



**HAL**  
open science

# Systemes de spins quantiques frustrés sous champ magnétique étudiés par méthodes Tensor Network

Thibaut Picot

► **To cite this version:**

Thibaut Picot. Systemes de spins quantiques frustrés sous champ magnétique étudiés par méthodes Tensor Network. Electrons fortement corrélés [cond-mat.str-el]. Université de Toulouse (Paul Sabatier), 2015. Français. NNT: . tel-01377823

**HAL Id: tel-01377823**

**<https://theses.hal.science/tel-01377823>**

Submitted on 7 Oct 2016

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

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



# THÈSE

En vue de l'obtention du

## DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

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

---

---

Présentée et soutenue le *12/11/2015* par :

**THIBAUT PICOT**

**Systemes de spins quantiques frustrés sous champ  
magnétique étudiés par méthodes Tensor Network.**

---

---

### JURY

MADAME NATHALIE GUIHÉRY  
MONSIEUR FEDERICO BECCA  
MONSIEUR FRANK VERSTRAETE  
MONSIEUR FRÉDÉRIC MILA  
MONSIEUR DIDIER POILBLANC

Présidente  
Rapporteur  
Rapporteur  
Examinateur  
Directeur de thèse

---

École doctorale et spécialité :

*SDM : Physique de la matière - CO090*

Unité de Recherche :

*Laboratoire de Physique Théorique de Toulouse*

Directeur de Thèse :

*Didier POILBLANC*

Rapporteurs :

*Federico BECCA et Frank VERSTRAETE*



*“Tell me and I’ll forget, teach me and I’ll remember, involve me and I’ll learn.”*

*“Beer is proof that God loves us and wants us to be happy.”*

Benjamin Franklin



*“Lorsqu’elle se transforme en alliée du narcissisme, la subjectivité semble avoir du mal à s’incliner devant ce qui a été objectivé, du moins si ce qui a été objectivé la dérange ou lui déplaît.”*

Étienne Klein



# Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier Didier Poilblanc qui a accepté de m'encadrer durant ces 3 années (et un peu plus). Il a su me conseiller et me motiver à travailler sur de nouvelles thématiques de recherche. En particulier, son intérêt pour les nouvelles méthodes numériques m'ont permis de voir grandir une communauté (celle des Tensor Network) qui n'était pas si développée lorsque j'ai commencé, et qui compte aujourd'hui un grand nombre d'adeptes, moi y compris. Je le remercie également pour son enthousiasme constant qui m'a toujours remotivé les jours où le moral n'y était pas.

Je tiens également à remercier les rapporteurs, Federico Becca et Frank Verstraete, d'avoir accepté de lire en détails ce manuscrit de thèse ainsi que Nathalie Guihéry et Frédéric Mila d'avoir accepté de participer au jury de thèse.

Un remerciement tout particulier à Román Orús et à Marc Ziegler avec qui nous avons collaborer, Didier et moi, sur une publication et qui ont su encore enrichir cette thèse. Sans oublier d'innombrables personnes qui m'ont apporté de précieux conseils : Ignacio Cirac, Michael Lubasch, Philippe Corboz, Norbert Schuch, Frank Pollman, Sylvain Capponi... pour ne citer qu'eux !

Cette thèse n'aurait pu être aussi plaisante sans l'excellente ambiance de ce labo, et en particulier dans l'équipe Fermions Fortement Corrélés, dont je remercie les membres, Nicolas Laflorencie, Matthieu Mambrini, Sylvain Capponi, Pierre Pujol, Revaz Ramazashvili, Fabien Alet, Aleksandra Petković et Zoran Ristivojevic. Également un grand merci à toutes ces personnes que j'ai croisé un jour ou l'autre, Juan Pablo, Xavier, Sumiran, Yasir, David, Helder, Medha, Guillaume, Bertrand, Giuseppe, François, Lionel, Maxime, Daniel, Isabelle, Gabriel, Aéla, Marc... désolé pour ceux que j'oublie. Ah si ! Cette personne insupportable avec qui j'ai partagé mon bureau durant ces 3 années, qui y est toujours d'ailleurs : un grand merci à Frédéric, il le mérite malgré ce que je peux dire !

Sans oublier Malika, notre indispensable gestionnaire, pour son travail qui m'a permis entre autre tous ces voyages, mais également merci à elle pour sa bonne humeur !

Évidemment, que seraient des remerciements sans le traditionnel remerciement à la famille ! Je remercie sincèrement toute ma famille de m'avoir toujours soutenu dans mes études, bien que leurs "Mais... Tu fais quoi exactement ?" m'ont toujours laissé sous-entendre qu'ils n'ont pas toujours tout compris. Un grand merci aussi à mes parents et à mon frère d'être venu à Toulouse me soutenir pour cette soutenance.

Et bien sûr, la dernière mais pas des moindres, n'oublions pas la personne qui m'a suivi à Toulouse pour que je puisse faire cette thèse. Je remercie ma femme qui

m'a toujours soutenu, mais surtout supporté, en particulier lorsque la fin approche, quand le stress est à son comble et que l'humeur en pâtit.

# Table des matières

Introduction	1
<b>I Motivations expérimentales : composés magnétiques de réseaux kagomé</b>	<b>5</b>
1 Spin 1/2	8
1.1 Herbertsmithite	8
1.2 Volborthite	10
1.3 Vesignieite	12
2 Spin 1	14
2.1 Composé organique	14
2.2 Composés de vanadium	14
2.3 Composés de nickel	14
3 Spin 3/2	20
<b>II Modèles étudiés et méthodes</b>	<b>23</b>
1 Modèles théoriques	24
1.1 Frustration magnétique	24
1.2 Un exemple de système frustré : le réseau kagomé	25
1.3 Hamiltonien	28
1.3.1 Modèle Heisenberg et ses descendants	28
1.3.2 Modèle AKLT	29
1.4 Couplage Zeeman	32
2 Une méthode novatrice : les réseaux de tenseurs	35
2.1 Introduction	35
2.2 Une dimension : <i>Matrix Product State</i>	36
2.2.1 Règles diagrammatiques	36
2.2.2 Définition d'un état produit de matrices	36
2.2.3 Décomposition de Schmidt	39
2.2.4 Approximation en <i>Matrix Product State</i>	41
2.2.5 Forme canonique	46
2.2.6 Systèmes infinis : <i>infinite-Matrix Product State</i>	46
2.2.7 Exemples de représentations exactes	49
2.3 Deux dimensions : <i>Projected Entangled Pair State</i>	51
2.3.1 Motivations et définitions	51
2.3.2 Propriétés	52

