comparée aux résultats de diagonalisation exacte. N_A correspond au nombre de sites dans la sous-région A .

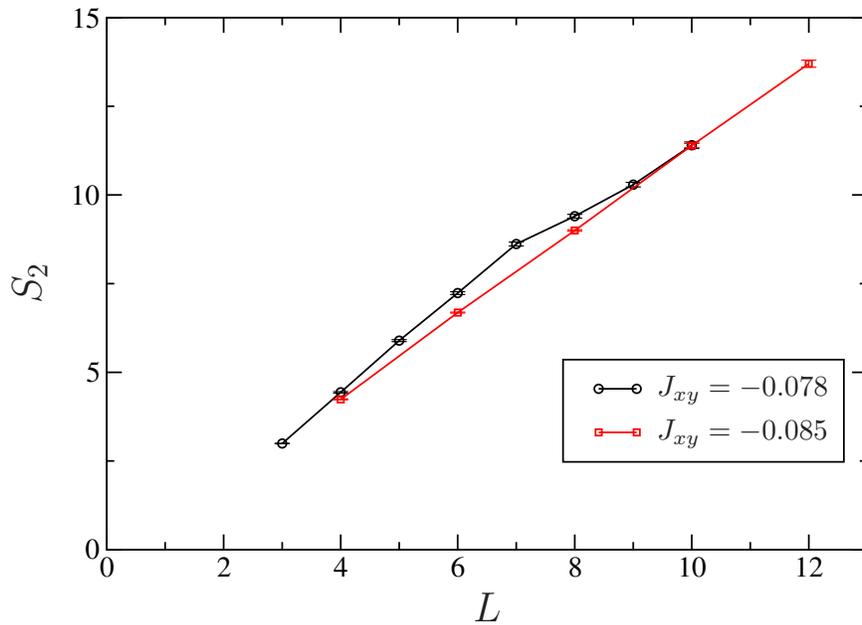


FIGURE IV.18 – Entropies de Rényi S_2 du demi-système en fonction de L , calculées pour deux valeurs de J_{xy}/J_z dans et hors de la phase solide. Dans le premier cas, la présence de deux régimes différents rappelle la sensibilité de l'entropie à la longueur de corrélation, montrant ainsi que l'extrapolation du terme sous-dominant constant peut être délicate (voir texte).

fit des quatre points avec $L \geq 7$ nous donne ainsi $d_2 = 2, 2 \pm 0, 3$ (avec un $\chi^2/\text{NDF} = 2, 9$, où NDF est le nombre de degrés de liberté), ce qui inclut bien la valeur $2\ln 3 \simeq 2, 3$ mais ne peut pas être raisonnablement considéré comme convaincant. Nous pouvons également exclure le dernier point, ce qui conduit toujours à un résultat compatible avec la prédiction (IV.15) mais avec de trop grandes barres d'erreur. De plus, la valeur de J_{xy}/J_z choisie est assez proche du point de transition estimé précédemment. La référence [258] a constaté pour l'entropie de von Neumann d'importants effets de taille finie près d'un point de transition, d'où la difficulté d'obtenir une valeur fiable de la constante d dans cette région. De plus, il est évident que ce modèle compliqué n'est pas le plus adapté pour tester précisément la validité de la relation (IV.14).

Plutôt que de nous concentrer sur la valeur numérique, nous voudrions insister sur les différences de régime. En comparant avec le *scaling* du facteur de structure de la Figure IV.16, nous voyons que le changement de régime a lieu pour la même taille. En accord avec l'extrapolation positive, cela nous dit simplement que le système est assez grand pour voir la formation du solide. La question est ensuite de savoir quel est le régime vu pour les petites tailles. Il pourrait être tentant de penser qu'il peut s'agir d'un faux signal de phase topologique. Cependant, une extrapolation selon la formule (IV.3) ne donne pas de valeur numérique en rapport avec $\ln 2$, qui serait *a priori* ce que nous obtiendrions s'il s'agissait bien d'un faux signal. Nous trouvons en effet dans ce cas $d_2 = -1, 27 \pm 0, 03$ (avec $\chi^2/\text{NDF} = 2, 1$). Logiquement, le système voit en réalité la phase superfluide. Dans la formule (IV.16), la constante d_q ne prend pas de valeur ni de signe particuliers, et dépend évidemment de la définition de ℓ_A . Un *fit* par la formule (IV.16) s'avère plus convaincant puisque $\chi^2/\text{NDF} = 0, 85$. De la même façon et comme attendu, la courbe pour $J_{xy}/J_z = 0, 085$ est bien mieux reproduite par cette forme dans une phase où U(1) est brisée ($\chi^2/\text{NDF} = 1, 95$) que par une simple droite ($\chi^2/\text{NDF} = 5, 05$).

Même si cela peut paraître trivial, cette différence permet de rappeler que l'entropie est sensible aux effets de longueurs de corrélations, et donc par extension à la géométrie du système simulé. Comme nous l'avons mentionné, le calcul du terme topologique γ est actuellement fréquemment utilisé pour caractériser un liquide \mathbb{Z}_2 . Avec les progrès du DMRG 2D, la stratégie employée est de calculer l'entropie pour de longs cylindres de longueur L_x et de diamètre L_y , puis extrapoler en fonction de L_y . Un *fit* de la forme (IV.3) permet ensuite d'accéder à γ (les constructions de LW et KP n'étant pas accessibles en DMRG). Bien que la géométrie utilisée ici soit différente (un tore au lieu d'un cylindre, et $L_x = L_y$ contrairement au DMRG), nous pensons que les deux régimes observés suggèrent qu'il faut être prudent avec cette méthode. En particulier dans un cas comme le modèle de Heisenberg sur le réseau Kagomé, où des VBC de grandes cellules unités sont en compétition avec d'autres états comme le liquide \mathbb{Z}_2 , l'extrapolation peut se révéler délicate dans son interprétation. Cela s'est vu très récemment avec la publication [172], qui a montré les fortes incertitudes existant dans la détermination de γ pour le modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau carré, contrairement à un précédent travail [171]. De plus, si dans notre cas le solide peut être accommodé sans frustration pour toutes les tailles et formes de système, ce n'est pas vrai dans la majorité des cas. A notre avis, il n'est donc pas impossible qu'une telle méthode de détermination de γ puisse mener, dans les cas compliqués où de nombreux états sont proches en énergie et où les conditions de la simulation peuvent être importantes, à des signaux douteux d'ordre topologique ou de VBC. Au-delà du cas de ce plateau, il serait intéressant de mener une étude du plateau $m = 0$ dans les conditions de calcul du DMRG, et voir si l'entropie topologique γ peut être extraite de manière satisfaisante ou non. Puisque la présence du liquide \mathbb{Z}_2 a été mise en évidence avec la construction de LW, beaucoup plus fiable puisque donnant zéro dans tous les cas sauf pour une phase topologique, cela pourrait représenter une bonne manière de discuter la fiabilité de cette méthode (dans l'esprit de la référence [261], qui a montré l'importance de la géométrie du système simulé pour des facteurs de structure dans des phases VBC).

4 Discussion et perspectives

Au cours de ce chapitre, nous avons introduit certains concepts actuellement très importants dans l'étude des modèles frustrés bidimensionnels. Les travaux précédents ont montré que le Hamiltonien BFG est un bon modèle « jouet » pour réaliser une phase de liquide \mathbb{Z}_2 dans un modèle microscopique, guidé par une représentation en termes de modèle de dimères, avec trois dimères par site, sur le réseau triangulaire. En présence d'un champ magnétique, deux plateaux sont présents aux aimantations $m = 1/6$ et $m = 1/3$. Comme pour le cas $h = 0$, il est possible d'effectuer dans la limite Ising un *mapping* vers des modèles de dimères avec respectivement deux et un dimère par site. Ces modèles possédant tous un liquide \mathbb{Z}_2 au point RK, il est intéressant de les étudier. Nous avons par la suite traité le cas du plateau $m = 1/6$, lequel se trouve en fait dans une phase solide conventionnelle. Dans l'image en termes de dimères de cet état, ils forment un *striped* VBC, avec des boucles faisant le tour du système dans une des trois directions, d'où un crystal trois fois dégénéré.

Dans le cadre de l'étude de ce modèle, nous avons implémenté en Monte-Carlo les progrès récents donnant accès aux entropies de Rényi S_q , car elles se sont révélées utiles lors de l'étude du plateau $m = 0$. Peu considéré jusqu'à présent, le comportement de ces entropies de Rényi est *a priori* simple dans des phases brisant une symétrie discrète, ce qui donne lieu à un terme sous-dominant constant *positif*, relié à la dégénérescence et dépendant de q , au contraire du terme *négatif* pour les ordres topologiques. Bien que ce modèle compliqué ne soit pas le plus adapté, nous avons calculé ce terme dans le phase solide. S'il est bien positif, l'erreur obtenue fait qu'il n'est pas possible de conclure quant à la validité de la prédiction. Cependant, nous avons vu que cette méthode consistant à extrapoler le terme constant, qu'il soit d'origine topologique ou non, est sensible à la taille du système, et devrait également l'être quant à sa géométrie. Dans le contexte actuelle du DMRG, où cette approche a été de plus en plus utilisée, nous pensons que cela rejoint des travaux récents qui ont montré la difficulté d'obtenir des résultats clairs de cette façon. Il semble en effet que, peut-être présenté un peu vite comme un outil « magique », le calcul de γ nécessite de prendre des précautions. De fait, nous avons proposé qu'il serait intéressant d'examiner dans quelle mesure cette approche serait conclusive si nous appliquions les conditions du DMRG au cas $m = 0$, où le liquide \mathbb{Z}_2 ne fait aucun doute.

Il reste aussi plusieurs problèmes intéressants à aborder sur le modèle BFG, et nous allons maintenant lister les différentes perspectives d'étude.

4.1 Plateau $m = 1/6$

Il serait intéressant d'étudier la transition hors du plateau lorsque le rapport J_{xy}/J_z est augmenté. Nous avons dit que le point de transition est évalué à environ $(J_{xy}/J_z)_c \simeq 0,081$ d'après l'évolution de la taille des plateaux. Examinons d'abord quels sont les scénarios possibles. Puisque les deux phases, le solide et le superfluide (dans l'image de bosons de cœur dur où un spin *up* correspond à un site avec un boson et un spin *down* à un site vide), brisent des symétries différentes, l'hypothèse la plus naturelle d'après la théorie de Landau est celle d'une transition du premier ordre. Outre ce scénario, il est également possible d'avoir deux transitions successives, avec donc une phase supersolide entre la phase plateau solide et la phase superfluide. Il existe également une troisième possibilité, au-delà de la théorie de Landau, qui permettrait une transition continue directe entre les deux phases [262]. Des simulations initiales sur des systèmes de tailles $L = 6, 9$ ne montrent pas de double pic dans l'histogramme de l'énergie cinétique (voir Figure IV.19). Bien sûr, les petites tailles utilisées ne permettent pas d'exclure la possibilité d'une transition du premier ordre. Par exemple, dans la référence [263] une taille minimum de $L = 48$ a été nécessaire pour voir apparaître les deux pics pour la transition solide-superfluide,

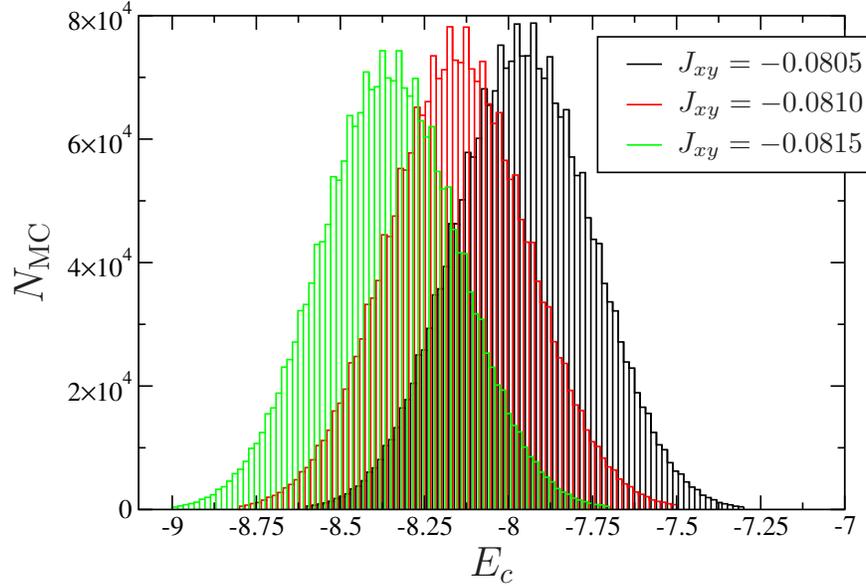


FIGURE IV.19 – Histogrammes de l'énergie cinétique pour plusieurs valeurs de J_{xy}/J_z autour de la transition solide-superfluide, sur un système de taille $L = 9$ et $\beta = 250/J_z$. Bien qu'il n'y ait pas de double pic visible, la petite taille du système ne permet pas d'exclure une transition du premier ordre (voir texte).

pour un modèle différent sur le réseau Kagomé. En plus, il est également connu que se placer au milieu du plateau peut compliquer fortement la situation. Il est alors généralement difficile d'exclure la possibilité d'une transition *faiblement* premier ordre, et elle peut apparaître (ou être réellement) directement continue [264]. L'analyse de la transition nécessite donc d'aller vers des tailles plus grandes, et il serait probablement plus judicieux de regarder non pas l'histogramme de l'énergie cinétique mais plutôt celui du paramètre d'ordre solide [265], utile pour une possible transition faiblement premier ordre. Il faudrait également étudier précisément l'évolution de la densité superfluide afin d'examiner la possibilité de la phase supersolide.

La transition de phase thermique serait aussi intéressante à considérer. Nous nous attendons à ce que l'ordre solide disparaisse au-delà d'une certaine température critique T_c , par une transition de phase de type Potts trois états (sur le modèle de la transition Ising pour l'état de Néel dans la bicouche de Heisenberg, voir la référence [266]). Il serait intéressant de vérifier ce scénario. Cependant, cela nécessiterait un effort important du point de vue numérique, puisque nous avons vu que les tailles accessibles sont relativement limitées. Nous avons calculé le facteur de structure pour plusieurs températures à la valeur $J_{xy}/J_z = 0,075$ et les résultats ne sont malheureusement pas de très bonne qualité (non montrés). Il faudrait donc se placer le plus près possible du point critique $(J_{xy}/J_z)_c$, et en plus de l'algorithme de plaquettes il serait assurément utile d'utiliser des techniques plus avancées comme le *parallel tempering* [267].

4.2 Plateau $m = 1/3$

Un autre axe pour continuer l'étude du modèle BFG est de regarder le plateau $m = 1/3$, avec le *mapping* vers le modèle à un dimère sur le réseau triangulaire. Ce modèle (IV.10) a été étudié

complètement, après la découverte de la phase \mathbb{Z}_2 au point RK. Un diagramme de phases complet a été proposé [217] puis confirmé numériquement [227]. Il contient quatre phases : pour V/t suffisamment négatif il y a une phase colonnaire comme celle sur la Figure IV.1 a), puis une phase VBC avec une maille de 12 sites (la phase $\sqrt{12} \times \sqrt{12}$), la phase \mathbb{Z}_2 jusqu'à $V/t = 1$ et enfin une phase *staggered* où les processus hors-diagonaux sont impossibles.

Si les points critiques de ces différentes transitions ne sont pas connus très précisément [227], il est cependant clair que le point $V/t = 0$ qui nous intéresse n'est pas dans la phase de liquide de spins mais dans la phase $\sqrt{12} \times \sqrt{12}$. Nous nous attendons donc à trouver cette phase dans le modèle BFG sur le plateau. Cependant, des résultats très préliminaires sur le facteur de structure ne montrent aucun signe d'ordre cristallin. En fait, le problème va nécessairement s'avérer plus difficile que pour le plateau $m = 1/6$. Dans la référence [268] qui étudie en détail ce VBC, des tailles jusqu'à 432 sites (sur le réseau triangulaire) n'ont pas permis de voir la saturation du facteur de structure. Pour pouvoir accommoder la cellule unité de 12 sites, il faut de plus utiliser uniquement des réseaux où L est un multiple de 6, ce qui, combiné à la difficulté numérique du modèle, peut fortement compliquer les choses. Un dernier élément est l'existence de défauts, comme nous l'avons déjà évoqué. Le *mapping* vers le modèle de dimères n'est valide que strictement à $J_{xy} = 0$. Nous avons constaté que la densité de défauts, définie à partir du nombre d'hexagones ne respectant pas la contrainte locale, est de l'ordre de 0,1 sur les deux plateaux. Autant pour le cas $m = 1/6$ cela ne pose pas de problème vu que le *striped* solide semble robuste (courte longueur de corrélation), autant cela pourrait être suffisant pour détruire le cristal $\sqrt{12} \times \sqrt{12}$ dont la longueur de corrélation semble particulièrement grande. Comme nous savons que le plateau est nécessairement dans une phase dégénérée, il serait donc intéressant d'identifier la phase présente. Si le cristal est déstabilisé en faveur de la phase \mathbb{Z}_2 , l'utilisation de l'entropie de Rényi sera un outil efficace.

4.3 Modification du modèle BFG

Pour chacun des trois plateaux, une extension logique du modèle BFG serait d'ajouter des termes diagonaux J'_z à plus longue portée, de manière à reproduire le terme diagonal V dans le modèle de dimères (IV.10). Pour le plateau $m = 0$, où le liquide \mathbb{Z}_2 est présent, cela permettrait d'induire une transition vers une phase VBC, question étudiée théoriquement récemment [269]. La même question se pose pour le plateau $m = 1/6$, où nous pourrions ainsi aller vers le liquide de spins, puisque nous savons qu'il est forcément présent au point RK. Voir comment se comporte l'extrapolation de l'entropie de Rényi pourrait donc être très utile pour détecter ces transitions et être certain que le système entre dans la phase \mathbb{Z}_2 . Là encore, le principal obstacle est numérique, car il faut alors introduire dans le modèle BFG une troisième échelle d'énergie $J'_z \sim J_{xy}^2$, ce qui rendra le Monte-Carlo moins efficace (en plus d'avoir un type de liens supplémentaire). En parallèle, il serait également intéressant de simuler directement les modèles de dimères avec deux et trois dimères par site. En fait, des résultats de diagonalisation exacte suggèrent que la transition VBC- \mathbb{Z}_2 dans le modèle de boucle aurait lieu vers $V/t = 0,5$, ce qui guiderait aussi les simulations sur le modèle BFG. Plus généralement, nous pensons que bien que ce modèle nécessite d'importants efforts numériques, c'est un très bon *toy model* pour reproduire la physique des modèles de dimères quantiques dans les Hamiltoniens microscopiques, et il mérite donc que l'on s'y attarde.