2.4	Représentations exactes de fonctions d'onde analytiques en termes de réseaux de tenseurs . . . . .	55
2.4.1	État AKLT . . . . .	55
2.4.2	État <i>Resonating Valence Bonds</i> . . . . .	55
2.4.3	Représentation avec tenseurs simplexes : exemple de l'état AKLT . . . . .	58
2.4.4	Fonctions d'onde paramétrées sous champ . . . . .	60
2.5	Méthodes d'optimisation . . . . .	65
2.5.1	Évolution en temps imaginaire . . . . .	65
2.5.2	Algorithme <i>Simple Update</i> . . . . .	67
<b>III Antiferro-aimants sur réseau kagomé sous champ magnétique : phases nématiques et super-nématiques 73</b>		
1	Introduction . . . . .	74
1.1	Motivations et définitions . . . . .	74
1.2	Principes d'optimisation . . . . .	75
1.3	Calcul des observables . . . . .	76
1.3.1	Environnement simple : approximation de champ moyen . . . . .	76
1.3.2	Environnement complet . . . . .	76
2	Description des phases . . . . .	80
2.1	Phases incompressibles sous champ : phases nématiques . . . . .	80
2.2	Phases compressibles sous champ : phases super-nématiques . . . . .	80
3	Modèle AKLT : un modèle "jouet" pour les réseaux de tenseurs . . . . .	82
3.1	Diagramme de phase . . . . .	82
3.2	Gap de spin AKLT et phase superfluide . . . . .	82
3.3	Phase nématique : plateau d'aimantation à 5/6 . . . . .	84
4	Un modèle réaliste : modèle de Heisenberg de spin 1 . . . . .	86
4.1	Diagramme de phase . . . . .	86
4.2	Phase solide simplexe . . . . .	88
4.3	Phase nématique à 1/3 . . . . .	90
4.4	Phases super-nématiques . . . . .	91
5	Conclusion . . . . .	91
<b>IV Antiferro-aimants sur réseau kagomé sous champ magnétique : rôle du spin <math>S</math> et superstructure <math>\sqrt{3} \times \sqrt{3}</math> 93</b>		
1	Diagrammes des phases . . . . .	94
1.1	Description générale de phases . . . . .	94
1.2	Diagrammes de phases . . . . .	100
2	Plateau d'aimantation à 1/3 . . . . .	105
2.1	Description . . . . .	105
2.2	Interprétation semi-classique . . . . .	105
3	Phase à 1 magnon exact et saut à la saturation . . . . .	106
4	Plateaux d'aimantation spécifiques . . . . .	109
4.1	Gap de spin . . . . .	109
4.1.1	Solide simplexe . . . . .	109

---

4.1.2	Liquide de spin trivial . . . . .	109
4.2	Phase à “2 magnons” . . . . .	110
4.3	Phase à $1/9$ pour le spin $S = 1/2$ . . . . .	110
5	Conclusion . . . . .	111
<b>V</b>	<b>Conclusion and perspectives</b>	<b>113</b>
<b>Annexes</b>		
<b>A</b>	<b>Optimisation : algorithme <i>Full Update</i> sur réseau carré</b>	<b>117</b>
<b>B</b>	<b>Calcul de l’environnement : méthode <i>Corner Transfer Matrix Renormalization Group</i> sur réseau carré</b>	<b>123</b>
<b>C</b>	<b>Calcul de l’environnement : approche MPS</b>	<b>127</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>133</b>
	<b>Liste des publications</b>	<b>145</b>



# Introduction

L'étude des phases quantiques de la matière, à température  $T = 0$ , est un vaste domaine de recherche, et leur compréhension reste un défi. Lorsque nous étudions les matériaux magnétiques, ces phases trouvent très souvent leur origine dans la frustration des spins qui composent les matériaux. Alors que la théorie de Landau prédit que tout système tend à s'ordonner lorsque la température tend vers 0, il existe des phases désordonnées, du fait de la frustration qui génère d'importantes fluctuations quantiques, même à  $T = 0$ . Ces systèmes magnétiques frustrés font typiquement intervenir des interactions antiferromagnétiques dans une configuration particulière, soit d'interaction, soit de géométrie du réseau. Un célèbre exemple de réseau géométriquement frustré est le réseau kagomé, composé de triangles connectés par les sommets. L'intérêt de ce réseau réside dans le fait qu'il existe à l'état naturel dans certains cristaux, comme la célèbre herbertsmithite, permettant ainsi des études expérimentales (bien que la plupart des échantillons soient synthétisés en laboratoire). Les nombreuses connexions expérience-théorie enrichissent ce domaine. Du point de vue théorique, ce réseau frustré à deux dimensions est l'un des plus simple à étudier grâce à son faible nombre de coordination  $z = 4$ . Lorsqu'à cette propriété s'ajoute un champ magnétique extérieur tendant à polariser le matériau, la compétition de ces deux phénomènes donne naissance à des phases magnétiques exotiques, tels que les plateaux d'aimantation pour lesquels la susceptibilité magnétique est nulle (phases incompressibles). Grâce aux avancées dans le domaine des champs magnétiques intenses, on a été en mesure d'observer quelques uns de ces plateaux d'aimantation dans des cristaux formés de feuillets de réseau kagomé, comme le plateau à  $1/3$  de l'aimantation totale dans la volborthite. Pour cette raison, nous nous intéressons à des systèmes antiferromagnétiques sur réseau kagomé, pour différentes valeurs de spin  $S$ , auxquels nous appliquons un champ magnétique extérieur. La simulation de tels systèmes et l'étude de leur diagramme de phase peut aider à la compréhension théorique de nouvelles phases quantiques de la matière, mais également être utile à la caractérisation expérimentale de tels matériaux.

Dans la première partie, nous allons détailler les motivations expérimentales qui nous ont amené à étudier ce type de systèmes. Nous verrons des exemples de matériaux formés de feuillets de réseau kagomé d'ions de spin  $S$ , pour lesquels les interactions sont antiferromagnétiques. Nous verrons également le cas particulier de la volborthite sous champ, présentant un plateau d'aimantation. Nous discuterons aussi des différences qui existent entre l'expérience et les prédictions théoriques actuelles, basées sur des représentations simples de la matière, n'incluant pas les défauts des échantillons, ou les interactions supplémentaires faibles

mais capables, par exemple, de coupler les plans kagomé d'un cristal entre eux.