Conclusion

Puisant ses motivations à la fois dans le nombre croissant de composés disponibles ainsi que dans les nombreuses phases exotiques découvertes théoriquement, l'étude du magnétisme quantique est aujourd'hui très active. Ainsi, divers ingrédients, avec au premier plan l'influence de la frustration et d'une basse dimensionalité, offrent une physique riche, souvent très distincte de l'image habituelle de l'état de Néel antiferromagnétique du magnétisme classique. Avec les champs magnétiques très intenses que sont aujourd'hui capables de générer les expérimentateurs, l'étude des plateaux d'aimantation est une problématique de premier plan. Là encore, il existe une large diversité d'états conduisant à ces plateaux, que ce soient des états uniques triviaux, des solides ou des phases moins conventionnelles.

Au début de ce mémoire, nous avons présenté un panorama théorique et expérimental du magnétisme quantique. Nous nous sommes attachés à mettre en évidence le concept crucial de frustration et avons donné certains résultats exacts, bien utiles pour aborder des modèles souvent simples en apparence mais en réalité très difficiles à étudier. L'accent a également été mis sur les processus d'aimantation, pour lesquels nous avons effectué une courte revue mélangeant résultats théoriques et expérimentaux de systèmes uni et bidimensionnels. Ce chapitre propose ainsi une vision d'ensemble de la question des plateaux en une et deux dimensions.

Dans la suite, nous avons présenté trois modèles différents, dont nous espérons qu'ils permettent d'illustrer, de manière incomplète bien sûr, la variété des comportements physiques qui peuvent se retrouver sur les plateaux. Le premier modèle, un tube de spin triangulaire, a mis en évidence l'importance qu'ont certains degrés de liberté non magnétiques. Tout en restant sur un plateau, il est possible de voir apparaître différentes phases pour le mode de chiralité, conduisant par exemple à une renormalisation des aimantations classiques, ou phase de *spin imbalance*. Pour ces plateaux, nous avons aussi trouvé une chiralité qui est soit dans une phase critique XY, soit ordonnée ferromagnétiquement. Le diagramme de phases numérique, prenant en compte ces deux types d'excitations magnétiques et non magnétiques, se comprend à partir de différentes approches analytiques d'intégrale de chemin ou de couplage fort. Une légère modification du modèle nous a enfin permis de discuter brièvement le cas d'un composé expérimental.

Nous nous sommes ensuite focalisés sur un modèle de tube carré frustré, avec une attention particulière sur le lien entre dégénérescence classique et l'apparition d'états-produits donnant un *spin imbalance*. Cette phase s'est révélée très différente de celle du tube triangulaire, puisque nous avons pu montrer que la différence d'aimantation entre les chaînes est nécessairement quantifiée. Nous avons pour cela examiné comment se traduit la dégénérescence classique dans une approche d'intégrale de chemin. L'apparition d'un pseudo mode de Goldstone nous dit que lorsque ce mode est suffisamment délocalisé, cela se retrouve dans le blocage du paramètre d'ordre de *spin imbalance* à certaines valeurs particulières. Grâce à une analyse de couplage fort et des résultats numériques, nous avons pu confirmer que cela se produit bien, et ce sur tous les plateaux d'aimantation du modèle et pour tout spin S . Il serait intéressant de voir si ce mécanisme se retrouve dans d'autres modèles sujets à de l'ordre par le désordre, notamment en deux dimensions.

Finale­ment, le dernier chapitre a été consacré au fameux réseau Kagomé, qui est centre de beaucoup de travaux depuis plusieurs années. Introduit il y a une dizaine d'années, un modèle de spin-1/2 avec interactions jusqu'aux troisièmes voisins et une anisotropie de spin s'est révélé très intéressant en champ nul. Grâce à une représentation en termes de modèle de dimères, il a été établi qu'il possède une phase étendue de liquide de spin topologique \mathbb{Z}_2 . En ajoutant un champ magnétique, deux plateaux apparaissent dans la courbe d'aimantation, et possèdent également une physique donnée par des modèles de dimères. Nous avons étudié un de ces plateaux, qui s'est avéré être dans une phase solide. Pour ce problème, nous avons été amené à mettre en place des outils numériques introduits récemment pour la caractérisation de ces nouvelles phases à ordres non conventionnels. Bien que le plateau soit un cristal, nous avons proposé comme perspectives, outre l'étude des diverses transitions de phases pour sortir du cristal, comment modifier le Hamiltonien pour *a priori* induire l'apparition d'un liquide de spin. L'utilisation de l'entropie de Rényi, à travers l'extrapolation de son terme sous-dominant, sera alors très utile pour esquisser un diagramme de phases. Bien que compliqués à simuler, nous pensons que les plateaux de ce modèle peuvent permettre d'obtenir de nombreuses informations sur ces nouvelles phases non conventionnelles.

Annexe A

Etats cohérents de spin

Nous donnons dans cette annexe les principales propriétés et informations sur les états cohérents de spin utilisés dans la représentation d'intégrale de chemin des Chapitres II et III. Ils forment une famille d'états créés par l'application de l'opérateur de rotation à l'état complètement polarisé $|S, S\rangle$:

$$|\vec{n}\rangle = e^{i\theta\left(\frac{\hat{z}\times\vec{n}}{|\hat{z}\times\vec{n}|}\right)\cdot\vec{S}}|S, S\rangle, \quad (\text{A.1})$$

où \vec{n} est un vecteur unité formant un angle θ avec l'axe de quantification z . C'est ce vecteur (les deux angles) qui paramétrise les états cohérents.

L'état $|\vec{n}\rangle$ peut être développé sur la base complète des représentations irréductibles de spin S $|S, M\rangle$, où les M sont les valeurs propres de l'opérateur S^z . Les coefficients du développement sont les matrices de la représentation de S

$$|\vec{n}\rangle = \sum_{M=-S}^S D^{(S)}(\vec{n})_{MS}|S, M\rangle. \quad (\text{A.2})$$

Il y a bien sûr beaucoup d'autres rotations possibles, qui diffèrent l'une de l'autre uniquement par une rotation autour de l'axe z . Elles correspondent toutes au même état, à un facteur de phase près. Les matrices $D^{(S)}$ ne forment pas un groupe mais satisfont à la relation

$$D^{(S)}(\vec{n}_1)D^{(S)}(\vec{n}_2) = D^{(S)}(\vec{n}_3)e^{i\Phi(\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{n}_3)S^z}, \quad (\text{A.3})$$

où les \vec{n}_i sont arbitraires et $\Phi(\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{n}_3)$ est l'aire du triangle sphérique de sommets donnés par \vec{n}_1 , \vec{n}_2 et \vec{n}_3 . La sphère n'ayant pas de bords, il y a deux aires qu'il est possible de choisir et ainsi Φ est défini à 4π près.

Le produit scalaire de deux états cohérents s'écrit

$$\begin{aligned} \langle \vec{n}_1 | \vec{n}_2 \rangle &= \langle S, S | D^{(S)\dagger}(\vec{n}_1) D^{(S)}(\vec{n}_2) | S, S \rangle \\ &= e^{i\Phi(\vec{n}_1, \vec{n}_2, \vec{n}_3)S} \left(\frac{1 + \vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2}{2} \right)^S, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

les états cohérents ne sont donc pas orthogonaux. Les éléments diagonaux des opérateurs de spin \vec{S} valent

$$\langle \vec{n} | \vec{S} | \vec{n} \rangle = S\vec{n}. \quad (\text{A.5})$$

Cela veut dire que la valeur moyenne d'un opérateur de spin dans les états cohérents $|\vec{n}\rangle$ est justement le vecteur \vec{n} mais de longueur S .

Enfin, l'opérateur identité \hat{I} peut s'exprimer en termes des opérateurs des états cohérents $|\vec{n}\rangle\langle\vec{n}|$ par

$$\hat{I} = \int d\mu(\vec{n}) |\vec{n}\rangle\langle\vec{n}|, \quad (\text{A.6})$$

où la mesure d'intégration est donnée par

$$d\mu(\vec{n}) = \left(\frac{2S+1}{4\pi} \right) d^3\vec{n} \delta(\vec{n}^2 - 1). \quad (\text{A.7})$$

Annexe B

Hamiltonien effectif au deuxième ordre au point symétrique

Dans la base Q , le Hamiltonien effectif au deuxième ordre en perturbation au point symétrique $J_d = 0$ pour un spin-1/2 est donné par

$$\begin{aligned}
 H_{\text{eff},Q}^{(2)} = \sum_j & \left[q_1 \left(\lambda_j^1 \lambda_{j+1}^1 + \lambda_j^4 \lambda_{j+1}^4 + \lambda_j^6 \lambda_{j+1}^6 \right) + q_2 \left(\lambda_j^2 \lambda_{j+1}^2 + \lambda_j^5 \lambda_{j+1}^5 + \lambda_j^7 \lambda_{j+1}^7 \right) + q_3 \left(\lambda_j^3 \lambda_{j+1}^3 + \lambda_j^8 \lambda_{j+1}^8 \right) \right. \\
 & + t_1 \left(\lambda_j^1 \lambda_{j+1}^4 \lambda_{j+2}^6 + \lambda_j^4 \lambda_{j+1}^6 \lambda_{j+2}^1 + \lambda_j^6 \lambda_{j+1}^1 \lambda_{j+2}^4 + \lambda_j^1 \lambda_{j+1}^6 \lambda_{j+2}^4 + \lambda_j^6 \lambda_{j+1}^4 \lambda_{j+2}^1 + \lambda_j^4 \lambda_{j+1}^1 \lambda_{j+2}^6 \right) \\
 & + t_2 \left(\lambda_j^1 \left(1 - \sqrt{3} \lambda_{j+1}^8 \right) \lambda_{j+2}^1 + \lambda_j^4 \left(1 - \frac{3}{2} \lambda_{j+1}^3 + \frac{\sqrt{3}}{2} \lambda_{j+1}^8 \right) \lambda_{j+2}^4 \right. \\
 & \left. \left. + \lambda_j^6 \left(1 + \frac{3}{2} \lambda_{j+1}^3 + \frac{\sqrt{3}}{2} \lambda_{j+1}^8 \right) \lambda_{j+2}^6 \right) \right], \tag{B.1}
 \end{aligned}$$

avec les constantes

$$q_1 = \frac{J_{\parallel}}{4} + \frac{7J_{\parallel}^2}{128J_{\perp}}, \quad q_2 = -\frac{31J_{\parallel}^2}{128J_{\perp}}, \quad q_3 = -\frac{33J_{\parallel}^2}{128J_{\perp}}, \quad t_1 = -\frac{J_{\parallel}^2}{32J_{\perp}}, \quad t_2 = -\frac{J_{\parallel}^2}{48J_{\perp}}. \tag{B.2}$$

Pour un spin- S quelconque sur le dernier plateau d'aimantation, le Hamiltonien effectif garde la même forme, mais les coefficients q_{α} acquièrent une dépendance en S , et sont donnés par

$$\begin{aligned}
 q_1 &= \frac{J_{\parallel}}{4} - \frac{J_{\parallel}^2}{J_{\perp}} \left(\frac{32S^2 - 16S - 3}{32} + \frac{5}{256S} \right), \\
 q_2 &= -\frac{J_{\parallel}^2}{J_{\perp}} \left(\frac{32S^2 - 1}{32} + \frac{3}{256S} \right), \\
 q_3 &= -\frac{J_{\parallel}^2}{J_{\perp}} \left(\frac{32S^2 + 1}{32} - \frac{3}{256S} \right). \tag{B.3}
 \end{aligned}$$

Les coefficients t_1 et t_2 sont inchangés.

Annexe C

Transformation non locale de Kennedy

Nous présentons ici la transformation non locale introduite par KENNEDY et permettant de mettre en évidence la symétrie SU(2) cachée du modèle effectif au premier ordre du tube de spin carré au point symétrie. Comme montré par KENNEDY, tout Hamiltonien de spin-1 avec des interactions à courte portée et contenant des termes de la forme $T_j^\alpha T_{j+1}^\alpha$ et $(T_j^\alpha)^2$ peut se réécrire avec des termes bilinéaires à courte portée de la forme $\lambda_j^\alpha \lambda_{j+1}^\alpha$, où $\alpha = 1, 4, 6$. Les λ^α sont les matrices de Gell-Mann et, pour ces indices α , satisfont aux relations d'anticommutation $\{\lambda_j^\alpha, \lambda_j^\beta\} = \lambda_j^\gamma$ requises par la transformation, où (α, β, γ) sont des permutations de (1,4,6). Cette transformation unitaire non locale s'écrit comme le produit $\mathcal{V} = \mathcal{U}\mathcal{W}$ de deux transformations unitaires, où \mathcal{U} est la transformation non locale, définie uniquement pour des conditions aux bords ouvertes, donnée par [209]

$$\mathcal{U} = \prod_{j < k} \exp\left(i\pi T_j^z T_k^x\right), \quad (\text{C.1})$$

et \mathcal{W} est un produit d'opérateurs locaux

$$\mathcal{W} = \prod_i \mathcal{W}_k, \quad \mathcal{W}_k = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (\text{C.2})$$

Les produits $\lambda_i^\alpha \lambda_{i+1}^\alpha$ se transforment alors selon

$$\begin{aligned} \mathcal{V} \lambda_j^1 \lambda_{j+1}^1 \mathcal{V}^{-1} &= -T_j^x T_{j+1}^x, \\ \mathcal{V} \lambda_j^4 \lambda_{j+1}^4 \mathcal{V}^{-1} &= -T_j^z T_{j+1}^z, \\ \mathcal{V} \lambda_j^6 \lambda_{j+1}^6 \mathcal{V}^{-1} &= -T_j^y T_{j+1}^y. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Nous voyons que le Hamiltonien effectif au premier ordre (III.35) satisfait bien aux conditions de cette transformation, et peut donc bien se réécrire (pour des conditions aux bords ouvertes) comme une chaîne de spin-1 ferromagnétique

$$\mathcal{V} H_{\text{eff}}^{(1)} \mathcal{V}^{-1} = -\frac{J_{\parallel}}{4} \sum_j \vec{T}_j \cdot \vec{T}_{j+1}, \quad (\text{C.4})$$

Annexe D

Monte-Carlo quantique et entropies de Rényi

Dans cette annexe, nous allons rappeler les principales idées de l'algorithme de développement en séries stochastiques de Monte-Carlo quantique. Nous présenterons dans un premier temps une représentation en série de la fonction de partition, les différents mouvements permettant de l'échantillonner, ainsi que les estimateurs des principales observables. Puis nous mentionnerons brièvement l'utilisation d'un algorithme de plaquette, nécessaire dans l'étude du modèle BFG, difficile à simuler car dans le régime $J_z \gg J_{xy}$. Pour finir nous décrirons la manière de calculer les entropies de Rényi dans le cadre du SSE et l'illustrerons par deux exemples.

1 Principe

Dans une simulation Monte-Carlo Quantique, nous cherchons à calculer la fonction de partition

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}\{e^{-\beta H}\} \quad (\text{D.1})$$

où $\beta = 1/T$ est la température inverse et H le Hamiltonien du système. Le principe de base de l'algorithme de développement en séries stochastiques (*Stochastic Series Expansion*, SSE) [270] est d'écrire le poids de Boltzmann comme une série de Taylor selon

$$e^{-\beta H} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \beta^n H^n. \quad (\text{D.2})$$

Pour obtenir la fonction de partition, nous prenons ensuite la trace de cet opérateur

$$\mathcal{Z} = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \beta^n \langle \alpha | H^n | \alpha \rangle, \quad (\text{D.3})$$

où les états $\{|\alpha\rangle\}$ forment une base décrivant complètement l'espace de Hilbert du problème. La base est *a priori* quelconque et, pour de nombreux modèles de spin, il est pratique de se placer dans la base des états propres de S^z , *i.e.* $\{|\alpha\rangle\} = \{|S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z\rangle\}$ avec $S_i^z = \uparrow, \downarrow$ et N le nombre de spins. En fait, cette idée de développement en série avait déjà été proposée par HANDSCOMB au début des années soixante [271] pour l'étude du modèle de Heisenberg ferromagnétique de spin-1/2. En effet, dans ce cas la trace des séquences d'opérateurs peut être évaluée analytiquement et un échantillonnage

uniquement sur les séquences s_n est suffisant pour obtenir un résultat exact, à l'incertitude statistique près bien entendu. Malheureusement, la possibilité de calculer la trace analytiquement est restreinte à un très petit nombre de cas. Si des variantes de la méthode de HANDSCOMB ont été proposées par la suite pour le modèle de Heisenberg antiferromagnétique [272], le domaine d'applicabilité est resté très peu étendu. Ce problème a été résolu au début des années 90 par SANDVIK [270], qui a proposé le développement sur les états de la base $\{|\alpha\rangle\}$, permettant ainsi de s'affranchir de la nécessité d'avoir un résultat analytique pour la trace des opérateurs.

Nous allons maintenant considérer un Hamiltonien pouvant s'écrire comme une somme sur des termes de liens entre deux sites, en écrivant

$$H = - \sum_{b=1}^{N_b} H_b, \quad (\text{D.4})$$

où N_b est le nombre total de liens (par exemple, $N_b = dN$ pour un réseau cubique d -dimensionnel avec uniquement des interactions entre plus proches voisins) et le lien b connecte deux sites $i(b)$ et $j(b)$. Il est également utile de séparer le Hamiltonien de liens en deux parties

$$H_b = H_{b,1} - H_{b,2}, \quad (\text{D.5})$$

où l'opérateur $H_{b,1}$ est diagonal et $H_{b,2}$ hors-diagonal. En écrivant le Hamiltonien à la puissance n comme une somme sur tous les n produits possibles des opérateurs de liens, nous arrivons à la formule importante résumant le principe du SSE

$$\mathcal{Z} = \sum_{\alpha} \sum_{s_n} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n_2}}{n!} \beta^n \langle \alpha | \prod_{p=1}^n H_{b_p, t_p} | \alpha \rangle, \quad (\text{D.6})$$

où $s_n = \{[b_1, t_1]_1, [b_2, t_2]_2, \dots, [b_n, t_n]_3\}$ est une liste *ordonnée* de n paires d'indices, qui sert à décrire un produit de n opérateurs de liens en spécifiant le lien $b_p = 1, \dots, N_b$ et le type $t_p = 1, 2$ du p -ième opérateur. Cette séquence est appelée la chaîne d'opérateurs. L'entier n_2 compte le nombre d'opérateurs hors-diagonaux présents dans une séquence s_n .

Dans la méthode SSE, une configuration Monte-Carlo est donc donnée par la combinaison d'un état $|\alpha\rangle$ et d'une chaîne d'opérateurs s_n . L'objectif est alors d'échantillonner la fonction de partition en réalisant une marche aléatoire dans l'espace des configurations (α, s_n) , dont le poids $W(\alpha, s_n)$ est donné par

$$W(\alpha, s_n) = \frac{(-1)^{n_2}}{n!} \beta^n \langle \alpha | \prod_{p=1}^n H_{b_p, t_p} | \alpha \rangle. \quad (\text{D.7})$$

A partir d'une certaine configuration (α, s_n) , il faut donc effectuer des mouvements qui nous amèneront à une autre configuration (α', s'_n) . Nous décrirons ces différents mouvements plus loin et pour l'instant rappelons simplement que, comme dans tout schéma Monte-Carlo, ils doivent respecter deux conditions :

i) le bilan détaillé

$$\mathcal{P}(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')W(\mathcal{C}) = \mathcal{P}(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})W(\mathcal{C}') \quad (\text{D.8})$$

où nous utilisons \mathcal{C} pour noter une configuration Monte-Carlo de poids $W(\mathcal{C})$ et $\mathcal{P}(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ est la probabilité de transition de \mathcal{C} à \mathcal{C}'

ii) la condition d'ergodicité, c'est-à-dire que toute configuration dont le poids est non nul doit pouvoir être atteinte à partir de n'importe quelle autre configuration en un temps (Monte-Carlo) fini.

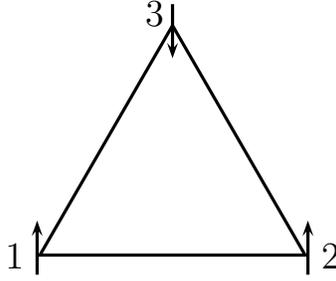


FIGURE D.1 – Sur un réseau frustré comme le réseau triangulaire, il est possible de retrouver le même état après un nombre impair de termes hors-diagonaux, comme sur cet exemple d’une seule plaquette triangulaire où $|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle = (S_3^+ S_1^-)(S_1^+ S_2^-)(S_2^+ S_3^-)|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$, chaque spin étant bien retourné deux fois.

Afin de pouvoir correctement échantillonner les configurations (α, s_n) avec une probabilité proportionnelle à leur poids, il faut bien entendu que ces derniers soient positifs. Pour discuter ce point, il est utile de définir un état propagé obtenu par application des ℓ premiers opérateurs de la chaîne s_n [270]

$$|\alpha(\ell)\rangle \sim \prod_{p=1}^{\ell} H_{b_p, t_p} |\alpha\rangle \quad (\text{D.9})$$

où $|\alpha\rangle$ se comprend comme $|\alpha(0)\rangle$ et nous nommerons ℓ l’index de propagation. Dans le poids (D.7), la contribution des opérateurs diagonaux peut être rendue systématiquement positive en ajoutant une constante globale au Hamiltonien (D.4) et ne pose donc pas de problème. Ce sont les éléments hors-diagonaux qui vont générer des poids négatifs, le fameux « problème de signe » du Monte-Carlo Quantique [273], à cause de la présence du facteur $(-1)^{n^2}$. Il est immédiat que, par cyclicité de la trace, une configuration (α, s_n) ne contribuera que si $|\alpha(n)\rangle = |\alpha(0)\rangle$. Pour un réseau bipartite, n_2 est pair et le poids est ainsi bien positif. Pour un réseau non-bipartite, il est facile de voir que ce n’est pas le cas, nous pouvons retrouver la configuration de départ après un nombre impair de *spin-flips* (voir Figure D.1). Dans ce cas, il est en principe possible d’utiliser la valeur absolue du poids $|W(\alpha, s_n)|$ mais cette méthode est en pratique extrêmement limitée par les très fortes fluctuations des observables calculées, qui augmentent exponentiellement avec la taille du système et avec β [273]. Ce problème, qui touche les systèmes d’électrons en interactions et les systèmes magnétiques frustrés, n’a à l’heure actuelle pas de solution en général et peut être évité ou réduit seulement dans certains cas bien particuliers [274]. Nous supposons donc dans la suite que le poids est bien positif, ce qui est systématiquement le cas pour un modèle non-frustré.

Selon l’expression (D.6) de la fonction de partition, l’échantillonnage doit *a priori* se faire pour toutes les puissances n . Bien entendu, cela n’est pas possible d’un point de vue pratique quand n devient très grand. Cependant, pour un système de taille finie et à température finie, ce qui est en pratique toujours le cas, seules les séquences s_n de longueurs finies vont contribuer de manière non négligeable à la trace. Afin de construire un algorithme efficace [270], il est alors utile de tronquer le développement de Taylor à une certaine puissance $n = M$. En choisissant M suffisamment grand, l’erreur due à cette troncature est exponentiellement petite car la distribution des valeurs de n au cours d’une simulation est très proche d’une loi normale [275], et au final complètement négligeable. Nous verrons plus tard lors de l’expression des observables que $m \sim N\beta$. Dans la pratique, l’échantillonnage va donc se faire sur des chaînes d’opérateur s_M dont la taille est fixée. Dans ces chaînes, le nombre d’opérateurs $n < M$ va bien sûr varier, et pour compléter nous allons donc introduire $M - n$ opérateurs identités, notés

$H_{0,0}$ pour obtenir une longueur totale M . Il faut cependant bien faire attention à modifier le poids des configurations en conséquence. En effet, pour une chaîne contenant n opérateurs non-identités il y a $\binom{M}{n}$ chaînes de longueur M correspondant à toutes les possibilités d'insertion de $M - n$ opérateurs identités. Il faut donc diviser le poids donné en (D.7) par ce facteur et, dans ce schéma où la série de Taylor est tronquée, nous avons

$$W(\alpha, s_n) = \frac{\beta^n (M - n)!}{M!} \langle \alpha | \prod_{p=1}^M H_{b_p, t_p} | \alpha \rangle, \quad (\text{D.10})$$

et la fonction de partition devient

$$\mathcal{Z} = \sum_{\alpha} \sum_{s_M} W(\alpha, s_M) \quad (\text{D.11})$$

où nous sommes sur des chaînes d'opérateurs de longueur fixée M et où la somme sur le nombre d'opérateurs non-identités n est implicite. C'est cette formule qui va être utilisée dans l'implémentation pratique de la méthode SSE, et nous allons brièvement discuter les trois types de mouvements permettant d'échantillonner de manière efficace l'espace des configurations. Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur aux références [270, 274, 276, 277] qui décrivent dans le détail ces mouvements, ainsi qu'à la thèse de F. ALET pour un exposé complet en français [278].

2 Mouvements Monte-Carlo

Pour commencer, rappelons que nous devons faire changer l'état $|\alpha\rangle$, le nombre n d'opérateurs non-identités ainsi que la composition de la chaîne d'opérateurs. Le premier type de mouvement que nous allons décrire est un mouvement diagonal, qui permet d'insérer sur un lien un opérateur diagonal en remplacement d'un opérateur identité, ou inversement. Ce mouvement $[0, 0]_p \leftrightarrow [1, b]_p$, qui ne concerne qu'un seul opérateur et un seul lien, est purement local. De manière pratique, la liste d'opérateurs s_M est parcourue, et à chaque index de propagation $p = 1, \dots, M$ si l'opérateur n'est pas hors-diagonal, ce mouvement est proposé. Les probabilités d'échange doivent respecter le bilan détaillé et se font selon les probabilités de transition Metropolis. Elles sont données par [276]

$$\begin{aligned} \mathcal{P}([0, 0]_p \rightarrow [1, b]_p) &= \min \left(1, \frac{N_b \beta \langle \alpha(p) | H_{1,b} | \alpha(p) \rangle}{M - n} \right), \\ \mathcal{P}([1, b]_p \rightarrow [0, 0]_p) &= \min \left(1, \frac{M - n + 1}{N_b \beta \langle \alpha(p) | H_{1,b} | \alpha(p) \rangle} \right), \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

où le facteur N_b est là pour prendre en compte le fait qu'il y a N_b liens possibles pour l'insertion d'un opérateur diagonal. Ce mouvement change donc le nombre n d'opérateurs non-identités de ± 1 , mais ne touche pas à l'état $|\alpha\rangle$ ou aux opérateurs hors-diagonaux.

Le second type de mouvement, qui se fait à n fixé, a lui pour objectif d'agir sur les opérateurs hors-diagonaux. Par cyclicité de la trace, il est évident qu'introduire des opérateurs hors-diagonaux un par un n'est pas possible, ils doivent venir au moins par paire pour chaque site. Le mouvement le plus simple qu'il est possible d'effectuer est alors un mouvement local impliquant deux opérateurs, en remplaçant une paire d'opérateurs diagonaux à deux index de propagation par deux opérateurs hors-diagonaux : $[1, b]_{p_1} [1, b]_{p_2} \leftrightarrow [2, b]_{p_1} [2, b]_{p_2}$. Cela permet également de changer l'état $|\alpha\rangle$. Ce mouvement, qui a historiquement été utilisé dans un premier temps [4], n'est en pratique pas très efficace et donne des temps d'autocorrélation élevés. Pour résoudre ce problème, un autre type de mouvement,

le *loop operator update*, permet de changer un nombre important d'opérateurs diagonaux et hors-diagonaux. Ce mouvement est non-local et donc beaucoup plus performant que le simple échange local de deux opérateurs. L'idée du *loop operator update* consiste à partir d'un site (lien) choisi et d'un index de propagations p choisis aléatoirement, puis à « tracer » un chemin fermé, une boucle donc, dans l'espace $d + 1$ dimensionnel des spins (liens) et des index de propagation (donc des opérateurs). Tous les opérateurs non-identités qui seront touchés par ce chemin seront alors modifiés, ce dernier étant construit de telle sorte que les nouvelles configurations générées ont un poids non-nul. Il est facile de se convaincre qu'en modifiant un opérateur à l'indice de propagation p , l'état propagé $|\alpha(p)\rangle$ associé est également modifié. Donc, pour des boucles passant par l'indice de propagation 0, c'est-à-dire passant par les conditions périodiques, l'état $|\alpha\rangle$ va également être changé. Plus de détails sur les différentes façons de construire ces boucles sont donnés dans les références [276, 277].

Un dernier type de mouvement, plus marginal, consiste à changer l'état des spins aux sites sur lesquels aucun opérateur n'agit. De tels sites sont en effet inaccessibles à l'*operator loop update*, et un spin-1/2 pourra ainsi être retourné aléatoirement avec probabilité 1/2 [277]. Cependant, puisque nous avons dit précédemment que le nombre n est proportionnel à $N\beta$, cela arrivera essentiellement à haute température.

Finalement, ces trois mouvements combinés permettent d'échantillonner de manière efficace et ergodique la fonction de partition. Un pas Monte-Carlo consistera donc à réaliser dans un premier temps un mouvement diagonal, suivi du *loop operator update* où un nombre suffisant de boucles devront être construites de manière à toucher assez d'opérateurs. Les spins aux sites sans opérateurs seront ensuite retournés aléatoirement. Une fois ces mouvements effectués, les mesures sont réalisées. La valeur de troncature M est ajustée dynamiquement au cours des premiers pas de la simulation (phase de « thermalisation »), et est augmentée progressivement jusqu'à ce que le nombre d'opérateurs non-diagonaux n soit systématiquement bien inférieur à M [4].

3 Observables

Après avoir traité le cas de la fonction de partition, nous allons maintenant donner l'expression des estimateurs de quelques observables les plus courantes. Dans un premier temps, nous considérons un opérateur \mathcal{O} et, comme précédemment, développons en série de Taylor sa valeur moyenne thermique

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr}\{\mathcal{O}e^{-\beta H}\} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\alpha} \sum_{s_M} \frac{\beta^n (M-n)!}{M!} \langle \alpha | \mathcal{O} \prod_{p=1}^M H_{b_p, t_p} | \alpha \rangle, \quad (\text{D.13})$$

où nous avons directement écrit la formule pour une série tronquée à l'ordre M . S'il est possible de trouver une fonction $\mathcal{O}(\alpha, s_M)$ telle que

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\sum_{\alpha} \sum_{s_M} \mathcal{O}(\alpha, s_M) W(\alpha, s_M)}{\sum_{\alpha} \sum_{s_M} W(\alpha, s_M)} \quad (\text{D.14})$$

l'estimation de $\langle \mathcal{O} \rangle$ dans la simulation sera donnée par la moyenne de $\mathcal{O}(\alpha, s_M)$ sur les configurations échantillonnées : $\langle \mathcal{O} \rangle = \langle \mathcal{O}(\alpha, s_M) \rangle_W$.

En considérant la valeur moyenne d'un opérateur de lien H_b comme appartenant à la chaîne d'opérateurs dans la relation (D.13), il est possible de montrer [275] que l'énergie $E = \langle H \rangle$ est reliée au nombre moyen d'opérateurs non-identités par la formule

$$E = -\frac{1}{\beta} \langle n \rangle. \quad (\text{D.15})$$

Cela peut aussi se voir à partir de la relation $E = -\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \beta}$. Cette formule montre que, à basse température, le nombre moyen d'opérateurs non-identités doit être d'ordre $N\beta$. C'est de là que provient l'ordre de grandeur de la troncature M que nous avons donné précédemment. La chaleur spécifique est donnée par

$$C = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 - \langle n \rangle. \quad (\text{D.16})$$

Pour un opérateur diagonal, c'est-à-dire vérifiant $\mathcal{O}|\alpha(p)\rangle = o(\alpha(p))|\alpha(p)\rangle$ (typiquement $\mathcal{O} = S^z$), il est facile de voir que sa valeur moyenne au cours d'une simulation est donnée par $\langle \mathcal{O} \rangle = \langle o(\alpha(0)) \rangle$ qui est donc calculée à l'index de propagation 0 avec la notation $|\alpha(0)\rangle = |\alpha\rangle$ utilisée jusqu'à présent. Cependant, il faut remarquer que pour une chaîne d'opérateur s_M donnée, toute nouvelle chaîne obtenue par permutation cyclique a le même poids. La valeur moyenne de l'opérateur peut donc être calculée pour chaque état propagé $|\alpha(p)\rangle$ à l'index de propagation $p = 1, \dots, M$ et moyennée, ce qui nous donne au final [275]

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \left\langle \frac{1}{M+1} \sum_{p=0}^M o(\alpha(p)) \right\rangle. \quad (\text{D.17})$$

Le même raisonnement s'applique pour les corrélations à temps égaux d'opérateurs diagonaux et nous obtenons

$$\langle \mathcal{O}_i \mathcal{O}_j \rangle = \left\langle \frac{1}{M+1} \sum_{p=0}^M o_i(\alpha(p)) o_j(\alpha(p)) \right\rangle. \quad (\text{D.18})$$

4 Algorithme de plaquettes

Nous avons présenté brièvement la version « standard » de la méthode SSE, sans rentrer plus dans les détails en ce qui concerne la construction des boucles dans la *loop operator update*. Il se trouve que, pour des modèles avec des termes d'interaction (termes diagonaux, ce qui ne pose pas de problème de signe) en compétition, comme des termes à plus longue portée, ou pour un réseau avec une frustration géométrique importante (les réseaux triangulaire et Kagomé par exemple), les simulations SSE vont souffrir d'un phénomène de *freezing*, malgré l'utilisation d'algorithmes non-locaux. L'espace des phases est échantillonné de façon extrêmement lente, conduisant à des temps d'autocorrélation qui peuvent vite rendre la simulation infaisable, l'ergodicité pouvant même être perdue. C'est en particulier le cas avec les modèles de type XXZ dans le régime où le terme d'interaction J_z domine, comme celui que nous avons présenté et qui inclut de plus des termes à longue portée. Les raisons de ces difficultés du SSE sont expliquées en détail dans les références [257, 267, 279] et nous ne donnerons ici qu'un résumé, basé sur une image physique ne nécessitant pas de rentrer dans le détail des *updates* de boucle.

Dans ce régime de forte anisotropie, nous avons vu que le système est fortement influencé par la limite classique (limite Ising), pour laquelle l'état fondamental est fortement dégénéré dû à l'émergence d'une forte contrainte locale. Bien entendu, la présence du terme de saut J_{xy} va lever cette dégénérescence mais les différences d'énergies entre les états resteront faibles. Au cours du *loop operator update*, cela va se traduire par une difficulté à naviguer entre des configurations presque dégénérées, à cause de la présence de fortes barrières d'énergie à traverser. En effet, nous avons dit précédemment que ce mouvement Monte-Carlo se fait en évoluant dans l'espace des liens et des index de propagations. Si nous prenons le cas de notre modèle XXZ sur le réseau Kagomé, arrivant à un opérateur associé à un état propagé $|\alpha(p)\rangle$ qui satisfait la règle de glace, passer à un état différent qui satisferait lui aussi la contrainte locale sur chaque hexagone va nécessiter la génération d'états intermédiaires $|\alpha(q)\rangle$ qui contiendront des défauts sur certains hexagones. Le fait que ces états ont alors des énergies beaucoup

plus élevées va faire que le *loop operator update* aura du mal à changer des opérateurs tels que ces états de plus hautes énergies apparaissent, et donc à atteindre un autre état sans défaut.

Afin de combattre cette tendance au gel de la simulation, LOUIS et GROS ont proposé un schéma où la décomposition (D.4) du Hamiltonien se fait plutôt sur des plaquettes, par exemple des triangles pour un modèle XXZ sur réseau triangulaire dans la limite Ising ou sur des hexagones dans notre cas. La méthode de la construction des boucles dans le *loop operator update* reste exactement la même, mais cette réécriture permet de changer les poids relatifs entre les configurations sans défaut et celles en contenant, de manière à favoriser autant que possible l'apparition de ces dernières. Au cours de l'étude du modèle (IV.5), nous avons donc utilisé cette modification d'algorithme de plaquettes pour simuler efficacement le régime de large anisotropie. Il est important de bien insister sur le fait que l'algorithme de boucle reste inchangé, et en particulier la modification avec les plaquettes n'introduit *pas* de nouveaux types de mouvements. Elle sert seulement à changer les poids des différents mouvements possibles dans l'algorithme de boucles.

5 Entropies de Renyi et SSE

5.1 *Replica trick*

Nous allons maintenant décrire comment calculer l'entropie de Renyi dans une simulation SSE. L'entropie de Renyi d'une sous-partie A du système total est définie par

$$S_q(A) = \frac{1}{1-q} \ln(\text{Tr}\{\rho_A^q\}) \quad (\text{D.19})$$

où ρ_A la matrice de densité réduite de la région A est obtenue en traçant la matrice de densité totale sur les degrés de liberté du sous-système complémentaire B : $\rho_A = \text{Tr}_B\{e^{-\beta H}\}$. La limite $q \rightarrow 1$ redonne l'entropie plus familière de von Neumann $S_{vN}(A) = -\text{Tr}\{\rho_A \ln(\rho_A)\}$. Des méthodes ont été développées récemment pour obtenir les entropies S_q avec $q \geq 2$ dans des simulations Monte-Carlo, et ce pour différents algorithmes, à la fois pour les spins à température nulle avec le Monte-Carlo Valence Bond [280, 281] ou à température finie avec le SSE [260, 282]. Nous allons ici décrire la méthode pour le SSE.