La deuxième partie se décompose en deux sous sections. La première présente les modèles théoriques, dans laquelle nous verrons les hamiltoniens utilisés dans le domaine de la matière condensée, en particulier les hamiltoniens magnétiques. Une introduction à la frustration magnétique ainsi que le modèle de Heisenberg et le modèle Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki (AKLT) sont présentés. Enfin, nous parlerons du couplage Zeeman, qui est le couplage entre un champ magnétique et un système de spins. Nous discuterons l'effet de ce champ et donnerons quelques exemples très simples afin de mieux comprendre son action. La deuxième sous section est dédiée aux méthodes numériques. Il s'agit d'une introduction aux méthodes Tensor Network (réseau de tenseurs) que nous avons utilisé lors de nos simulations. Tout d'abord développées dans le cadre de la théorie quantique de l'information, ces méthodes, basées sur le principe d'intrication, ont très vite été utilisées en matière condensée. Elles ont permis l'étude de systèmes bidimensionnels frustrés, jusqu'alors limité par les méthodes numériques déjà connues telles que les méthodes Monte Carlo ou encore *Density Matrix Renormalization Group*. À l'aide du cas à une dimension, appelé *Matrix Product State* (MPS), pour *état produit de matrices*, nous allons voir que la décomposition de Schmidt, basé sur la décomposition en valeurs singulières de matrices, nous permet d'écrire les coefficients d'un état intriqué comme le produit de  $N$  matrices pour une chaîne de  $N$  sites. Sur chaque site, il existe alors un ensemble de  $d$  matrices, ou  $d$  est la dimension de l'espace de Hilbert de chaque site. La description globale d'un système intriqué se ramène alors à une description locale. Nous verrons que c'est un outil puissant, en particulier pour les calculs à la limite thermodynamique (*infinite*-MPS, ou iMPS) et le calcul de spectre d'intrication. Ensuite, nous introduirons la description de réseaux à deux dimensions, à savoir les *Projected Entangled Pair States* (PEPS), pour *états de paires intriquées projetées*. Nous verrons certaines propriétés de ces réseaux de tenseurs, ainsi que des exemples de fonctions d'onde analytiques, telles que l'état *Resonating Valence Bond* (RVB) ou AKLT, présentant une représentation PEPS exacte. Nous prendrons également l'exemple d'une étude de processus d'aimantation pour le modèle AKLT effectuée en utilisant un PEPS simple à deux paramètres. Finalement, nous présenterons la méthode utilisée pour optimiser les tenseurs, basée sur l'évolution en temps imaginaire.

Les parties suivantes présentent les travaux originaux effectués lors de cette thèse, en employant les méthodes et modèles décrits plus haut.

La chapitre III présente l'étude du modèle AKLT (pour le spin 2) et de Heisenberg (pour le spin 1), sur réseau kagomé, sous champ magnétique extérieur. Pour cela, nous avons utilisé une version infinie des algorithmes PEPS, ou iPEPS. Afin de calculer les propriétés du système à la limite thermodynamique, nous avons choisi une cellule élémentaire de trois sites. Ce choix, qui préserve la symétrie de translation du système, nous a permis d'observer un grand nombre de phases intéressantes. Des phases incompressibles, appelées phases *nématiques*, ont été identifiées pour des aimantations moyennes à  $5/6$  de l'aimantation totale pour le modèle AKLT et à  $1/3$  pour le modèle de Heisenberg, toutes deux brisant des symétries du groupe ponctuel. Des phases compressibles, appelées phases *super-nématiques*, brisent la symétrie de spin  $U(1)$ , conférant à la phase *nématique* un

caractère “superfluide”.

Dans le dernier chapitre, une étude similaire au chapitre III est présentée. Le modèle considéré est simplement le modèle de Heisenberg, mais pour des valeurs du spin allant de  $S = 1/2$  à  $S = 2$ . L’autre différence majeure est l’utilisation d’une cellule élémentaire de neuf sites, autorisant ainsi une brisure de symétrie de translation. Un grand nombre de plateaux d’aimantation ont été observés, la plupart étant communs à tous les spins, comme le plateau à  $1/3$ , à  $1 - 2/(9S)$  et  $1 - 1/(9S)$ , mais également un plateau spécifique au spin  $1/2$  à  $1/9$  de l’aimantation totale. Les phases *nématiques* et *super-nématiques* sont présentes, auxquels s’ajoutent différentes phase *solides* et *super-solides*. De plus, une phase à ordre de liens, appelée *Valence Bond Crystal (VBC)*, pour *crystal de liens de valence*, a été identifiée. Cette propriété est typique d’une phase purement quantique.

Nous clôturons ce manuscrit par une conclusion et la perspective donnée par ce travail.



# Chapitre I

## Motivations expérimentales : composés magnétiques de réseaux kagomé

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Spin 1/2</b> . . . . .	<b>8</b>
1.1	Herbertsmithite . . . . .	8
1.2	Volborthite . . . . .	10
1.3	Vesignieite . . . . .	12
<b>2</b>	<b>Spin 1</b> . . . . .	<b>14</b>
2.1	Composé organique . . . . .	14
2.2	Composés de vanadium . . . . .	14
2.3	Composés de nickel . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Spin 3/2</b> . . . . .	<b>20</b>