L'idée de base pour le calcul des entropies de Renyi, que ce soit analytiquement ou numériquement, est l'utilisation du *replica trick*. Ce dernier consiste à considérer q copies du système et à modifier les conditions périodiques en temps imaginaire du système équivalent en dimension $d+1$ utilisé dans la simulation. CALABRESE et CARDY ont en effet montré que l'entropie de Renyi à température finie peut s'écrire comme [161]

$$S_q(A) = \frac{1}{1-q} \ln \left(\frac{\mathcal{Z}_A^{(q)}}{\mathcal{Z}_A^q} \right). \quad (\text{D.20})$$

\mathcal{Z}_A^q est simplement la fonction de partition de q copies *découplées* du système, tandis que $\mathcal{Z}_A^{(q)}$ est la fonction de partition d'un ensemble modifié formé par les q copies, avec des conditions aux bords particulières en temps imaginaire. Les sites appartenant à la région A sont « collés » dans la direction en temps imaginaire, c'est-à-dire que pour ces états la propagation est cyclique avec une période $q\beta$. Par contre, les sites dans la région B ont les conditions aux bords habituelles pour chaque copie, *i.e* périodiques en β (voir Figure D.2). De cette façon, nous avons également la notation $\mathcal{Z}_A^q = \mathcal{Z}_\emptyset^{(q)}$.

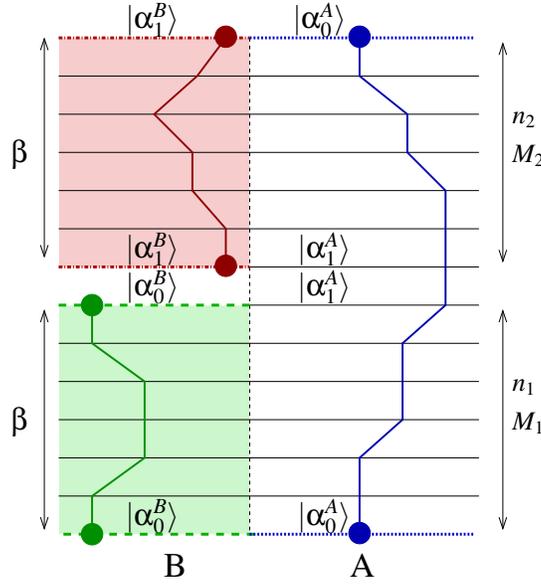


FIGURE D.2 – Représentation du système de dimension $d + 1$ utilisé pour la simulation de l'ensemble modifié $\mathcal{Z}_A^{(q)}$ pour $q = 2$. La direction verticale représente la propagation de la chaîne d'opérateurs (ou le temps imaginaire), tandis que l'axe horizontal représente les états $|\alpha_q\rangle = |\alpha_{q,A}\rangle|\alpha_{q,B}\rangle$ du système physique de dimension d . Les deux copies du système sont chacune caractérisées par n_q et $M_q \sim \beta$. A gauche, les états dans le sous-système B sont périodiques en β , tandis qu'à droite pour les sites de la partition A la propagation se fait sur toute l'extension 2β . Pour le carré de la fonction de partition \mathcal{Z}_A^2 de l'ensemble usuel, cela revient à prendre $A = \emptyset$, pour lequel les deux copies sont indépendantes et tous les sites ont une périodicité β . Figure tirée de la référence [282].

5.2 Observables SSE

En 2010, MELKO, KALLIN et HASTINGS ont remarqué que cette formule (D.20) rend accessible l'entropie de Renyi pour toute méthode Monte-Carlo à température finie à partir du moment où il est possible de simuler l'ensemble modifié de fonction de partition $\mathcal{Z}_A^{(q)}$ [282]. Dans la formule de départ (D.3), il faut introduire des états propagés pour chaque copie et les décomposer selon les deux partitions A et B , $|\alpha\rangle = |\alpha_{r,A}\rangle|\alpha_{r,B}\rangle$, où $r = 1, \dots, q$. Ces états seront alors propagés en tenant compte des nouvelles conditions aux bords. La suite de l'implémentation est ensuite exactement la même que pour la fonction de partition usuelle. La seule différence est qu'il faut maintenant considérer q listes d'opérateurs, chacune d'entre elles ayant ses propres nombres d'opérateurs non identités n_r et son *cutoff* M_r , qui peuvent fluctuer indépendamment d'une copie à l'autre. Les conditions aux bords pour la propagation s'écrivent ainsi de manière plus explicite $|\alpha_{r,B}(M_r)\rangle = |\alpha_{r,B}(0_r)\rangle$ et $|\alpha_{q,A}(M_q)\rangle = |\alpha_{1,A}(0_1)\rangle$ où nous avons noté 0_r l'index de propagation zéro de la copie r . Au niveau des mouvements Monte-Carlo, les mouvements diagonaux se font indépendamment dans chaque copie, et, une fois que les nouvelles conditions aux bords dans la direction de propagation ont été prises en compte, les *updates* de boucles sont inchangés. C'est-à-dire qu'une boucle arrivant aux bords en temps imaginaire dans la région A de la copie q pourra « traverser » vers la copie suivante $q \pm 1$, tandis que si elle passe par un site de la région B elle devra y rester de par les conditions périodiques usuelles, comme sur la Figure D.2. L'entropie de Renyi est alors donnée par une intégration en température, depuis $\beta = 0$

jusqu'à la température inverse d'intérêt. Cela donne [282]

$$S_q(A, \beta) = \frac{1}{1-q} \left(\ln(\mathcal{Z}_A^{(q)}) + q \ln(\mathcal{Z}_A) \right) = -\frac{1}{1-q} \int_0^\beta d\beta' E(A, \beta') + \frac{q}{1-q} \int_0^\beta d\beta' E(\beta'), \quad (\text{D.21})$$

où $E(\beta')$ est l'énergie (D.15) calculée dans l'ensemble habituel, et $E_q(A, \beta') = -\langle \sum_q n_q \rangle / (q\beta')$ « l'énergie calculée » dans l'ensemble modifié $\mathcal{Z}_A^{(q)}$. Cette technique, bien que parfaitement valide, a pour inconvénient de demander une intégration en température. Il faut donc connaître les énergies à un nombre suffisamment grand de températures, et pour obtenir l'entropie à température nulle cela mène à une erreur totale importante, en plus du fait que cela revient à calculer la différence de deux intégrales divergentes [260]. Il faut aussi réaliser deux simulations à chaque température, une dans l'ensemble habituel et une dans l'ensemble modifié.

Par la suite, HUMENIUK et ROSCILDE ont proposé une méthode, que nous appellerons par la suite « méthode dynamique 1 », permettant d'estimer directement, dans une seule simulation et à la température voulue, le rapport des fonctions de partition dans l'expression (D.20) [260]. L'idée de base est de bouger de manière dynamique entre les deux ensembles $\mathcal{Z}_A^{(q)}$ et \mathcal{Z}_A^q au cours de la simulation, c'est-à-dire de coller ou décoller les sites de la région A aux index de propagation $\beta, 2\beta, \dots, (q-1)\beta$. A chaque pas Monte-Carlo, le mouvement est proposé avec la probabilité Métropolis

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\mathcal{Z}_A^q \rightarrow \mathcal{Z}_A^{(q)}) &= \min \left(1, \frac{W_A}{W_\emptyset} \right), \\ \mathcal{P}(\mathcal{Z}_A^{(q)} \rightarrow \mathcal{Z}_A^q) &= \min \left(1, \frac{W_\emptyset}{W_A} \right), \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

où W_A est le poids d'une configuration Monte-Carlo dans l'ensemble modifié $\mathcal{Z}_A^{(q)}$ et W_\emptyset pour les copies indépendantes \mathcal{Z}_A^q . En fait, il est facile de voir que ces deux poids ne peuvent être simultanément non nuls que si les états à l'index de propagation zéro dans chaque copie sont identiques dans la région A , *i.e.* $|\alpha_{1,A}(0_1)\rangle = |\alpha_{2,A}(0_2)\rangle = \dots = |\alpha_{q,A}(0_q)\rangle$. Dans ce cas, les poids sont égaux et le mouvement est toujours accepté. Au niveau pratique, il suffit donc de modifier correctement les conditions aux bords, et là encore les mouvements Monte-Carlo décrits précédemment sont inchangés. L'entropie de Rényi est alors donnée par la moyenne Monte-Carlo du rapport entre les nombres de pas que la simulation a passé dans chacun des deux ensembles :

$$S_q(A) = \frac{1}{1-q} \ln \left\langle \frac{N_A}{N_\emptyset} \right\rangle. \quad (\text{D.23})$$

Autrement dit, à chaque pas Monte-Carlo il suffit de regarder dans quel ensemble nous nous trouvons et de mettre 1 dans le compteur correspondant. Une comparaison théorique du *scaling* des deux méthodes montre que cette dernière est plus performante [260].

5.3 Ratio trick

En pratique, cette méthode dynamique marche bien pour de petites tailles de la région A . Lorsque la taille augmente, la condition permettant le mouvement entre les deux ensembles devient de plus en plus compliquée à satisfaire, la probabilité d'avoir les mêmes états pour chaque copie diminuant même exponentiellement. En effet, nous avons dit précédemment que l'entropie de Rényi doit en principe suivre une loi des aires, *i.e.* $S_q(A) \sim a_q \ell_A^{d-1}$ pour $d \geq 2$, où ℓ_A est la taille linéaire de la région A (nous

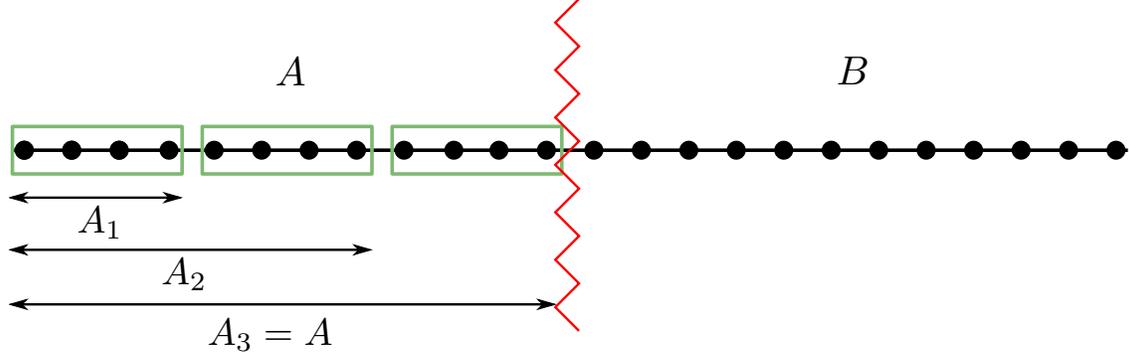


FIGURE D.3 – Illustration du *ratio trick* sur une chaîne de 24 sites. Pour calculer l’entropie du demi-système, le bloc A de 12 sites est construit en partant de $A_0 = \emptyset$ puis en rajoutant des blocs de taille $\Delta A_k = 4$. De cette manière, le taux d’acceptation du mouvement entre les ensembles modifiés A_k et A_{k-1} restera assez élevé au cours de la simulation.

n’avons pas besoin de considérer les termes sous-dominants) [260]. D’après la relation (D.23), cela veut dire que le rapport à estimer varie comme $\exp((1-q)a_q \ell_A^{d-1})$, ce qui est évidemment fortement pénalisant lorsque ℓ_A devient trop important. Dans une telle simulation, les mouvements se font très rares, ou dit autrement les temps d’autocorrélation deviennent trop grands et il n’est plus possible d’obtenir des résultats corrects. A une dimension, l’entropie dans une phase critique varie comme $S_q(A) \sim c(1+1/q)\ln(\ell_A)$ et donc le même problème, certes moins sévère, se pose.

Cette limitation, qui apparaît aussi pour le Monte-Carlo Valence Bond, peut être partiellement réglée par l’utilisation d’un *ratio trick* [280]. La région A peut être construite progressivement comme une suite de régions A_k de tailles croissantes, avec $A_0 = \emptyset$, $A_N = A$, et $A_{k+1} = A_k \cup \Delta A_k$. Dit plus visuellement, pour obtenir la région A nous partons de l’ensemble vide et nous ajoutons pas à pas un petit nombre de sites pour passer de A_k à A_{k+1} . Nous illustrons cette construction sur la Figure D.3, où la partition A de la moitié d’une chaîne de 24 sites est construite en trois étapes par ajout de blocs de quatre sites. Derrière cette astuce, il y a le fait que le rapport des fonctions de partition dans l’expression (D.20) de $S_q(A)$ peut se réécrire comme

$$\frac{\mathcal{Z}_A^{(q)}}{\mathcal{Z}_A^q} = \frac{\mathcal{Z}_A^{(q)}}{\mathcal{Z}_\emptyset^{(q)}} = \frac{\mathcal{Z}_{A_N}^{(q)}}{\mathcal{Z}_{A_{N-1}}^q} \frac{\mathcal{Z}_{A_{N-1}}^{(q)}}{\mathcal{Z}_{A_{N-2}}^q} \cdots \frac{\mathcal{Z}_{A_1}^{(q)}}{\mathcal{Z}_{A_0}^q}. \quad (\text{D.24})$$

Chacun des rapports apparaissant dans cette expression peut alors être calculé séparément dans une simulation. Pour le calcul de $\mathcal{Z}_{A_{N-1}}^{(q)}/\mathcal{Z}_{A_{N-2}}^q$, il faut proposer des mouvements entre les deux ensembles modifiés A_{N-1} et A_{N-2} , et il n’y a aucune différence avec la méthode présentée précédemment pour bouger entre A et $A = \emptyset$. Il est facile de comprendre que si les deux sous-régions ont des tailles assez proches, la probabilité d’acceptation du mouvement restera suffisamment grande pour garder une simulation efficace. L’entropie de Renyi est obtenue en prenant le logarithme de l’expression (D.24), ce qui revient à sommer les résultats des N simulations. Bien entendu, la pénalité du *ratio trick* est qu’il faut également propager les erreurs obtenues pour chaque rapport. En pratique, il faut donc trouver un compromis entre avoir une accumulation d’erreurs trop importante si ΔA_k est trop petit, ou une simulation inefficace s’il est trop grand. L’introduction du *ratio trick* est malgré tout systématiquement un avantage, puisque l’accumulation des erreurs pénalise uniquement d’un facteur \sqrt{N} , tandis que le gain se fait, lui, au niveau de l’exponentielle de l’entropie.

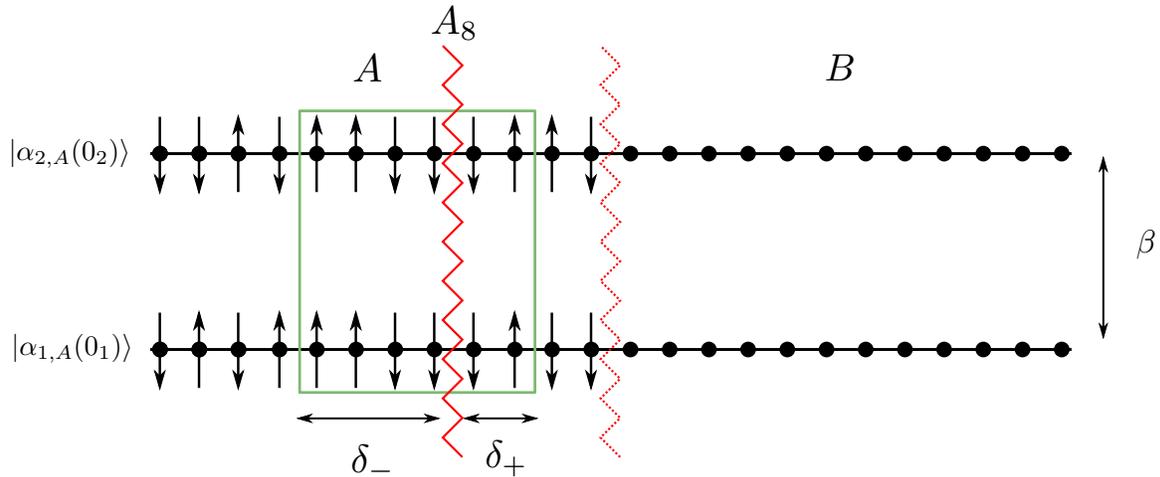


FIGURE D.4 – Illustration du principe de la méthode dynamique 2 sur une chaîne de 24 sites. Pour calculer l’entropie du demi-système, au cours de la simulation, la coupure (ligne rouge pleine) séparant les régions A_k et B va bouger entre $A_0 = \emptyset$ et $A_{12} = A$ (ligne rouge en pointillés). A chaque pas Monte-Carlo, nous regardons quelles sont les $p = \delta_+ + \delta_- + 1$ possibilités de la déplacer et une est choisie avec probabilité $1/p$. Sur cet exemple, la coupure est située à la position A_8 et peut être déplacée à toutes les positions délimitées par le rectangle vert, entre A_4 et A_{10} .

5.4 Méthode dynamique : variante

Finalement, un schéma légèrement différent, proposé par D. SCHWANDT et que nous avons implémenté au cours de cette thèse, est possible. Il consiste à bouger dynamiquement, au cours de la même simulation, non pas uniquement entre A et $A = \emptyset$, mais entre tous les sous-ensembles A_k , en prenant l’incrément minimal $\Delta A_k = 1$ (nous pouvons prendre n’importe quelle taille, mais en pratique il vaut mieux prendre $\Delta A_k = 1$). Avec cette méthode, une seule simulation est requise, et la diminution exponentielle de la probabilité de passer de l’ensemble complètement collé à q copies décollées est contrebalancée par le fait que cela se fait petit à petit. Nous parlerons par la suite de « méthode dynamique 2 ».

Dans cette optique, il est convenable de reformuler la problématique de collage/décollage en termes de déplacement d’une coupure. En effet, si nous revenons à la représentation de l’ensemble $\mathcal{Z}_A^{(q)}$ donné sur la Figure D.2, nous pouvons dire que cette image est équivalente à ce que serait une simulation SSE normale à une température inverse $q\beta$. Passer dans l’ensemble modifié revient à « couper » partiellement aux temps imaginaires $\beta, 2\beta, \dots$, et la position spatiale de la coupure correspond au sous-système A . Dans cette approche, la position de la coupure va être déplacée entre les positions $A_N = A$ et $A_0 = \emptyset$, en passant par toutes les positions intermédiaires. Au cours de la simulation, disons que la coupure est positionnée à la position A_k . A partir de là, nous allons regarder, toujours en utilisant la condition précédente d’avoir les mêmes états dans chaque copie, s’il est possible de déplacer la coupure de un site ($\Delta A_k = 1$) pour *augmenter* la taille de la région collée à A_{k+1} (*i.e.* aller vers la région A). Si oui, nous regardons s’il est possible de le faire pour deux sites, et ainsi de suite jusqu’à ce que la condition ne soit plus remplie. Cela nous donne un nombre δ_+ de sites vérifiant la condition. De la même façon, nous pouvons regarder s’il est possible de déplacer la coupure de façon à *diminuer* la taille de la région collée à A_{k-1} (*i.e.* aller vers les q copies décollées), et similairement nous ob-

tenons un nombre de sites δ_- . De cette façon, nous avons $p = \delta_+ + \delta_- + 1$ choix pour déplacer la coupure (nous autorisons le fait de la laisser à sa position initiale), et une de ces positions est choisie avec probabilité $1/p$. La méthode est illustrée sur la Figure D.4. L'estimateur correspondant est également modifié. Il faut maintenant compter combien de pas Monte-Carlo la simulation passe dans chaque taille de sous-système. Cependant, plutôt que de mettre 1 ou 0 à chaque pas pour le seul sous-système choisi, nous pouvons améliorer la statistique en mettant $1/p$ pour chacun des sous-systèmes $A_{k-\delta_-}, A_{k-\delta_-+1}, \dots, A_{k+\delta_+}$ qui étaient accessibles, puisque nous aurions tout aussi bien pu déplacer la coupure à chacune de ces positions.