---

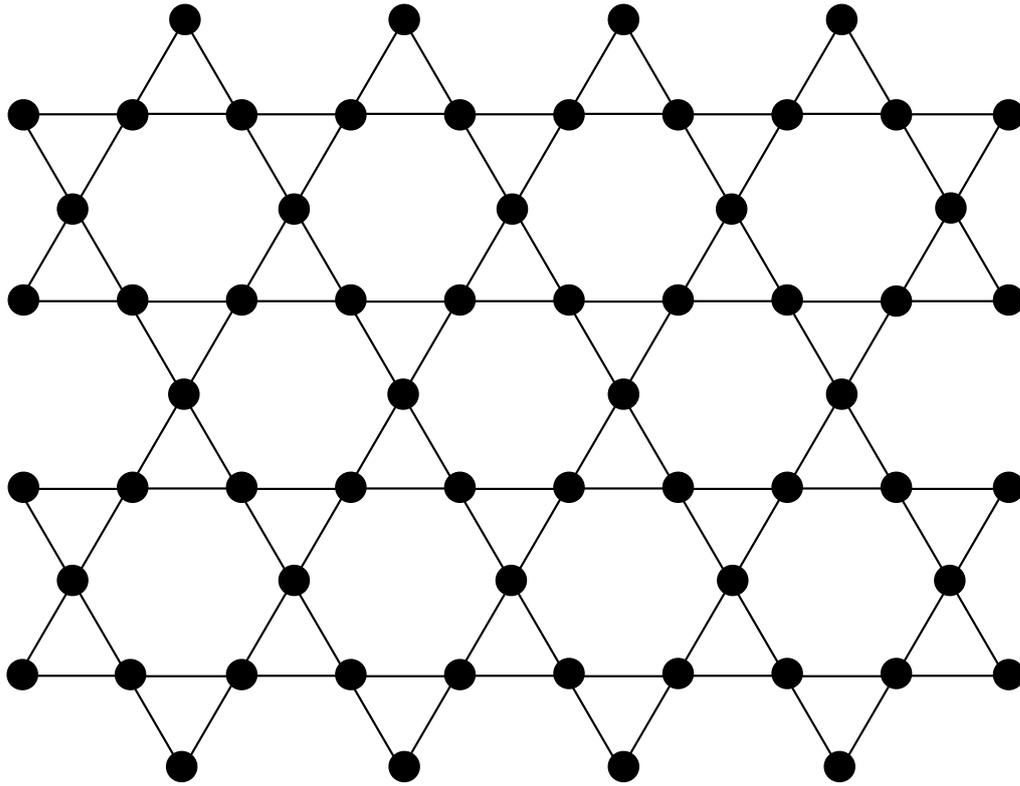
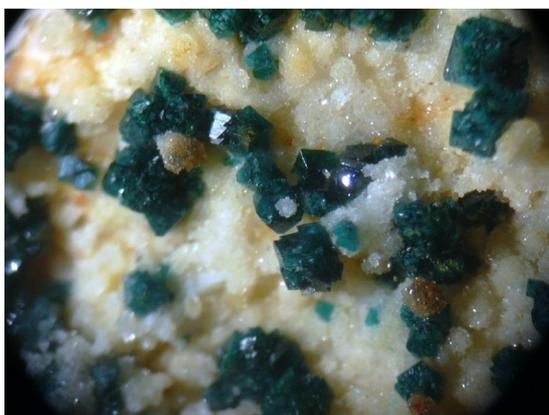


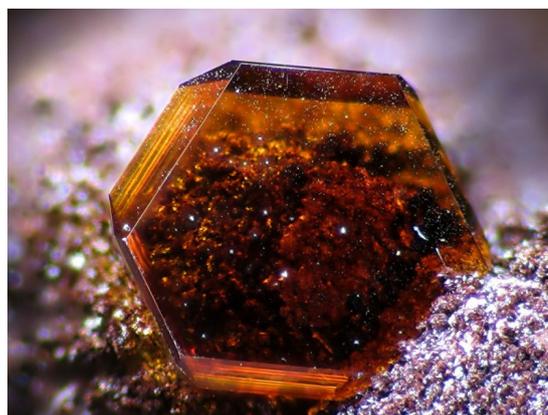
FIGURE I.1 – Pavage trihexagonal, également appelé *réseau kagomé*.

Bien que toutes matières cristallines aient une conformation en trois dimensions (exception faite du graphène), leurs propriétés électroniques et magnétiques peuvent être décrites dans des sous-systèmes de plus basse dimensionnalité. Cela s'explique par le fait que la structure interne peut être vue comme une superposition de différents types de couches, certaines jouant le rôle de porteur de charge, ou de spins, et d'autres couches intercalées jouant le rôle d'isolant, contraignant les électrons à interagir entre eux seulement dans une couche : le système effectif, portant les propriétés du matériau, est alors réduit à deux dimensions. De la même façon, une couche peut être subdivisée en des chaînes découplées ; nous obtenons ainsi un système effectif à une dimension.

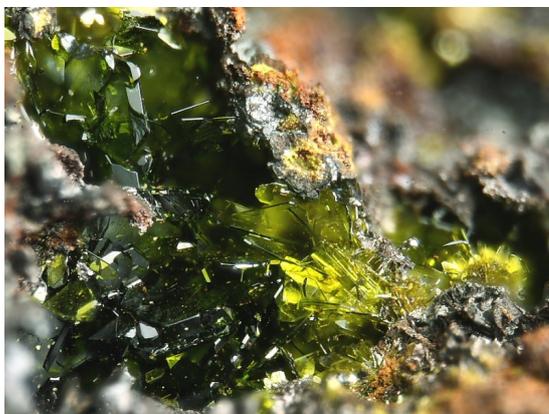
Dans notre cas, nous nous intéressons à un système à deux dimensions de pavage trihexagonal, également appelé réseau kagomé. Il s'agit d'un réseau composé de triangles connectés par les sommets avec chacun de ses trois voisins (voir Fig. I.1). Nous allons présenter quelques exemples de matériaux de réseaux kagomé pour lesquels les ions, qui portent les moments magnétiques interagissant, ont différentes valeurs.



(a) Cristaux d'herbertsmithite  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$  (en vert). Les moments magnétiques  $\frac{1}{2}$  sont portés par les ions  $\text{Cu}^{2+}$ .



(b) Jarosite  $\text{KFe}_3(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_2$ . Les moments magnétiques  $\frac{5}{2}$  sont portés par les ions  $\text{Fe}^{3+}$ . Il existe également une jarosite chromée où les ions  $\text{Cr}^{3+}$  de spin  $\frac{3}{2}$  se substituent aux ions  $\text{Fe}^{3+}$  de la jarosite ferreuse.



(c) Volborthite  $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_7(\text{OH})_2 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ . Les moments magnétiques  $\frac{1}{2}$  sont portés par les ions  $\text{Cu}^{2+}$ .



(d) Vesignieite  $\text{BaCu}_3\text{V}_2\text{O}_8(\text{OH})_2$ . Les moments magnétiques  $\frac{1}{2}$  sont portés par les ions  $\text{Cu}^{2+}$ .

FIGURE I.2 – Cristaux de minéraux présentant une structure en couches de réseau kagomé. [photos tirées du site mindat.org]

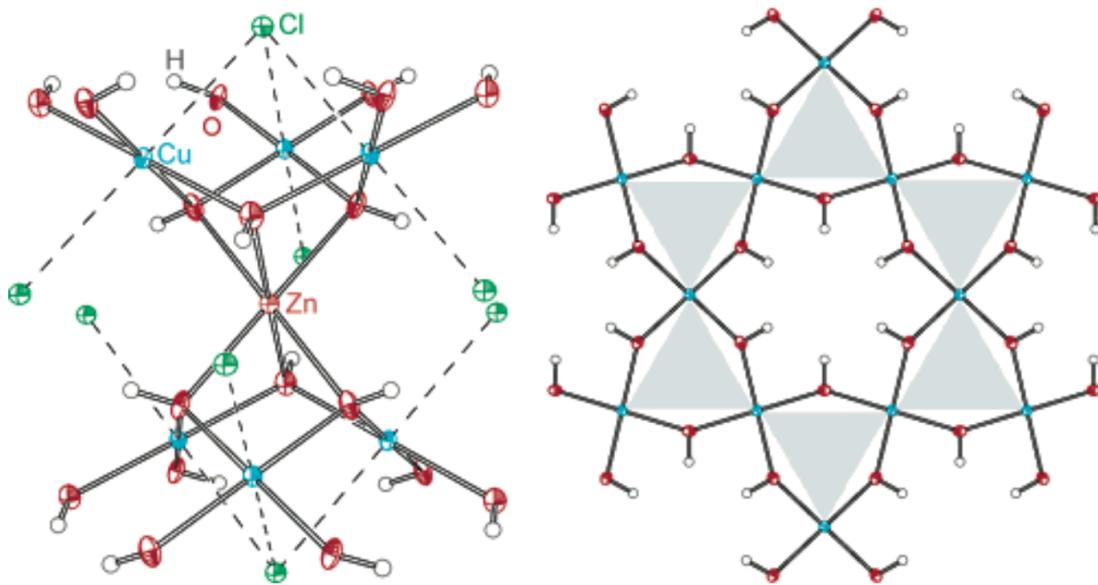


FIGURE I.3 – Structure en réseau kagomé de spin 1/2 du cristal d’herbertsmithite synthétisé au M.I.T. [figure tirée de la référence [94]].

## 1 Spin 1/2

### 1.1 Herbertsmithite

Découvert en 1972 et nommé en l’honneur du minéralogiste Herbert Smith, l’herbertsmithite est un minéral naturel de composition chimique  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$  (Fig. I.2a). C’est un parfait exemple de réseau kagomé d’ions  $\text{Cu}^{2+}$  de spin- $\frac{1}{2}$ . L’interaction de super-échange entre plus proches voisins mène à un couplage antiferromagnétique. Il est le premier cristal découvert présentant une structure en couches de réseaux kagomé découplées, pouvant ainsi être décrit par une phase liquide de spin [5]. Les interactions antiferromagnétiques de type Heisenberg  $J_{i,j}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j$ , avec  $J_{i,j} > 0$ , sur le réseau kagomé sont les ingrédients de la frustration de ce type de système. Nous discuterons des interactions et de la frustration plus en détails dans le chapitre II.

Depuis que la communauté scientifique s’est intéressée aux antiferro-aimants frustrés sur réseau kagomé, portée par les propositions d’états fondamentaux exotiques, il y eut une volonté de trouver des champs d’investigation expérimentaux afin de tester toutes ces prédictions théoriques. Un support expérimental était indispensable pour trancher sur la nature de l’état fondamental de ce système. Cette longue attente s’est finalement terminée en 2005 lorsque qu’une équipe du M.I.T. a synthétisé un cristal d’herbertsmithite structurellement parfait [94] (voir Fig. I.3). La combinaison de basse dimensionalité, basse coordinence, bas spin  $S = 1/2$  et d’interactions antiferromagnétiques frustrées mène à une amplification des fluctuations quantiques suffisantes pour stabiliser le système dans une phase paramagnétique [52, 63]. En effet, aucun ordre magnétique n’a été détecté dans l’herbertsmithite à des températures bien inférieur à  $J$ , par toutes les techniques

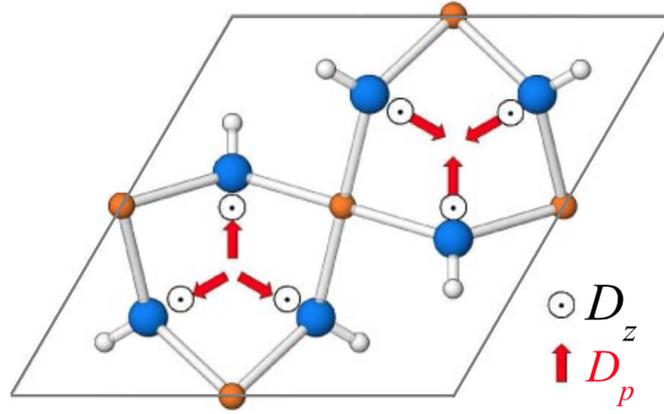


FIGURE I.4 – Interactions Dzyaloshinsky-Moriya, dans l’herbertsmithite, dans le plan  $D_p$  et hors du plan kagomé  $D_z$ . Les points oranges représentent les ions  $\text{Cu}^{2+}$  de spin 1/2, les points bleus les oxygènes et les points blancs les hydrogènes. [figure tirée de la référence [117]]

expérimentales [38, 64].

**Structure et interactions dans l’herbertsmithite** Les couches de l’herbertsmithite sont composées d’ions  $\text{Cu}^{2+}$  distribués sur les sommets d’un réseau kagomé parfait, le groupe (OH) jouant le rôle de médiateur de l’interaction de super-échange d’intensité modérée entre les ions  $\text{Cu}^{2+}$ . Les ions  $\text{Zn}^{2+}$  sont non-magnétiques et occupent des positions entre les couches magnétiques, répartis sur un réseau triangulaire (Fig I.3). Le couplage magnétique entre les couches étant quasi inexistant, ce matériau est un parfait exemple de système à deux dimensions qu’est le réseau kagomé, avec une spin-1/2 sur chaque site. L’interaction dominante est isotrope, de type Heisenberg avec des couplages antiferromagnétiques ( $J$ ) entre les ions  $\text{Cu}^{2+}$  plus proches voisins. L’intensité est  $J \simeq 180(10)$  K, et aucun signe de *spin freezing* n’a été observé jusqu’à des températures de 50 mK, c’est-à-dire environ  $J/4000$ . Des études récentes [50] sur une version Mg de la herbertsmithite ( $\text{MgCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ ) ont poussé la limite à 20 mK, c’est-à-dire environ  $J/10000$  sans observer un signe d’ordre magnétique. L’absence de symétrie d’inversion implique que les interactions Dzyaloshinsky-Moriya (DM) [20, 66] ( $\mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)$ ) sont permises dans le hamiltonien. Des résultats de la mesure de la résonance du spin de l’électron nous ont appris qu’il existe une faible interaction DM dans le plan, autour de  $0.01J$  mais également des interactions plus importantes hors du plan, autour de  $0.04 - 0.08J$  [22, 117, 118] (voir Fig. I.4). Si l’état fondamental du hamiltonien de Heisenberg antiferromagnétique de spin 1/2 est un liquide de spin, alors après l’addition d’interactions DM (en perturbation), la phase liquide de spin persiste néanmoins. En revanche, dans le cas classique, même un faible taux d’interactions DM induit un ordre magnétique [23].