Un avantage de cette approche est qu'elle ne nécessite qu'une seule simulation (ce n'est pas complètement vrai à 2D selon la géométrie de A , voir plus bas), et qu'elle nous donne en plus accès non seulement à l'entropie $S_q(A)$, mais également à toutes les entropies intermédiaires $S_q(A_k)$. En effet, puisque nous obtenons les nombres de pas N_k passés dans chaque sous-système, les entropies correspondantes peuvent être calculées selon la formule (D.23). Néanmoins, il est évident que si la région A est trop grande, de la même façon qu'il était difficile de bouger entre l'ensemble modifié et les copies indépendantes précédemment, ici la simulation aura du mal à arriver suffisamment de fois à l'ensemble le plus grand A . La statistique devient alors progressivement de plus en plus mauvaise pour les blocs A_k les plus grands. Dans ce cas, il est possible de combiner cette méthode avec l'utilisation du *ratio trick*, c'est-à-dire en divisant la région A en un petit nombre de blocs, pour lesquels l'entropie sera calculée suivant cette méthode. Le point clé est que la taille de ces blocs, grâce au fait que nous échantillonnons tous les sous-systèmes possibles qu'ils contiennent, peut être nettement plus grande que celle choisie dans la méthode utilisant uniquement le *ratio trick*.

5.5 Exemples

A titre d'exemple, nous montrons sur la Figure D.5 l'entropie S_2 du demi-système pour une chaîne de Heisenberg de longueur $L = 64$, calculée avec les deux méthodes à la température inverse $\beta = 6L$. Les résultats pour la méthode dynamique 1 ont été obtenus avec des incréments $\Delta A_k = 6, 7$. Pour la méthode dynamique 2, nous avons utilisé une seule simulation où les 32 sites sont échantillonnés. Nous mettons également les résultats DMRG pour vérification, et nous voyons que les résultats sont en très bon accord. Nous ne montrons pas les données, mais nous avons aussi eu l'occasion de tester la méthode, pour différentes valeurs de l'indice q , sur d'autres systèmes unidimensionnels, l'échelle à deux montants par exemple, et dans différents régimes de paramètres [283]. Les résultats ont toujours été très satisfaisants lorsque comparés aux résultats de diagonalisation exacte ou de DMRG.

Si l'application de la méthode est directe pour les systèmes 1D, la loi des aires $S_q(A) = a_q \ell_A + \dots$ nécessite de séparer le calcul en deux parties pour les systèmes 2D lorsque nous souhaitons calculer l'entropie du demi-système. Nous traçons sur la Figure D.6 l'entropie S_2 pour le modèle de Heisenberg sur un réseau carré $L = 16$. Deux régimes apparaissent clairement. D'après la loi des aires l'entropie varie comme la surface entre A et B . Or, dans la géométrie utilisée ici où la région A est un cylindre contenant $L \times L/2$ sites (voir Figure D.7 a)), nous avons $\ell_A = 2L$. En voyant la région A comme formée par $L/2$ colonnes de L sites, la plus grande partie de l'entropie est « contenue » dans la première colonne, puisque cela donne déjà $\ell_A = 2L$. Bien sûr, cela ne correspond pas complètement à l'entropie du demi-système, mais il est clair que lorsque nous rajoutons les colonnes suivantes l'entropie évolue peu par rapport à sa variation sur les L premiers sites. Pour la méthode dynamique 1, cela ne change pas grand chose, à part éventuellement adapter la valeur de ΔA_k selon si nous sommes dans la première colonne ou dans les $L/2 - 1$ restantes. Par contre, pour la méthode dynamique 2 il est indispensable de séparer le calcul en deux morceaux, avec d'une part le calcul de l'entropie pour la

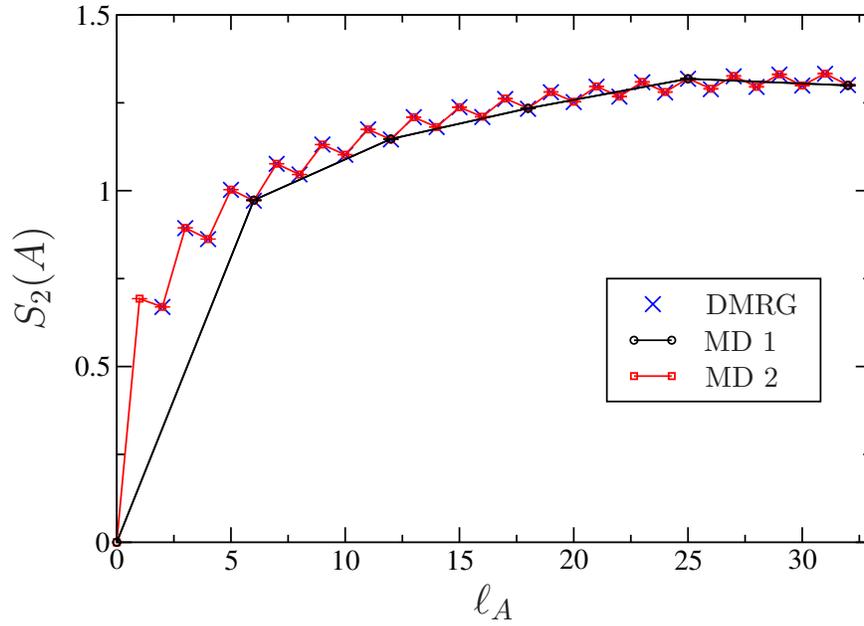


FIGURE D.5 – Entropie de Rényi S_2 en fonction de l_A calculée jusqu’au demi-système d’une chaîne de Heisenberg de longueur $L = 64$ à la température inverse $\beta = 6L$. Nous donnons les résultats obtenus avec les deux méthodes dynamiques 1 et 2 (MD 1 et MD 2), qui sont indistinguables des valeurs DMRG.

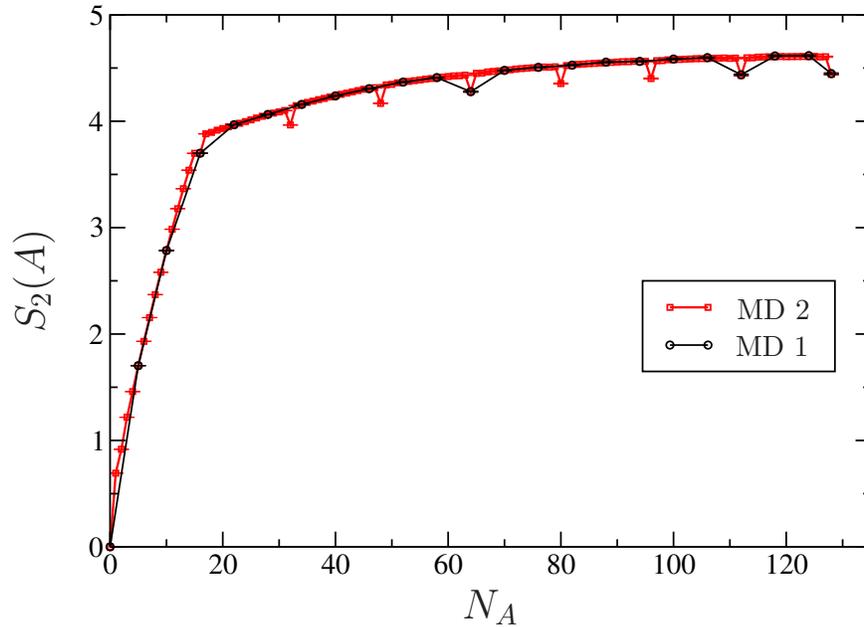


FIGURE D.6 – Entropie de Rényi S_2 calculée jusqu’au demi-système du modèle de Heisenberg sur un réseau carré de taille $L = 64$ à la température inverse $\beta = 5L$. De par la géométrie cylindrique utilisée, nous traçons l’entropie en fonction de N_A le nombre de spins dans la région A . Cela permet de faire apparaître deux régimes différents, dont l’origine provient de la loi des aires et de la géométrie choisie (voir texte).

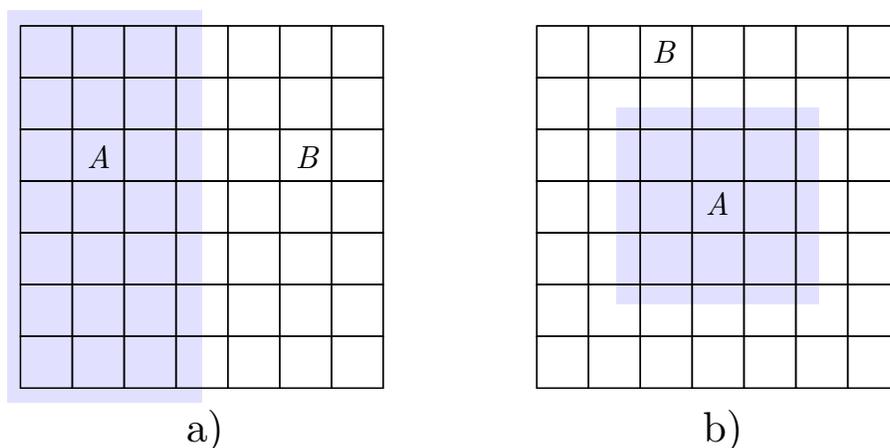


FIGURE D.7 – Les deux géométries de la région A (en bleu) généralement utilisées dans la littérature pour les calculs d’entropies. A gauche a), le sous-système A est un cylindre de $L \times L/2$ sites, et la frontière (lisse) avec le complémentaire B est $\ell_A = 2L$. A droite b), A est un carré de côtés $L/2$ et donc $\ell_A = 2L$ également. La présence d’angles de $\pi/2$ apporte des corrections à la loi des aires par rapport à la géométrie cylindrique. Au cours de cette thèse nous avons utilisé uniquement la géométrie cylindrique.

ligne et d’autre part le reste jusqu’au demi-système (toujours selon la formule (D.24)). En pratique, l’entropie de ligne croît assez vite avec la taille du système, et il peut donc devenir aussi judicieux de la découper à son tour (par exemple en deux parties pour $L = 16$ comme ici, ou plus généralement si $S_2 \gtrsim 3-4$). Pour les $L/2 - 1$ colonnes restantes, la pratique semble indiquer qu’il est préférable de faire le calcul en une seule fois, et c’est ce que nous avons fait sur cet exemple précis. Pour ce modèle 2D il n’y a pas de résultat de référence pour comparer, mais en tout cas les résultats des deux méthodes sur la Figure D.6 sont en bon accord l’un par rapport à l’autre.

Cette géométrie de la région A est couramment utilisée [281, 284, 285] car la frontière entre A et B est lisse, la présence de coins étant connue pour apporter des corrections logarithmiques additives à la loi des aires $\Delta S_q = c_q \ln(\ell_A)$, avec $c_q < 0$ dépendant de l’angle [286]. Elle est de plus similaire à ce qui se fait pour le DMRG 2D [250]. Une autre géométrie est également souvent utilisée [260, 280, 281, 282, 285], où A est un carré de côté $L/2$ (d’où $\ell_A = 2L$ aussi, voir Figure D.7 b)), introduisant ainsi quatre coins, ou angles de $\pi/2$. La différence d’entropie entre ces deux géométries a notamment été utilisée pour calculer la contribution des coins, la partie linéaire de la loi des aires s’annulant car a_q ne semble pas dépendre de la géométrie de A [260, 281, 285]. Nous ne l’avons cependant pas utilisée au cours de cette thèse, mais remarquons simplement que, dans ce cas, le commentaire précédent sur l’entropie contenue majoritairement dans une ligne n’est évidemment plus valable.

Nous terminerons cette annexe par deux remarques. Premièrement, les résultats obtenus pour $q = 2$ présentent généralement des barres d’erreur un peu plus faibles pour la méthode dynamique 2, typiquement de l’ordre de 15-30 %, à nombre de pas Monte-Carlo fixé, pour les calculs que nous avons faits sur le modèle de Heisenberg sur le réseau carré (et dans d’autres cas aussi). La différence n’est cependant pas suffisamment significative pour que nous affirmions qu’elle est réellement plus performante (la différence semblant de plus encore moins importante à 1D). Pour des q plus élevés, il est facile de comprendre que la différence va de toute façon se réduire. En effet, plus q augmente et plus le nombre de choix $p = \delta_+ + \delta_- + 1$ dans la méthode dynamique 2 va diminuer, nécessitant alors

d'employer le *ratio trick* avec des blocs de plus en plus petits (et dans la méthode 1 aussi). Les deux méthodes deviennent alors similaires. Deuxièmement, si l'entropie de Rényi $S_q(A)$ est indépendante de la base dans laquelle elle est calculée, *l'efficacité* des deux méthodes dynamiques dépend, elle, de la base. Par exemple, la base S^z est bien adaptée pour le modèle de Heisenberg, mais pour un modèle XY il est préférable de se placer dans la base S^x [283].

Bibliographie

- [1] T. Giamarchi, *Quantum physics in one dimension* International Series of Monographs on Physics (Oxford University Press, 2003).
- [2] W. Marshall, “Antiferromagnetism,” *Proc. R. Soc. A* **232**, 48 (1955).
- [3] H. J. Schulz and T. A. L. Ziman, “Finite-size scaling for the two-dimensional frustrated quantum Heisenberg antiferromagnet,” *Europhys. Lett.* **18**, 355 (1992).
- [4] A. W. Sandvik, “Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional Heisenberg model,” *Phys. Rev. B* **56**, 11678 (1997).
- [5] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, “Valence bond ground-states in isotropic quantum antiferromagnets,” *Commun. Math. Phys.* **115**, 477 (1988).
- [6] J. D. Reger, J. A. Riera, and A. P. Young, “Monte-Carlo simulations of the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet in two dimensions,” *J. Phys. : Condens. Matter* **1**, 1855 (1989).
- [7] J. 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).
- [8] F. J. Dyson, E. H. Lieb, and B. Simon, “Phase transitions in quantum spin systems with isotropic and nonisotropic interactions,” *J. Stat. Phys.* **18**, 335 (1978).
- [9] T. Kennedy, E. H. Lieb, and B. S. Shastry, “Existence of Néel order in some spin-1/2 Heisenberg antiferromagnets,” *J. Stat. Phys.* **53**, 1019 (1988).
- [10] N. D. Mermin and H. Wagner, “Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models,” *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [11] S. Coleman, “There are no Goldstone bosons in two dimensions,” *Commun. Math. Phys.* **31**, 259 (1973).
- [12] F. D. M. Haldane, “Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets : semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state,” *Phys. Rev. Lett.* **50**, 1153 (1983).
- [13] P. W. Anderson, “An approximate quantum theory of the antiferromagnetic ground state,” *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952).
- [14] T. Oguchi, “Theory of spin-wave interactions in ferro- and antiferromagnetism,” *Phys. Rev.* **117**, 117 (1960).
- [15] C. J. Hamer, W. Zheng, and P. Arndt, “Third-order spin-wave theory for the Heisenberg antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **46**, 6276 (1992).
- [16] J. Igarashi, “1/S expansion for thermodynamic quantities in a two-dimensional Heisenberg antiferromagnet at zero temperature,” *Phys. Rev. B* **46**, 10763 (1992).

-
- [17] R. R. P. Singh, “Thermodynamic parameters of the $T = 0$, spin-1/2 square lattice Heisenberg antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **39**, 9760 (1989).
- [18] J. Oitmaa, C. J. Hamer, and W. Zheng, “Quantum magnets on the honeycomb and triangular lattices at $T = 0$,” *Phys. Rev. B* **45**, 9834 (1992).
- [19] 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**, 10048 (1994).
- [20] L. Capriotti, A. E. Trumper, and S. Sorella, “Long-range Néel order in the triangular Heisenberg model,” *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3899 (1999).
- [21] S. R. White and A. L. Chernyshev, “Néel order in square and triangular lattice Heisenberg models,” *Phys. Rev. Lett.* **99**, 127004 (2007).
- [22] J. Vannimenus and G. Toulouse, “Theory of the frustration effect. II. Ising spins on a square lattice,” *J. Phys. C : Solid State Phys.* **10**, L537 (1977).
- [23] 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**, 855 (1992).
- [24] D. A. Huse and A. D. Rutenberg, “Classical antiferromagnets on the Kagomé lattice,” *Phys. Rev. B* **45**, 7536 (1992).
- [25] J. N. Reimers and A. J. Berlinsky, “Order by disorder in the classical Heisenberg Kagomé antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **48**, 9539 (1993).
- [26] A. Läuchli, J. C. Domenge, C. Lhuillier, P. Sindzingre, and M. Troyer, “Two-step restoration of SU(2) symmetry in a frustrated ring-exchange magnet,” *Phys. Rev. Lett.* **95**, 137206 (2005).
- [27] T. Momoi, P. Sindzingre, and N. Shannon, “Octupolar order in the multiple spin exchange model on a triangular lattice,” *Phys. Rev. Lett.* **97**, 257204 (2006).
- [28] 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**, 501 (1998).
- [29] F. Mila, “Low-energy sector of the $S = 1/2$ Kagomé antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2356 (1998).
- [30] C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, *Introduction to frustrated magnetism* Springer Series in Solid-State Sciences (Springer, 2011).
- [31] C. Lhuillier and G. Misguich, “Frustrated quantum magnets,” in *High magnetic fields*, edited by C. Berthier, L. P. Lévy, and G. Martinez volume 595 of *Lecture Notes in Physics* pp. 161–190 Springer Verlag 2002.
- [32] M. E. Zhitomirsky and T. Nikuni, “Magnetization curve of a square-lattice Heisenberg antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **57**, 5013 (1998).
- [33] A. Lüscher and A. M. Läuchli, “Exact diagonalization study of the antiferromagnetic spin-1/2 Heisenberg model on the square lattice in a magnetic field,” *Phys. Rev. B* **79**, 195102 (2009).
- [34] I. Affleck, “Bose condensation in quasi-one-dimensional antiferromagnets in strong fields,” *Phys. Rev. B* **43**, 3215 (1991).
- [35] E. H. Lieb, T. Schultz, and D. C. Mattis, “Two soluble models of an antiferromagnetic chain,” *Ann. Phys.* **16**, 407 (1961).