**Défauts de structure** Le premier type de défauts sont les défauts hors du plan, où les ions magnétiques  $\text{Cu}^{2+}$  occupent la place des ions non-magnétiques

$\text{Zn}^{2+}$  entre les plans de réseau kagomé, se comportant ainsi comme des spin-1/2 quasi libres. Le taux de substitution est estimé à 15(2)% à partir de diffraction de rayons X [26]. Cependant, ces défauts ont un impact négligeable sur la physique des plans kagomé jusqu'à des température d'environ 1K. Les autres défauts possibles sont les substitutions d'ions  $\text{Cu}^{2+}$  par des ions  $\text{Zn}^{2+}$  dans les plans kagomé, créant ainsi des lacunes magnétiques dans le plan. Le taux est estimé à environ 5%, déterminer par diffractions de rayons X [26] et études RMN [76].

**Nature de l'état fondamental** La physique des plans kagomé, qui est ce qui nous intéresse, est plus précise lorsqu'elle est capturée par des mesures locales, en particulier la RMN de l'oxygène de l'herbertsmithite, qui est responsable de l'échange entre les ions  $\text{Cu}^{2+}$ . Les mesures de susceptibilité utilisant la RMN  $^{17}\text{O}$  proposent un état fondamental sans gap, ou *gapless* [10, 76]. De la même manière, des mesures de susceptibilité dynamique utilisant la RMN et la diffusion inélastique de neutrons suggèrent un état fondamental *gapless* [18, 37, 38, 41, 76]. Il est important de mentionner également que l'utilisation de techniques optiques, en particulier la spectroscopie Raman, propose un comportement de liquide de spin sans gap de type algébrique [108].

Certaines études théoriques suggèrent que des phases compétitives à la phase liquide de spin *gapless* [42–44] existent. Ces phases sont (i) un liquide de spin gappé  $\text{Z}_2$  [19, 112] et (ii) un cristal à liens de valence à 36 sites [95, 96]. Ces deux phases sont en contradiction avec les recherches expérimentales. Dans toutes les expériences menées sur l'herbertsmithite, aucun gap singulet n'a été observé, même en dessous de  $J/100$ , ce fait étant incompatible avec gap singulet relativement grand  $J/20$  prédit par des méthodes DMRG [112]. Concernant le cristal à liens de valence, il n'y a absolument aucune trace dans les données concernant l'herbertsmithite suggérant la formation de singulet localisé (dimère) suivant le motif décrit par le cristal à liens de valence à 36 sites. Toutefois, il convient de souligner qu'un cristal de liens de valence peut avoir des fluctuations quantiques fortes qui suppriment le paramètre d'ordre, ces cristaux étant donc proches du point critique et ne brisent que faiblement la symétrie de translation, qui est extrêmement difficile à détecter et à distinguer des liquides de spin. La possibilité d'avoir ce type de cristal ne peut donc pas être totalement éliminée. Des études utilisant la diagonalisation exacte (ED), qui atteignent maintenant des tailles de système de 48 sites, apportent un argument supplémentaire que, à la limite thermodynamique, l'état fondamental ne possède pas de gap. Au final, les données expérimentales établissent que l'herbertsmithite est un liquide de spin *gapless*. Un des rôles de la théorie est de mieux comprendre la manière et à quel point le modèle de Heisenberg est affecté par la présence dans le plan et hors du plan des défauts et de l'anisotropie Dzyaloshinsky-Moriya.

## 1.2 Volborthite

La volborthite (Fig. I.2c), de composition chimique  $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_7(\text{OH})_2 \cdot 2(\text{H}_2\text{O})$ , est un composé de réseaux kagomé d'ions  $\text{Cu}^{2+}$ . Cependant, l'environnement des ions de cuivres varient, menant à deux types d'ions inéquivalents Cu1 et Cu2. Les

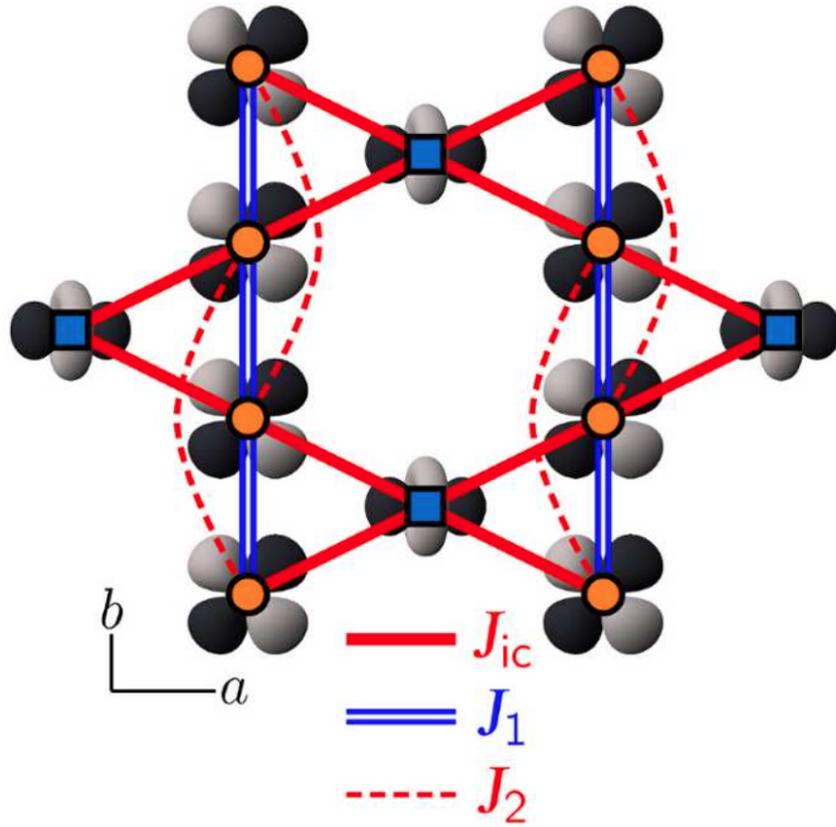


FIGURE I.5 – Réseau kagomé de spin 1/2 “distordu” de la volborthite. [figure tirée de la référence [46]]