- [36] M. Oshikawa, M. Yamanaka, and I. Affleck, "Magnetization plateaus in spin chains : "Haldane gap" for half-integer spins," *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997).
- [37] K. Totsuka, "Magnetization plateau in the $S = 1/2$ Heisenberg spin chain with next-nearest-neighbor and alternating nearest-neighbor interactions," *Phys. Rev. B* **57**, 3454 (1998).
- [38] I. Affleck, "Spin gap and symmetry breaking in CuO_2 layers and other antiferromagnets," *Phys. Rev. B* **37**, 5186 (1988).
- [39] N. E. Bonesteel, "Valence bonds and the Lieb-Schultz-Mattis theorem," *Phys. Rev. B* **40**, 8954 (1989).
- [40] M. Oshikawa, "Commensurability, excitation gap, and topology in quantum many-particle systems on a periodic lattice," *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1535 (2000).
- [41] M. B. Hastings, "Lieb-Schultz-Mattis in higher dimensions," *Phys. Rev. B* **69**, 104431 (2004).
- [42] P. Lecheminant, "One-dimensional quantum spin liquids," in *Frustrated spin systems*, edited by H. T. Diep pp. 307–366 World Scientific 2005.
- [43] G. Sierra, "On the application of the non-linear sigma model to spin chains and spin ladders," in *Strongly Correlated Magnetic and Superconducting Systems*, edited by G. Sierra and M. Martín-Delgado volume 478 of *Lecture Notes in Physics* pp. 137–166 Springer Berlin 1997.
- [44] S. R. White, R. M. Noack, and D. J. Scalapino, "Resonating valence bond theory of coupled Heisenberg chains," *Phys. Rev. Lett.* **73**, 886 (1994).
- [45] C. K. Majumdar and D. K. Ghosh, "On next-nearest-neighbor interaction in linear chain. I," *J. Math. Phys.* **10**, 1388 (1969).
- [46] C. K. Majumdar and D. K. Ghosh, "On next-nearest-neighbor interaction in linear chain. II," *J. Math. Phys.* **10**, 1399 (1969).
- [47] K. Okamoto and K. Nomura, "Fluid-dimer critical point in $S = 1/2$ antiferromagnetic Heisenberg chain with next nearest neighbor interactions," *Phys. Lett. A* **169**, 433 (1992).
- [48] T. Hikihara, T. Momoi, A. Furusaki, and H. Kawamura, "Magnetic phase diagram of the spin-1/2 antiferromagnetic zigzag ladder," *Phys. Rev. B* **81**, 224433 (2010).
- [49] F. Heidrich-Meisner, I. A. Sergienko, A. E. Feiguin, and E. R. Dagotto, "Universal emergence of the one-third plateau in the magnetization process of frustrated quantum spin chains," *Phys. Rev. B* **75**, 064413 (2007).
- [50] K. Okunishi, Y. Hieida, and Y. Akutsu, "Middle-field cusp singularities in the magnetization process of one-dimensional quantum antiferromagnets," *Phys. Rev. B* **60**, R6953 (1999).
- [51] H. Kikuchi, M. Chiba, and T. Kubo, "Possible gapless chiral phase in a frustrated $S = 1$ 1D anti-ferromagnet, CaV_2O_4 ," *Can. J. Phys.* **79**, 1551 (2001).
- [52] T. Masuda, T. Sakaguchi, and K. Uchinokura, "Magnetism of a new spin-1 material $\text{NaV}(\text{WO}_4)_2$," *J. Phys. Soc. Jpn.* **71**, 2637 (2002).
- [53] M. Hase, H. Kuroe, K. Ozawa, O. Suzuki, H. Kitazawa, G. Kido, and T. Sekine, "Magnetic properties of $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ including a one-dimensional spin-1/2 Heisenberg system with ferromagnetic first-nearest-neighbor and antiferromagnetic second-nearest-neighbor exchange interactions," *Phys. Rev. B* **70**, 104426 (2004).
- [54] W. Shiramura, K. Takatsu, B. Kurniawan, H. Tanaka, H. Uekusa, Y. Ohashi, K. Takizawa, H. Mitamura, and T. Goto, "Magnetization plateaus in NH_4CuCl_3 ," *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 1548 (1998).

- [55] B. Kurniawan, H. Tanaka, K. Takatsu, W. Shiramura, T. Fukuda, H. Nojiri, and M. Motokawa, “ESR study of the opening and closing of the field-induced gap in NH_4CuCl_3 ,” *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1281 (1999).
- [56] M. Matsumoto, “Microscopic model for the magnetization plateaus in NH_4CuCl_3 ,” *Phys. Rev. B* **68**, 180403 (2003).
- [57] S. Yamamoto, “Critical exponent η in $S = 1$ antiferromagnetic Heisenberg chains with alternating interaction,” *Phys. Rev. B* **52**, 10170 (1995).
- [58] I. Affleck and F. D. M. Haldane, “Critical theory of quantum spin chains,” *Phys. Rev. B* **36**, 5291 (1987).
- [59] T. Tonegawa, T. Nakao, and M. Kaburagi, “Ground-state phase diagram and magnetization curves of the spin-1 antiferromagnetic Heisenberg chain with bond alternation and uniaxial single-ion-type anisotropy,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 3317 (1996).
- [60] Y. Narumi, M. Hagiwara, R. Sato, K. Kindo, H. Nakano, and M. Takahashi, “High field magnetization in an $S = 1$ antiferromagnetic chain with bond alternation,” *Physica B* **246-247**, 509 (1998).
- [61] G. Castilla, S. Chakravarty, and V. J. Emery, “Quantum magnetism of CuGeO_3 ,” *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1823 (1995).
- [62] M. Hase, I. Terasaki, and K. Uchinokura, “Observation of the spin-Peierls transition in linear Cu^{2+} (spin-1/2) chains in an inorganic compound CuGeO_3 ,” *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3651 (1993).
- [63] M. Nishi, O. Fujita, and J. Akimitsu, “Neutron-scattering study on the spin-Peierls transition in a quasi-one-dimensional magnet CuGeO_3 ,” *Phys. Rev. B* **50**, 6508 (1994).
- [64] P. R. Hammar and D. H. Reich, “ $\text{Cu}_2(1,4\text{-diazacycloheptane})_2\text{Cl}_4$: A quasi-one-dimensional $S = 1/2$ spin liquid system,” *J. Appl. Phys.* **79**, 5392 (1996).
- [65] M. Hagiwara, Y. Narumi, K. Kindo, T. Nishida, M. Kaburagi, and T. Tonegawa, “High-field magnetization process of a spin liquid system $\text{Cu}_2(1,4\text{-diazacycloheptane})_2\text{Cl}_4$,” *Physica B* **246-247**, 234 (1998).
- [66] K. Takano, K. Kubo, and H. Sakamoto, “Ground states with cluster structures in a frustrated Heisenberg chain,” *J. Phys. : Condens. Matter* **8**, 6405 (1996).
- [67] D. Uematsu and M. Sato, “Magnetic properties of $\text{Cu}_3(\text{TeO}_3)_2\text{Br}_2$ with spin-1/2 diamond lattice,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 084712 (2007).
- [68] A. Honecker and A. Läuchli, “Frustrated trimer chain model and $\text{Cu}_3\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 2\text{H}_8\text{C}_4\text{SO}_2$ in a magnetic field,” *Phys. Rev. B* **63**, 174407 (2001).
- [69] K. Okamoto, T. Tonegawa, and M. Kaburagi, “Magnetic properties of the $S = 1/2$ distorted diamond chain at $T = 0$,” *J. Phys. : Condens. Matter* **15**, 5979 (2003).
- [70] H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, and H. Ohta, “Experimental observation of the 1/3 magnetization plateau in the diamond-chain compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$,” *Phys. Rev. Lett.* **94**, 227201 (2005).
- [71] H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, and T. Idehara, “Magnetic properties of the frustrated diamond chain compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$,” *Physica B* **329-333**, 967 (2003).
- [72] K. C. Rule, A. U. B. Wolter, S. Süllow, D. A. Tennant, A. Brühl, S. Köhler, B. Wolf, M. Lang, and J. Schreuer, “Nature of the spin dynamics and 1/3 magnetization plateau in azurite,” *Phys. Rev. Lett.* **100**, 117202 (2008).

- [73] K. C. Rule, D. A. Tennant, J.-S. Caux, M. C. R. Gibson, M. T. F. Telling, S. Gerischer, S. Söllow, and M. Lang, “Dynamics of azurite $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ in a magnetic field as determined by neutron scattering,” *Phys. Rev. B* **84**, 184419 (2011).
- [74] H. Jeschke, I. Opahle, H. Kandpal, R. Valenti, H. Das, T. Saha-Dasgupta, O. Janson, H. Rosner, A. Brühl, B. Wolf, M. Lang, J. Richter, S. Hu, X. Wang, R. Peters, T. Pruschke, and A. Honecker, “Multistep approach to microscopic models for frustrated quantum magnets : the case of the natural mineral azurite,” *Phys. Rev. Lett.* **106**, 217201 (2011).
- [75] A. Honecker, F. Mila, and M. Troyer, “Magnetization plateaux and jumps in a class of frustrated ladders : A simple route to a complex behaviour,” *Eur. Phys. J. B* **15**, 227 (2000).
- [76] F. Mila, “Ladders in a magnetic field : a strong coupling approach,” *Eur. Phys. J. B* **6**, 201 (1998).
- [77] M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, and Y. Kitaoka, “Observation of a spin gap in SrCu_2O_3 comprising spin-1/2 quasi-1D two-leg ladders,” *Phys. Rev. Lett.* **73**, 3463 (1994).
- [78] E. Dagotto, “Experiments on ladders reveal a complex interplay between a spin-gapped normal state and superconductivity,” *Rep. Prog. Phys.* **62**, 1525 (1999).
- [79] K. Kojima, A. Keren, G. M. Luke, B. Nachumi, W. D. Wu, Y. J. Uemura, M. Azuma, and M. Takano, “Magnetic behavior of the 2-leg and 3-leg spin ladder cuprates $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$,” *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2812 (1995).
- [80] T. Vekua, D. C. Cabra, A. Dobry, C. Gazza, and D. Poilblanc, “Magnetization plateaus induced by a coupling to the lattice,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 117205 (2006).
- [81] K. Hida and I. Affleck, “Quantum vs classical magnetization plateaus of $S = 1/2$ frustrated Heisenberg chains,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 1849 (2005).
- [82] G. Chaboussant, P. A. Crowell, L. P. Lévy, O. Piovesana, A. Madouri, and D. Mailly, “Experimental phase diagram of $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$: a quasi-one-dimensional antiferromagnetic spin-Heisenberg ladder,” *Phys. Rev. B* **55**, 3046 (1997).
- [83] M. E. Zhitomirsky, A. Honecker, and O. A. Petrenko, “Field induced ordering in highly frustrated antiferromagnets,” *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3269 (2000).
- [84] R. Melzi, P. Carretta, A. Lascialfari, M. Mambrini, M. Troyer, P. Millet, and F. Mila, “ $\text{Li}_2\text{VO}(\text{Si},\text{Ge})\text{O}_4$, a prototype of a two-dimensional frustrated quantum Heisenberg antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1318 (2000).
- [85] R. Melzi, S. Aldrovandi, F. Tedoldi, P. Carretta, P. Millet, and F. Mila, “Magnetic and thermodynamic properties of $\text{Li}_2\text{VOSiO}_4$: A two-dimensional $S = 1/2$ frustrated antiferromagnet on a square lattice,” *Phys. Rev. B* **64**, 024409 (2001).
- [86] A. A. Tsirlin, B. Schmidt, Y. Skourski, R. Nath, C. Geibel, and H. Rosner, “Exploring the spin-1/2 frustrated square lattice model with high-field magnetization studies,” *Phys. Rev. B* **80**, 132407 (2009).
- [87] Y. Tsujimoto, Y. Baba, N. Oba, H. Kageyama, T. Fukui, Y. Narumi, K. Kindo, T. Saito, M. Takano, Y. Ajiro, and K. Yoshimura, “1/3 magnetization plateau in spin-1/2 square lattice antiferromagnet (CuBr) $\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 063711 (2007).
- [88] Y. Fukumoto and A. Oguchi, “Magnetization process in two-dimensional coupled plaquette system on the 1/5-depleted square lattice,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 3655 (1999).
- [89] G. Misguich, “Quantum spin liquids,” *ArXiv e-prints* (2008) cond-mat/0809.2257.

- [90] Y. Tsujimoto, H. Kageyama, Y. Baba, A. Kitada, T. Yamamoto, Y. Narumi, K. Kindo, M. Nishi, J. P. Carlo, A. A. Aczel, T. J. Williams, T. Goko, G. M. Luke, Y. J. Uemura, Y. Ueda, Y. Ajiro, and K. Yoshimura, "Synthesis, structure, and magnetic properties of the two-dimensional quantum antiferromagnets $(\text{CuBr})\text{A}_2\text{B}_3\text{O}_{10}$ ($\text{A} = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}, \text{Pb}$, $\text{B} = \text{Nb}, \text{Ta}$) with the $1/3$ magnetization plateau," *Phys. Rev. B* **78**, 214410 (2008).
- [91] S. M. Yusuf, A. K. Bera, C. Ritter, Y. Tsujimoto, Y. Ajiro, H. Kageyama, and J. P. Attfield, "Magnetic correlation in the square-lattice spin system $(\text{CuBr})\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$: a neutron diffraction study," *Phys. Rev. B* **84**, 064407 (2011).
- [92] C. Ritter, S. M. Yusuf, A. K. Bera, Y. Goto, C. Tassel, H. Kageyama, A. M. Arévalo-López, and J. P. Attfield, "Field-induced evolution of magnetic ordering in the quantum spin system $(\text{CuBr})\text{Sr}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ with a $1/3$ magnetization plateau," *Phys. Rev. B* **88**, 104401 (2013).
- [93] S. Taniguchi, T. Nishikawa, Y. Yasui, Y. Kobayashi, M. Sato, T. Nishioka, M. Kontani, and K. Sano, "Spin gap behavior of $S = 1/2$ quasi-two-dimensional system CaV_4O_9 ," *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 2758 (1995).
- [94] H. Kawamura and S. Miyashita, "Phase transition of the Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice in a magnetic field," *J. Phys. Soc. Jpn.* **54**, 4530 (1985).
- [95] A. V. Chubokov and D. I. Golosov, "Quantum theory of an antiferromagnet on a triangular lattice in a magnetic field," *J. Phys. : Condens. Matter* **3**, 69 (1991).
- [96] D. Yamamoto, G. Marmorini, and I. Danshita, "Quantum phase diagram of the triangular-lattice XXZ model in a magnetic field," *Phys. Rev. Lett.* **112**, 127203 (2014).
- [97] H. Tanaka, T. Ono, H. A. Katori, H. Mitamura, F. Ishikawa, and T. Goto, "Magnetic phase transition and magnetization plateau in Cs_2CuBr_4 ," *Progr. Theor. Phys. Supp.* **145**, 101 (2002).
- [98] T. Ono, H. Tanaka, H. Aruga Katori, F. Ishikawa, H. Mitamura, and T. Goto, "Magnetization plateau in the frustrated quantum spin system Cs_2CuBr_4 ," *Phys. Rev. B* **67**, 104431 (2003).
- [99] J. Alicea, A. V. Chubokov, and O. A. Starykh, "Quantum stabilization of the $1/3$ -magnetization plateau in Cs_2CuBr_4 ," *Phys. Rev. Lett.* **102**, 137201 (2009).
- [100] T. Ono, H. Tanaka, O. Kolomiyets, H. Mitamura, T. Goto, K. Nakajima, A. Oosawa, Y. Koike, K. Kakurai, J. Klenke, P. Smeibidle, and M. Meißner, "Magnetization plateaux of the $S = 1/2$ two-dimensional frustrated antiferromagnet Cs_2CuBr_4 ," *J. Phys. : Condens. Matter* **16**, S773 (2004).
- [101] T. Susuki, N. Kurita, T. Tanaka, H. Nojiri, A. Matsuo, K. Kindo, and H. Tanaka, "Magnetization process and collective excitations in the $S = 1/2$ triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet $\text{Ba}_3\text{CoSb}_2\text{O}_9$," *Phys. Rev. Lett.* **110**, 267201 (2013).
- [102] K. Onizuka, H. Kageyama, Y. Narumi, K. Kindo, Y. Ueda, and T. Goto, " $1/3$ magnetization plateau in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ - stripe order of excited triplets," *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 1016 (2000).
- [103] K. Kodama, M. Takigawa, M. Horvatic, C. Berthier, H. Kageyama, Y. Ueda, S. Miyahara, F. Becca, and F. Mila, "Magnetic superstructure in the two-dimensional quantum antiferromagnet $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$," *Science* **298**, 395 (2002).
- [104] H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern, N. V. Mushnikov, K. Onizuka, M. Kato, K. Kosuge, C. P. Slichter, T. Goto, and Y. Ueda, "Exact dimer ground state and quantized magnetization plateaus in the two-dimensional spin system $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$," *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3168 (1999).
- [105] A. Abendschein and S. Capponi, "Effective theory of magnetization plateaux in the Shastry-Sutherland lattice," *Phys. Rev. Lett.* **101**, 227201 (2008).

- [106] Y. H. Matsuda, N. Abe, S. Takeyama, H. Kageyama, P. Corboz, A. Honecker, S. R. Manmana, G. R. Foltin, K. P. Schmidt, and F. Mila, “Magnetization of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ in ultrahigh magnetic fields up to 118 T,” *Phys. Rev. Lett.* **111**, 137204 (2013).
- [107] S. Miyahara and K. Ueda, “Theory of the orthogonal dimer Heisenberg spin model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$,” *J. Phys. : Condens. Matter* **15**, R327 (2003).
- [108] H. Schulz, “Coupled luttinger liquids,” in *Strongly Correlated Magnetic and Superconducting Systems*, edited by G. Sierra and M. Martín-Delgado volume 478 of *Lecture Notes in Physics* p. 136 Springer Berlin / Heidelberg 1997.
- [109] K. Kawano and M. Takahashi, “Three-leg antiferromagnetic Heisenberg ladder with frustrated boundary condition; ground state properties,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **66**, 4001 (1997).
- [110] S. Nishimoto and M. Arikawa, “Low-lying excitations of the three-leg spin tube : a density-matrix renormalization group study,” *Phys. Rev. B* **78**, 054421 (2008).
- [111] T. Sakai, M. Sato, K. Okunishi, Y. Otsuka, K. Okamoto, and C. Itoi, “Quantum phase transitions of the asymmetric three-leg spin tube,” *Phys. Rev. B* **78**, 184415 (2008).
- [112] T. Sakai, M. Sato, K. Okamoto, K. Okunishi, and C. Itoi, “Quantum spin nanotubes - frustration, competing orders and criticalities,” *J. Phys. : Condens. Matter* **22**, 403201 (2010).
- [113] Y. Fuji, S. Nishimoto, H. Nakada, and M. Oshikawa, “Quantum criticality in an asymmetric three-leg spin tube : a strong rung-coupling perspective,” *Phys. Rev. B* **89**, 054425 (2014).
- [114] K. Tandon, S. Lal, S. K. Pati, S. Ramasesha, and D. Sen, “Magnetization properties of some quantum spin ladders,” *Phys. Rev. B* **59**, 396 (1999).
- [115] E. Orignac, R. Citro, and N. Andrei, “Low-energy behavior of the spin-tube and spin-orbital models,” *Phys. Rev. B* **61**, 11533 (2000).
- [116] R. Citro, E. Orignac, N. Andrei, C. Itoi, and S. Qin, “Effective theory of magnetization plateaus in a three-leg ladder with periodic boundary conditions,” *J. Phys. : Condens. Matter* **12**, 3041 (2000).
- [117] M. Sato, “Coexistence of vector chiral order and Tomonaga-Luttinger liquid in the frustrated three-leg spin tube in a magnetic field,” *Phys. Rev. B* **75**, 174407 (2007).
- [118] M. Sato and T. Sakai, “Vector chirality and inhomogeneous magnetization in frustrated spin tubes in high magnetic fields,” *Phys. Rev. B* **75**, 014411 (2007).
- [119] S. Nishimoto, Y. Fuji, and Y. Ohta, “Spin gap of the three-leg $S = 3/2$ Heisenberg tube,” *Phys. Rev. B* **83**, 224425 (2011).
- [120] M. Sato, “ N -leg integer-spin ladders and tubes in commensurate external fields : nonlinear sigma model approach,” *Phys. Rev. B* **72**, 104438 (2005).
- [121] M. Sato, “Low-lying magnon excitations in integer-spin ladders and tubes,” *J. Phys. Chem. Sol.* **66**, 1454 (2005).
- [122] M. Sato and M. Oshikawa, “Magnon bands of N -leg integer-spin antiferromagnetic systems in the weak-interchain-coupling regime,” *Phys. Rev. B* **75**, 014404 (2007).
- [123] D. Charrier, S. Capponi, M. Oshikawa, and P. Pujol, “Quantum phase transitions in three-leg spin tubes,” *Phys. Rev. B* **82**, 075108 (2010).
- [124] J.-B. Fouet, A. Läuchli, S. Pilgram, R. M. Noack, and F. Mila, “Frustrated three-leg spin tubes : from spin-1/2 with chirality to spin-3/2,” *Phys. Rev. B* **73**, 014409 (2006).

- [125] J. Schnack, H. Nojiri, P. Kögerler, G. J. T. Cooper, and L. Cronin, “Magnetic characterization of the frustrated three-leg ladder compound $[(\text{CuCl}_2\text{tachH})_3\text{Cl}]\text{Cl}_2$,” *Phys. Rev. B* **70**, 174420 (2004).
- [126] N. B. Ivanov, J. Schnack, R. Schnalle, J. Richter, P. Kögerler, G. N. Newton, L. Cronin, Y. Oshima, and H. Nojiri, “Heat capacity reveals the physics of a frustrated spin tube,” *Phys. Rev. Lett.* **105**, 037206 (2010).
- [127] P. Millet, J. Y. Henry, F. Mila, and J. Galy, “Vanadium(IV)-oxide nanotubes : crystal structure of the low-dimensional quantum magnet $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$,” *J. Solid State Chem.* **147**, 676 (1999).
- [128] J. L. Gavilano, D. Rau, S. Mushkolaj, H. R. Ott, P. Millet, and F. Mila, “Low-dimensional spin $S = 1/2$ system at the quantum critical limit : $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$,” *Phys. Rev. Lett.* **90**, 167202 (2003).
- [129] J. L. Gavilano, E. Felder, D. Rau, H. R. Ott, P. Millet, F. Mila, T. Cichorek, and A. C. Mota, “Unusual magnetic properties of the low-dimensional quantum magnet $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$,” *Phys. Rev. B* **72**, 064431 (2005).
- [130] T. Saha-Dasgupta, R. Valentí, F. Capraro, and C. Gros, “ $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$: a frustrated nanotubular system with spin-1/2 diamond ring geometry,” *Phys. Rev. Lett.* **95**, 107201 (2005).
- [131] V. V. Mazurenko, F. Mila, and V. I. Anisimov, “Electronic structure and exchange interactions of $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$,” *Phys. Rev. B* **73**, 014418 (2006).
- [132] O. Zaharko, J. L. Gavilano, T. Strässle, C. F. Miclea, A. C. Mota, Y. Filinchuk, D. Chernyshov, P. P. Deen, B. Rahaman, T. Saha-Dasgupta, R. Valentí, Y. Matsushita, A. Dönni, and H. Kitazawa, “Structural and magnetic aspects of the nanotube system $\text{Na}_2 - x\text{V}_3\text{O}_7$,” *Phys. Rev. B* **78**, 214426 (2008).
- [133] H. Manaka, Y. Hirai, Y. Hachigo, M. Mitsunaga, M. Ito, and N. Terada, “Spin-liquid state study of equilateral triangle $S = 3/2$ spin tubes formed in CsCrF_4 ,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 093701 (2009).
- [134] H. Manaka, T. Etoh, Y. Honda, N. Iwashita, K. Ogata, N. Terada, T. Hisamatsu, M. Ito, Y. Narumi, A. Kondo, K. Kindo, and Y. Miura, “Effects of geometrical spin frustration on triangular spin tubes formed in CsCrF_4 and $\alpha\text{-KCrF}_4$,” *J. Phys. Soc. Jpn.* **80**, 084714 (2011).
- [135] V. O. Garlea, A. Zheludev, L.-P. Regnault, J.-H. Chung, Y. Qiu, M. Boehm, K. Habicht, and M. Meissner, “Excitations in a four-leg antiferromagnetic Heisenberg spin tube,” *Phys. Rev. Lett.* **100**, 037206 (2008).
- [136] A. Zheludev, V. O. Garlea, L.-P. Regnault, H. Manaka, A. Tsvelik, and J.-H. Chung, “Extended universal finite- T renormalization of excitations in a class of one-dimensional quantum magnets,” *Phys. Rev. Lett.* **100**, 157204 (2008).
- [137] V. O. Garlea, A. Zheludev, K. Habicht, M. Meissner, B. Grenier, L.-P. Regnault, and E. Ressouche, “Dimensional crossover in a spin-liquid-to-helimagnet quantum phase transition,” *Phys. Rev. B* **79**, 060404 (2009).
- [138] M. Fujisawa, H. Tanaka, and T. Sakakibara, “Magnetic field-induced phase transition in quantum spin system $\text{Cu}_2\text{Cl}_4 \cdot \text{H}_8\text{C}_4\text{SO}_2$,” *Progr. Theor. Phys. Supp.* **159**, 212 (2005).
- [139] E. Fradkin, *Field theories of condensed matter systems* Frontiers in Physics (Book 82) (Perseus Books (Sd), 1991).
- [140] J. R. Klauder, “Path integrals and stationary-phase approximations,” *Phys. Rev. D* **19**, 2349 (1979).

- [141] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals* International Series in Pure and Applied Physics (McGraw-Hill Publishing Company, 1965).
- [142] M. Suzuki, “Relationship between d -dimensional quantal spin systems and $(d + 1)$ -Dimensional Ising systems : equivalence, critical exponents and systematic approximants of the partition function and spin correlations,” *Progr. Theor. Phys.* **56**, 1454 (1976).
- [143] M. V. Berry, “Quantal phase factors accompanying adiabatic changes,” *Proc. R. Soc. A* **392**, 45 (1984).
- [144] M. V. Berry, “Classical adiabatic angles and quantal adiabatic phase,” *J. Phys. Math. Gen.* **18**, 15 (1985).
- [145] A. Tanaka, K. Totsuka, and X. Hu, “Geometric phases and the magnetization process in quantum antiferromagnets,” *Phys. Rev. B* **79**, 064412 (2009).
- [146] D. H. Lee and M. P. A. Fisher, “Anyon superconductivity and charge-vortex duality,” *Int. J. Mod. Phys. B* **5**, 2675 (1991).
- [147] K. Totsuka, “Magnetization processes in bond-alternating quantum spin chains,” *Phys. Lett. A* **228**, 103 (1997).
- [148] A. M. Tsvelik, *Quantum field theory in condensed matter physics* (Cambridge University Press, 2007).
- [149] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, “Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems,” *J. Phys. C : Solid State Phys.* **6**, 1181 (1973).
- [150] L. Seabra, T. Momoi, P. Sindzingre, and N. Shannon, “Phase diagram of the classical Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice in an applied magnetic field,” *Phys. Rev. B* **84**, 214418 (2011).
- [151] G. Delfino and G. Mussardo, “Non-integrable aspects of the multi-frequency sine-Gordon model,” *Nucl. Phys. B* **516**, 675 (1998).
- [152] P. Jordan and E. Wigner, “Über das Paulische Äquivalenzverbot,” *Z. Phys.* **47**, 631 (1928).
- [153] C. J. Morningstar and M. Weinstein, “Contractor renormalization group method : a new computational technique for lattice systems,” *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1873 (1994).
- [154] C. J. Morningstar and M. Weinstein, “Contractor renormalization group technology and exact Hamiltonian real-space renormalization group transformations,” *Phys. Rev. D* **54**, 4131 (1996).
- [155] S. Capponi, A. Läuchli, and M. Mambrini, “Numerical contractor renormalization method for quantum spin models,” *Phys. Rev. B* **70**, 104424 (2004).
- [156] R. Budnik and A. Auerbach, “Low-energy singlets in the Heisenberg antiferromagnet on the Kagomé lattice,” *Phys. Rev. Lett.* **93**, 187205 (2004).
- [157] A. Abendschein and S. Capponi, “Contractor-renormalization approach to frustrated magnets in a magnetic field,” *Phys. Rev. B* **76**, 064413 (2007).
- [158] K. Okunishi, M. Sato, T. Sakai, K. Okamoto, and C. Itoi, “Spin-chirality separation and S_3 symmetry breaking in the magnetization plateau of the quantum spin tube,” *Phys. Rev. B* **85**, 054416 (2012).
- [159] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups,” *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
- [160] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group,” *Rev. Mod. Phys.* **77**, 259 (2005).

- [161] P. Calabrese and J. Cardy, “Entanglement entropy and quantum field theory,” *J. Stat. Mech. Theor. Exp.* **2004**, P06002 (2004).
- [162] H.-C. Jiang and L. Balents, “Collapsing Schrödinger cats in the Density Matrix Renormalization Group,” *ArXiv e-prints* (2013) cond-mat/1309.7438.
- [163] D. C. Cabra, A. De Martino, A. Honecker, P. Pujol, and P. Simon, “Emergence of irrationality : magnetization plateaus in modulated Hubbard chains,” *Phys. Rev. B* **63**, 094406 (2001).
- [164] C. A. Lamas, S. Capponi, and P. Pujol, “Combined analytical and numerical approach to study magnetization plateaux in doped quasi-one-dimensional antiferromagnets,” *Phys. Rev. B* **84**, 115125 (2011).
- [165] J. Villain, R. Bidaux, J.-P. Carton, and R. Conte, “Order as an effect of disorder,” *J. Phys. France* **41**, 1263 (1980).
- [166] A. Kitaev and J. Preskill, “Topological entanglement entropy,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 110404 (2006).
- [167] M. Levin and X.-G. Wen, “Detecting topological order in a ground state wave function,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 110405 (2006).
- [168] S. Yan, D. A. Huse, and S. R. White, “Spin-liquid ground state of the $S = 1/2$ Kagomé Heisenberg antiferromagnet,” *Science* **332**, 1173 (2011).
- [169] S. Depenbrock, I. P. McCulloch, and U. Schollwöck, “Nature of the spin-liquid ground state of the $S = 1/2$ Heisenberg model on the Kagomé lattice,” *Phys. Rev. Lett.* **109**, 067201 (2012).
- [170] H.-C. Jiang, Z. Wang, and L. Balents, “Identifying topological order by entanglement entropy,” *Nat. Phys.* **8**, 902 (2012).
- [171] H.-C. Jiang, H. Yao, and L. Balents, “Spin liquid ground state of the spin-1/2 square J_1 - J_2 Heisenberg model,” *Phys. Rev. B* **86**, 024424 (2012).
- [172] S.-S. Gong, W. Zhu, D. N. Sheng, O. I. Motrunich, and M. P. A. Fisher, “Plaquette ordered phase and quantum phase diagram in the spin-1/2 $J_1 - J_2$ square Heisenberg model,” *Phys. Rev. Lett.* **113**, 027201 (2014).
- [173] J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, and H.-J. Schmidt, “Macroscopic magnetization jumps due to independent magnons in frustrated quantum spin lattices,” *Phys. Rev. Lett.* **88**, 167207 (2002).
- [174] J. Richter, J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, and H.-J. Schmidt, “Exact eigenstates and macroscopic magnetization jumps in strongly frustrated spin lattices,” *J. Phys. : Condens. Matter* **16**, S779 (2004).
- [175] D. C. Cabra, M. D. Grynberg, P. C. W. Holdsworth, A. Honecker, P. Pujol, J. Richter, D. Schmalfuß, and J. Schulenburg, “Quantum Kagomé antiferromagnet in a magnetic field : low-lying nonmagnetic excitations versus valence-bond crystal order,” *Phys. Rev. B* **71**, 144420 (2005).
- [176] S. Capponi, P. Lecheminant, and M. Moliner, “Quantum phase transitions in multileg spin ladders with ring exchange,” *Phys. Rev. B* **88**, 075132 (2013).
- [177] C. L. Henley, “Ordering due to disorder in a frustrated vector antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2056 (1989).
- [178] E. F. Shender, “Antiferromagnetic garnets with fluctuationally interacting sublattices,” *Sov. Phys. JFTP* **56**, 178 (1982).

- [179] M. E. Zhitomirsky, “Octupolar ordering of classical Kagomé antiferromagnets in two and three dimensions,” *Phys. Rev. B* **78**, 094423 (2008).
- [180] C. L. Henley, “Long-range order in the classical Kagomé antiferromagnet : effective Hamiltonian approach,” *Phys. Rev. B* **80**, 180401 (2009).
- [181] G.-W. Chern and R. Moessner, “Dipolar order by disorder in the classical Heisenberg antiferromagnet on the Kagomé lattice,” *Phys. Rev. Lett.* **110**, 077201 (2013).
- [182] R. Moessner and J. T. Chalker, “Low-temperature properties of classical geometrically frustrated antiferromagnets,” *Phys. Rev. B* **58**, 12049 (1998).
- [183] R. Moessner and J. T. Chalker, “Properties of a classical spin liquid : the Heisenberg Pyrochlore antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2929 (1998).
- [184] S. E. Palmer and J. T. Chalker, “Order induced by dipolar interactions in a geometrically frustrated antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **62**, 488 (2000).
- [185] G.-W. Chern, R. Moessner, and O. Tchernyshyov, “Partial order from disorder in a classical Pyrochlore antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **78**, 144418 (2008).
- [186] N. Shannon, K. Penc, and Y. Motome, “Nematic, vector-multipole, and plateau-liquid states in the classical $O(3)$ Pyrochlore antiferromagnet with biquadratic interactions in applied magnetic field,” *Phys. Rev. B* **81**, 184409 (2010).
- [187] U. Hizi and C. L. Henley, “Effective Hamiltonian for the Pyrochlore antiferromagnet : Semiclassical derivation and degeneracy,” *Phys. Rev. B* **73**, 054403 (2006).
- [188] C. L. Henley, “Order by disorder and gaugelike degeneracy in a quantum Pyrochlore antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 047201 (2006).
- [189] D. L. Bergman, R. Shindou, G. A. Fiete, and L. Balents, “Degenerate perturbation theory of quantum fluctuations in a Pyrochlore antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **75**, 094403 (2007).
- [190] B. Canals, M. Elhajal, and C. Lacroix, “Ising-like order by disorder in the Pyrochlore antiferromagnet with Dzyaloshinskii-Moriya interactions,” *Phys. Rev. B* **78**, 214431 (2008).
- [191] U. Hizi and C. L. Henley, “Anharmonic ground state selection in the Pyrochlore antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **80**, 014407 (2009).
- [192] O. Tchernyshyov, O. A. Starykh, R. Moessner, and A. G. Abanov, “Bond order from disorder in the planar Pyrochlore magnet,” *Phys. Rev. B* **68**, 144422 (2003).
- [193] L.-P. Henry, P. C. W. Holdsworth, F. Mila, and T. Roscilde, “Spin-wave analysis of the transverse-field Ising model on the checkerboard lattice,” *Phys. Rev. B* **85**, 134427 (2012).
- [194] J. D. M. Champion, M. J. Harris, P. C. W. Holdsworth, A. S. Wills, G. Balakrishnan, S. T. Bramwell, E. Čížmár, T. Fennell, J. S. Gardner, J. Lago, D. F. McMorrow, M. Orendáč, A. Orendáčová, D. M. Paul, R. I. Smith, M. T. F. Telling, and A. Wildes, “ $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$: Evidence of quantum order by disorder in a frustrated antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **68**, 020401 (2003).
- [195] M. E. Zhitomirsky, M. V. Gvozdkova, P. C. W. Holdsworth, and R. Moessner, “Quantum order by disorder and accidental soft mode in $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$,” *Phys. Rev. Lett.* **109**, 077204 (2012).
- [196] K. A. Ross, Y. Qiu, J. R. D. Copley, H. A. Dabkowska, and B. D. Gaulin, “Order by disorder spin wave gap in the XY Pyrochlore magnet $\text{Er}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$,” *Phys. Rev. Lett.* **112**, 057201 (2014).
- [197] U. Hizi and C. L. Henley, “Effective Hamiltonians for large- S Pyrochlore antiferromagnets,” *J. Phys. : Condens. Matter* **19**, 145268 (2007).