interactions engendrées par ces environnements vont alors dépendre des liens : le réseau kagomé est “distordu” [46] (Fig. I.5). Cette distorsion est identifiée par trois constantes de couplages  $J_{ic}$ ,  $J_1$  et  $J_2$ . Bien que les termes de couplages  $J_{ic}$ ,  $J_2 > 0$  donnent des couplages antiferromagnétiques, le troisième couplage est ferromagnétique  $J_1 < 0$ . L’intensité relative de ces couplages est  $J_{ic} \simeq 2|J_1|$  et  $J_2 \simeq 1.1|J_1|$ . Le système peut être vu comme des chaînes frustrées  $J_1 - J_2$  en interaction les unes les autres via le couplage  $J_{ic} \simeq 100\text{K}$ . L’état fondamental, sondé par RMN du  $^{51}\text{V}$  [8, 113], résonance du spin électronique (ESR) [74] et relaxation du spin muonique ( $\mu\text{SR}$ ) [9], semble ne pas présenter d’ordre à longue portée.

Grâce aux avancés techniques dans le domaine des champs magnétiques intenses, on est capable d’appliquer des champs magnétiques suffisamment importants pour induire des transitions de phase quantiques dans la matière. En particulier, des mesures sur des poudres de volborthite [73], à 1.3K et sous champ magnétique allant jusqu’à 68T, ont permis d’observer ce qui pourrait être un plateau d’aimantation à 1/3 de l’aimantation totale (voir Fig. I.6). Cette particularité dans la courbe d’aimantation est le fait de la frustration magnétique du matériau. Très récemment, on a été capable de synthétiser un monocristal de volborthite [45]. Ce monocristal, placé sous un champ magnétique intense, allant jusqu’à plus de 70 Tesla à 1.4K, présente clairement un plateau à 1/3 (Fig. I.7). Une nouvelle phase,

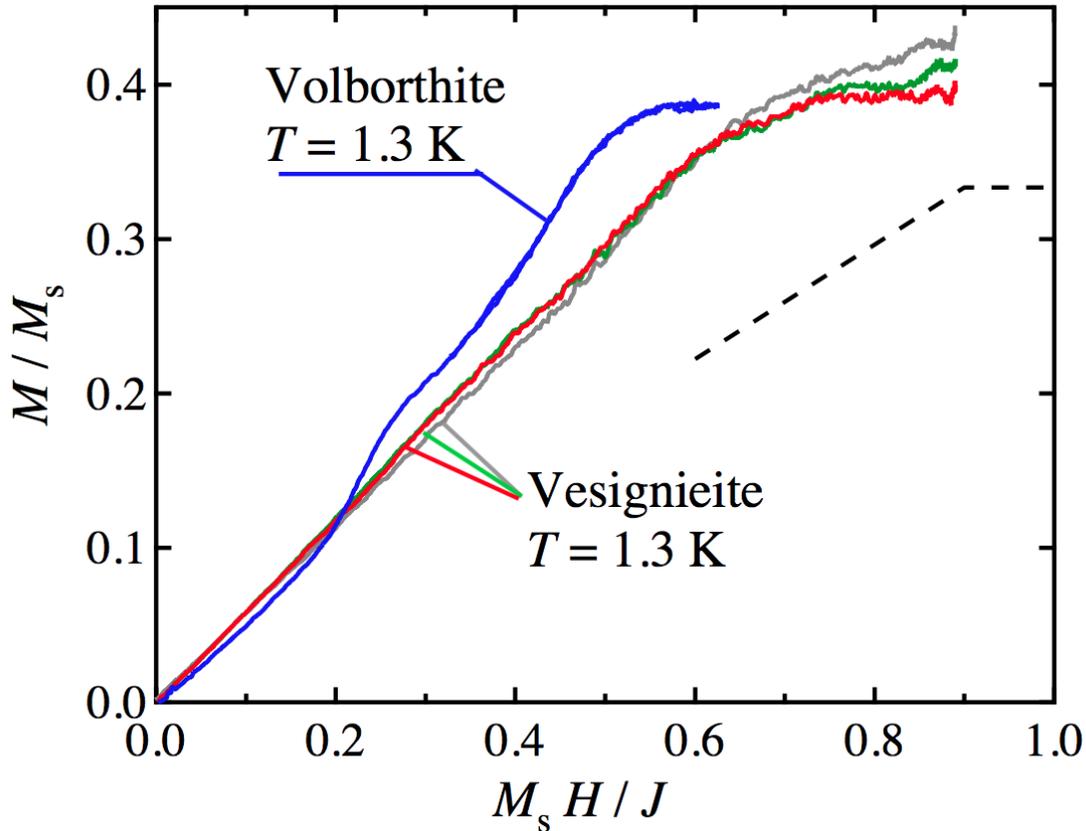


FIGURE I.6 – Aimantation de la volborthite et de la vesignieite ( $S = 1/2$ ) sous champ magnétique intense (jusqu'à 68T) mesuré à 1.3K. [figure tirée de la référence [73]]

appelée phase N, a également été découverte dans l'intervalle 23.6 – 25T, mais ne sera pas discuté ici (cf Réf [45]). L'identification de phases induites par champ magnétique est le cœur de cette thèse.

### 1.3 Vesignieite

Tout comme les deux autres composés kagomé de spin 1/2, la vesignieite,  $\text{BaCu}_3\text{V}_2\text{O}_8(\text{OH})_2$ , est un composé kagomé d'ions  $\text{Cu}^{2+}$  (voir Fig. I.8(a)). La vesignieite est spatialement plus isotrope que la volborthite et contient moins d'impureté magnétique que l'hebertsmithite [15]. Étudié par RMN du vanadium  $^{51}\text{V}$  [89], la vesignieite semble présenter un léger ordre à longue portée à basse température. Bien que la susceptibilité ait un comportement similaire à celle de l'hebertsmithite, typique d'un liquide de spin, un ordre partiel apparaît. L'anisotropie de DM est une piste dans l'explication de ce comportement inhabituel. Des mesures ESR [116] ont mis en évidence le fait que cette anisotropie dans le plan réduit considérablement les fluctuations quantiques, provoquant ainsi un ordre à longue portée. Les axes des anisotropies DM sont présentés sur la figure I.8 (b).