- [198] S. E. Korshunov and B. Douçot, “Fluctuations and vortex-pattern ordering in the fully frustrated XY model on a honeycomb lattice,” *Phys. Rev. Lett.* **93**, 097003 (2004).
- [199] M. Arlego and W. Brenig, “Series expansion analysis of a frustrated four-spin tube,” *Phys. Rev. B* **84**, 134426 (2011).
- [200] M. Arlego, W. Brenig, Y. Rahnavard, B. Willenberg, H. D. Rosales, and G. Rossini, “Quantum phases of a frustrated four-leg spin tube,” *Phys. Rev. B* **87**, 014412 (2013).
- [201] T. Coletta, J.-D. Picon, S. E. Korshunov, and F. Mila, “Phase diagram of the fully frustrated transverse-field Ising model on the honeycomb lattice,” *Phys. Rev. B* **83**, 054402 (2011).
- [202] C. W. Bernard, “Feynman rules for gauge theories at finite temperature,” *Phys. Rev. D* **9**, 3312 (1974).
- [203] K. M. Benson, J. Bernstein, and S. Dodelson, “Phase structure and the effective potential at fixed charge,” *Phys. Rev. D* **44**, 2480 (1991).
- [204] P. Chandra, P. Coleman, and A. I. Larkin, “Ising transition in frustrated Heisenberg models,” *Phys. Rev. Lett.* **64**, 88 (1990).
- [205] D. C. Cabra, A. Honecker, and P. Pujol, “Magnetization plateaux in N -leg spin ladders,” *Phys. Rev. B* **58**, 6241 (1998).
- [206] E. Ercolessi, S. Evangelisti, F. Franchini, and F. Ravanini, “Modular invariance in the gapped XYZ spin-1/2 chain,” *Phys. Rev. B* **88**, 104418 (2013).
- [207] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, “Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets,” *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799 (1987).
- [208] M. Oshikawa, “Hidden $Z_2 \times Z_2$ symmetry in quantum spin chains with arbitrary integer spin,” *J. Phys. : Condens. Matter* **4**, 7469 (1992).
- [209] T. Kennedy, “Non-positive matrix elements for Hamiltonians of spin-1 chains,” *J. Phys. : Condens. Matter* **6**, 8015 (1994).
- [210] A. Kitazawa, K. Hijii, and K. Nomura, “An SU(2) symmetry of the one-dimensional spin-1 XY model,” *J. Phys. A : Math. Gen.* **36**, L351 (2003).
- [211] S. Capponi, O. Derzhko, A. Honecker, A. M. Läuchli, and J. Richter, “Numerical study of magnetization plateaux in the spin-1/2 Kagomé Heisenberg antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **88**, 144416 (2013).
- [212] A. W. Sandvik, “Computational studies of quantum spin systems,” *AIP Conf. Proc.* **1297**, 135 (2010).
- [213] P. W. Anderson, “The Resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity,” *Science* **235**, 1196 (1987).
- [214] P. Chandra and B. Douçot, “Possible spin-liquid state at large S for the frustrated square Heisenberg lattice,” *Phys. Rev. B* **38**, 9335 (1988).
- [215] P. W. Anderson, “Resonating valence bonds : a new kind of insulator?,” *Mat. Res. Bull.* **8**, 153 (1973).
- [216] B. S. Shastry and B. Sutherland, “Excitation spectrum of a dimerized next-neighbor antiferromagnetic chain,” *Phys. Rev. Lett.* **47**, 964 (1981).
- [217] R. Moessner and S. L. Sondhi, “Resonating valence bond phase in the triangular lattice quantum dimer model,” *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1881 (2001).

- [218] M. Oshikawa and T. Senthil, “Fractionalization, topological order, and quasiparticle statistics,” *Phys. Rev. Lett.* **96**, 060601 (2006).
- [219] X.-G. Wen, “Vacuum degeneracy of chiral spin states in compactified space,” *Phys. Rev. B* **40**, 7387 (1989).
- [220] X.-G. Wen, “Topological orders in rigid states,” *Int. J. Mod. Phys. B* **04**, 239 (1990).
- [221] X.-G. Wen and Q. Niu, “Ground-state degeneracy of the fractional quantum Hall states in the presence of a random potential and on high-genus Riemann surfaces,” *Phys. Rev. B* **41**, 9377 (1990).
- [222] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical physics, Part 1* (Butterworth-Heinemann, 1975).
- [223] T. Senthil and M. P. A. Fisher, “ \mathbb{Z}_2 gauge theory of electron fractionalization in strongly correlated systems,” *Phys. Rev. B* **62**, 7850 (2000).
- [224] T. Senthil and O. Motrunich, “Microscopic models for fractionalized phases in strongly correlated systems,” *Phys. Rev. B* **66**, 205104 (2002).
- [225] A. Y. Kitaev, “Fault-tolerant quantum computation by anyons,” *Ann. Phys.* **303**, 2 (2003).
- [226] A. Y. Kitaev, “Anyons in an exactly solved model and beyond,” *Ann. Phys.* **321**, 2 (2006).
- [227] A. Ralko, M. Ferrero, F. Becca, D. Ivanov, and F. Mila, “Zero-temperature properties of the quantum dimer model on the triangular lattice,” *Phys. Rev. B* **71**, 224109 (2005).
- [228] F. Vernay, A. Ralko, F. Becca, and F. Mila, “Identification of an RVB liquid phase in a quantum dimer model with competing kinetic terms,” *Phys. Rev. B* **74**, 054402 (2006).
- [229] S. Furukawa and G. Misguich, “Topological entanglement entropy in the quantum dimer model on the triangular lattice,” *Phys. Rev. B* **75**, 214407 (2007).
- [230] G. Misguich, D. Serban, and V. Pasquier, “Quantum dimer model on the Kagomé lattice : solvable dimer-liquid and Ising gauge theory,” *Phys. Rev. Lett.* **89**, 137202 (2002).
- [231] D. Poilblanc, M. Mambrini, and D. Schwandt, “Effective quantum dimer model for the Kagomé Heisenberg antiferromagnet : nearby quantum critical point and hidden degeneracy,” *Phys. Rev. B* **81**, 180402 (2010).
- [232] D. Schwandt, M. Mambrini, and D. Poilblanc, “Generalized hard-core dimer model approach to low-energy Heisenberg frustrated antiferromagnets : general properties and application to the Kagomé antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **81**, 214413 (2010).
- [233] D. S. Rokhsar and S. A. Kivelson, “Superconductivity and the quantum hard-core dimer gas,” *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2376 (1988).
- [234] O. F. Syljuasen, “Plaquette phase of the square-lattice quantum dimer model : quantum Monte-Carlo calculations,” *Phys. Rev. B* **73**, 245105 (2006).
- [235] R. Moessner, S. L. Sondhi, and E. Fradkin, “Short-ranged resonating valence bond physics, quantum dimer models, and Ising gauge theories,” *Phys. Rev. B* **65**, 024504 (2001).
- [236] Y. Iqbal, F. Becca, S. Sorella, and D. Poilblanc, “Gapless spin-liquid phase in the Kagomé spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **87**, 060405 (2013).
- [237] L. Messio, B. Bernu, and C. Lhuillier, “Kagomé antiferromagnet : a chiral topological spin liquid?,” *Phys. Rev. Lett.* **108**, 207204 (2012).
- [238] P. Nikolic and T. Senthil, “Physics of low-energy singlet states of the Kagomé lattice quantum Heisenberg antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **68**, 214415 (2003).

- [239] R. R. P. Singh and D. A. Huse, “Triplet and singlet excitations in the valence bond crystal phase of the Kagomé lattice Heisenberg model,” *Phys. Rev. B* **77**, 144415 (2008).
- [240] K. S. Raman, R. Moessner, and S. L. Sondhi, “SU(2)-invariant spin-1/2 Hamiltonians with resonating and other valence bond phases,” *Phys. Rev. B* **72**, 064413 (2005).
- [241] A. Seidel, “Linear independence of nearest-neighbor valence-bond states on the Kagomé lattice and construction of SU(2)-invariant spin-1/2 Hamiltonian with a Sutherland-Rokhsar-Kivelson quantum liquid ground state,” *Phys. Rev. B* **80**, 165131 (2009).
- [242] X.-G. Wen, “Quantum orders and symmetric spin liquids,” *Phys. Rev. B* **65**, 165113 (2002).
- [243] T. Senthil and M. P. A. Fisher, “Detecting fractions of electrons in the high- T_c cuprates,” *Phys. Rev. B* **64**, 214511 (2001).
- [244] S. V. Isakov, A. Paramekanti, and Y. B. Kim, “Exotic phase diagram of a cluster charging model of bosons on the Kagomé lattice,” *Phys. Rev. B* **76**, 224431 (2007).
- [245] Z. Y. Meng, T. C. Lang, S. Wessel, F. F. Assaad, and A. Muramatsu, “Quantum spin liquid emerging in two-dimensional correlated Dirac fermions,” *Nature* **464**, 847 (2010).
- [246] X. Chen, Z.-C. Gu, and X.-G. Wen, “Local unitary transformation, long-range quantum entanglement, wave function renormalization, and topological order,” *Phys. Rev. B* **82**, 155138 (2010).
- [247] S. T. Flammia, A. Hamma, T. L. Hughes, and X.-G. Wen, “Topological entanglement Rényi entropy and reduced density matrix structure,” *Phys. Rev. Lett.* **103**, 261601 (2009).
- [248] A. Hamma, W. Zhang, S. Haas, and D. A. Lidar, “Entanglement, fidelity, and topological entropy in a quantum phase transition to topological order,” *Phys. Rev. B* **77**, 155111 (2008).
- [249] Y. Zhang, T. Grover, A. Turner, M. Oshikawa, and A. Vishwanath, “Quasiparticle statistics and braiding from ground-state entanglement,” *Phys. Rev. B* **85**, 235151 (2012).
- [250] H.-C. Jiang, R. R. P. Singh, and L. Balents, “Accuracy of topological entanglement entropy on finite cylinders,” *Phys. Rev. Lett.* **111**, 107205 (2013).
- [251] L. Balents, M. P. A. Fisher, and S. M. Girvin, “Fractionalization in an easy-axis Kagomé antiferromagnet,” *Phys. Rev. B* **65**, 224412 (2002).
- [252] D. N. Sheng and L. Balents, “Numerical evidences of fractionalization in an easy-axis two-spin Heisenberg antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.* **94**, 146805 (2005).
- [253] S. V. Isakov, Y. B. Kim, and A. Paramekanti, “Spin-liquid phase in a spin-1/2 quantum magnet on the Kagomé lattice,” *Phys. Rev. Lett.* **97**, 207204 (2006).
- [254] S. V. Isakov, M. B. Hastings, and R. G. Melko, “Topological entanglement entropy of a Bose-Hubbard spin liquid,” *Nat. Phys.* **7**, 772 (2011).
- [255] S. V. Isakov, R. G. Melko, and M. B. Hastings, “Universal signatures of fractionalized quantum critical points,” *Science* **335**, 193 (2012).
- [256] T. Grover and T. Senthil, “Quantum phase transition from an antiferromagnet to a spin liquid in a metal,” *Phys. Rev. B* **81**, 205102 (2010).
- [257] R. G. Melko, A. Del Maestro, and A. A. Burkov, “Striped supersolid phase and the search for deconfined quantum criticality in hard-core bosons on the triangular lattice,” *Phys. Rev. B* **74**, 214517 (2006).
- [258] J.-M. Stéphan, S. Furukawa, G. Misguich, and V. Pasquier, “Shannon and entanglement entropies of one- and two-dimensional critical wave functions,” *Phys. Rev. B* **80**, 184421 (2009).

- [259] J.-M. Stéphan, G. Misguich, and V. Pasquier, “Rényi entropy of a line in two-dimensional Ising models,” *Phys. Rev. B* **82**, 125455 (2010).
- [260] S. Humeniuk and T. Roscilde, “Quantum Monte-Carlo calculation of entanglement Rényi entropies for generic quantum systems,” *Phys. Rev. B* **86**, 235116 (2012).
- [261] A. W. Sandvik, “Finite-size scaling and boundary effects in two-dimensional valence-bond solids,” *Phys. Rev. B* **85**, 134407 (2012).
- [262] T. Senthil, L. Balents, S. Sachdev, A. Vishwanath, and M. P. A. Fisher, “Quantum criticality beyond the Landau-Ginzburg-Wilson paradigm,” *Phys. Rev. B* **70**, 144407 (2004).
- [263] S. V. Isakov, S. Wessel, R. G. Melko, K. Sengupta, and Y. B. Kim, “Hard-core bosons on the Kagomé lattice : valence-bond solids and their quantum melting,” *Phys. Rev. Lett.* **97**, 147202 (2006).
- [264] K. Damle and T. Senthil, “Spin nematics and magnetization plateau transition in anisotropic Kagomé magnets,” *Phys. Rev. Lett.* **97**, 067202 (2006).
- [265] A. Sen, K. Damle, and A. Vishwanath, “Magnetization plateaus and sublattice ordering in easy-axis Kagomé lattice antiferromagnets,” *Phys. Rev. Lett.* **100**, 097202 (2008).
- [266] N. Laflorencie and F. Mila, “Quantum and thermal transitions out of the supersolid phase of a 2D quantum antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.* **99**, 027202 (2007).
- [267] R. G. Melko, “Simulations of quantum XXZ models on two-dimensional frustrated lattices,” *J. Phys. : Condens. Matter* **19**, 145203 (2007).
- [268] A. Ralko, M. Ferrero, F. Becca, D. Ivanov, and F. Mila, “Dynamics of the quantum dimer model on the triangular lattice : soft modes and local resonating valence-bond correlations,” *Phys. Rev. B* **74**, 134301 (2006).
- [269] K. Slagle and C. Xu, “Quantum phase transition between the Z_2 spin liquid and valence bond crystals on a triangular lattice,” *Phys. Rev. B* **89**, 104418 (2014).
- [270] A. W. Sandvik and J. Kurkijärvi, “Quantum Monte-Carlo simulation method for spin systems,” *Phys. Rev. B* **43**, 5950 (1991).
- [271] D. Handscomb, “The Monte-Carlo method in quantum statistical mechanics,” *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **58**, 594 (1962).
- [272] J. W. Lyklema, “Quantum-statistical Monte-Carlo method for Heisenberg spins,” *Phys. Rev. Lett.* **49**, 88 (1982).
- [273] E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, R. T. Scalettar, S. R. White, D. J. Scalapino, and R. L. Sugar, “Sign problem in the numerical simulation of many-electron systems,” *Phys. Rev. B* **41**, 9301 (1990).
- [274] P. Henelius and A. W. Sandvik, “Sign problem in Monte-Carlo simulations of frustrated quantum spin systems,” *Phys. Rev. B* **62**, 1102 (2000).
- [275] P. Henelius, A. W. Sandvik, C. Timm, and S. M. Girvin, “Monte-Carlo study of a two-dimensional quantum ferromagnet,” *Phys. Rev. B* **61**, 364 (2000).
- [276] A. W. Sandvik, “Stochastic series expansion method with operator-loop update,” *Phys. Rev. B* **59**, R14157 (1999).
- [277] O. F. Syljuasen and A. W. Sandvik, “Quantum Monte-Carlo with directed loops,” *Phys. Rev. E* **66**, 046701 (2002).

-
- [278] F. Alet, *Etude numérique de systèmes magnétiques et supraconducteurs*, PhD thesis Université Toulouse 3 2002.
- [279] K. Louis and C. Gros, “Stochastic cluster series expansion for quantum spin systems,” *Phys. Rev. B* **70**, 100410 (2004).
- [280] M. B. Hastings, I. González, A. B. Kallin, and R. G. Melko, “Measuring Rényi entanglement entropy in quantum Monte-Carlo simulations,” *Phys. Rev. Lett.* **104**, 157201 (2010).
- [281] A. B. Kallin, M. B. Hastings, R. G. Melko, and R. R. P. Singh, “Anomalies in the entanglement properties of the square-lattice Heisenberg model,” *Phys. Rev. B* **84**, 165134 (2011).
- [282] R. G. Melko, A. B. Kallin, and M. B. Hastings, “Finite-size scaling of mutual information in Monte-Carlo simulations : application to the spin-1/2 XXZ model,” *Phys. Rev. B* **82**, 100409 (2010).
- [283] D. J. Luitz, X. Plat, N. Laflorencie, and F. Alet, “Improving entanglement and thermodynamic Rényi entropy measurements in quantum Monte-Carlo,” *Phys. Rev. B* **90**, 125105 (2014).
- [284] H. Ju, A. B. Kallin, P. Fendley, M. B. Hastings, and R. G. Melko, “Entanglement scaling in two-dimensional gapless systems,” *Phys. Rev. B* **85**, 165121 (2012).
- [285] S. Inglis and R. G. Melko, “Entanglement at a two-dimensional quantum critical point : a $T = 0$ projector quantum Monte-Carlo study,” *New J. Phys.* **15**, 073048 (2013).
- [286] H. Casini and M. Huerta, “Universal terms for the entanglement entropy in dimensions,” *Nucl. Phys. B* **764**, 183 (2007).

Publications

1. X. Plat, S. Capponi et P. Pujol, “Combined analytical and numerical approach to magnetization plateaux in one-dimensional spin tube antiferromagnets,” *Phys. Rev. B* **85**, 174423 (2012)
2. D. J. Luitz, X. Plat, N. Laflorencie et F. Alet, “Improving entanglement and thermodynamic Rényi entropy measurements in quantum Monte-Carlo,” *Phys. Rev. B* **90**, 125105 (2014)
3. X. Plat, Y. Fuji, S. Capponi et P. Pujol, “Selection of factorizable ground state in a frustrated spin tube : Order by disorder and hidden ferromagnetism,” arXiv :1407.2463, soumis à *Phys. Rev. B*

Résumé

Les travaux présentés dans cette thèse concernent l'étude des systèmes magnétiques sous champ pour lesquels une frustration, géométrique ou due à des interactions en compétition, est présente. Nous avons pour cela considéré différents types de modèles en basses dimensions, où les effets des fluctuations quantiques sont renforcés et permettent ainsi l'apparition de nouvelles phases quantiques intéressantes. Ce travail est organisé en trois parties, chacune d'entre elles correspondant à l'étude d'un modèle particulier. Dans les deux premières, nous nous intéressons à deux modèles unidimensionnels de tubes de spin, respectivement composés de trois et quatre chaînes de spin, que nous abordons à l'aide de plusieurs techniques analytiques et numériques. Nous montrons comment, au-delà de la présence de plateaux d'aimantation, une physique riche peut émerger, avec notamment le rôle des modes non magnétiques pour le premier modèle ou, pour le second, les conséquences d'une dégénérescence continue au niveau classique sur le diagramme de phases quantiques. Dans la troisième partie, nous étudions par des simulations de Monte-Carlo Quantique un modèle possédant une anisotropie de spin sur le réseau bidimensionnel Kagomé, proposé pour la recherche de phases topologiques. Nous obtenons le diagramme de phases sur un des plateaux d'aimantation de ce modèle, et utilisons cet exemple pour discuter la pertinence de l'utilisation des entropies d'intrication comme outil d'identification de différentes phases dans des simulations numériques.

Abstract

This thesis deals with the physics of magnetic systems in an external field and when frustration, arising either from the geometry or from competing interactions, is present. We have studied several models in low dimensions, where the effects of the quantum fluctuations are more important and can lead to the apparition of new interesting quantum phases. This manuscript is divided in three parts, each one being dedicated to a given model. In the first two parts, we consider two one-dimensional spin tube models, respectively made of three and four coupled spin chains, that we study by using various analytical and numerical methods. We show that, beyond the appearance of magnetization plateaux, a rich physics can emerge, with the role of the non magnetic modes for the first model, or, in the second case, the consequences of a continuous degeneracy at the classical level on the quantum phase diagram. In the third part, we use numerical Quantum Monte-Carlo simulations to study an anisotropic spin model on the two-dimensional Kagomé lattice, designed for the search of topological phases. We obtain the phase diagram on one of the magnetization plateaux of this model, and use this example to discuss the relevance of the computation of the entanglement entropies in order to identify phases in numerical simulations.