Sur la figure I.6, nous pouvons voir la courbe d'aimantation mesurée à 1.3K sous champ magnétique jusqu'à 68T. La comparaison avec la courbe d'aimantation

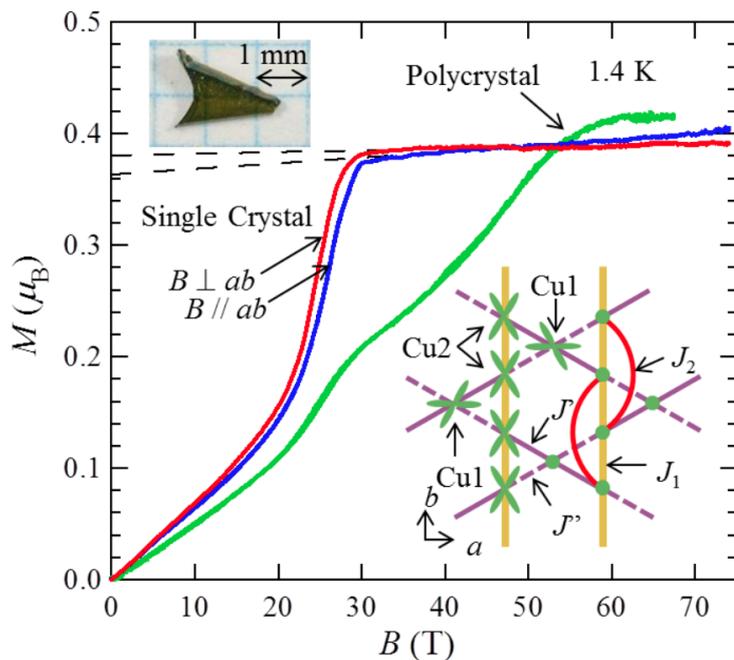


FIGURE I.7 – Aimantation mesuré à 1.4K sur un monocristal de volborthite ( $S = 1/2$ ) sous champ magnétique. [figure tirée de la référence [45]]

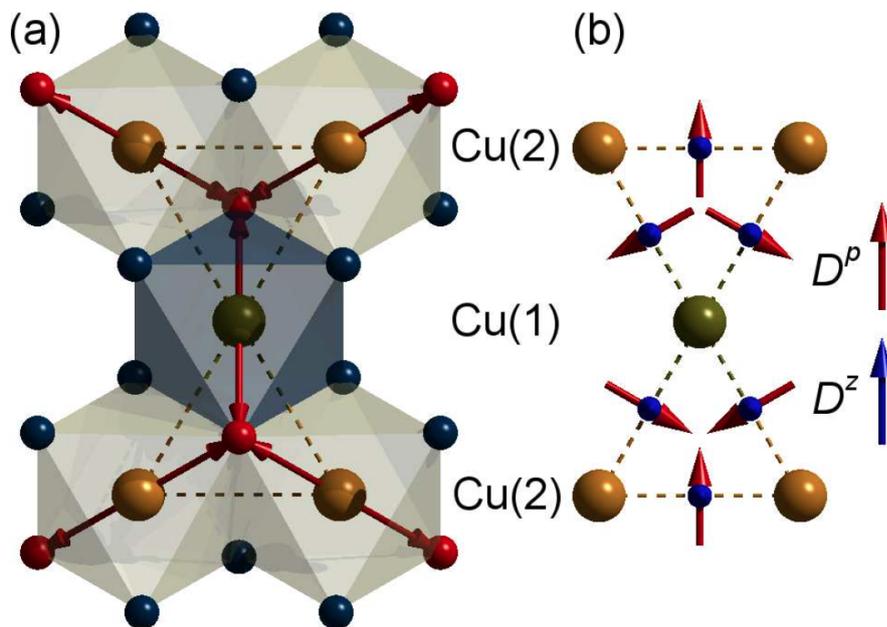


FIGURE I.8 – (a) Représentation de la vesignieite composée d'ions  $\text{Cu}^{2+}$  de spin  $1/2$ . Les cuivres Cu1 sont représentés en vert et les cuivres Cu2 en oranges. (b) Interaction Dzyaloshinsky-Moriya dans la vesignieite, dans le plan  $D_p$  et hors du plan  $D_z$ . [figure tirée de la référence [116]]

de la volborthite et la courbe théorique (en pointillé) peut servir d'argument pour rapprocher le modèle théorique de l'un ou l'autre de ces matériaux (en particulier, la courbe théorique se rapproche plus de la vesignieite que de la volborthite).

## 2 Spin 1

### 2.1 Composé organique

Le composé organique m-MPYNN.BF<sub>4</sub> [3, 4] est formé de réseaux kagomé où deux spins 1/2 sont en interaction ferromagnétique ( $J_0 \simeq -23\text{K}$ ) sur chaque site du réseau. Ces spins interagissent avec les sites proches voisins via un couplage antiferromagnétique plus faible,  $J \simeq 3\text{K}$ . L'état fondamental présente un gap [103] et l'analyse de la susceptibilité ne présente aucun pic, indiquant que le système ne passe par aucune transition de phase vers une phase ordonnée. La courbe d'aimantation [62] montre des plateaux à 0, 1/2 et 3/4 (voir Fig. I.9). Ces observations sont en contradiction avec les résultats théoriques (que nous verrons plus tard). Pour rendre compte de ces différences, il faut d'abord prendre en compte des déformations dans le réseau car il peut changer ses symétries. Par exemple, le composé m-EPYNN.BF<sub>4</sub>, où de faibles déformations sont induites dans une structure kagomé similaire, acquiert des propriétés ferromagnétiques [30]. De plus, cela pourrait être dû à des interactions de plus longue portée telles que des interactions seconds voisins ou encore des interactions d'échange à plusieurs sites peuvent intervenir. Toutefois, l'analyse de la susceptibilité magnétique (voir Fig.I.10) montre des traces de la présence éventuelle d'un petit plateau à 1/12 ou 1/6 et d'un petit plateau à 1/3.

### 2.2 Composés de vanadium

Certains composé à base de vanadium sont formés de réseaux kagomé d'ions de spin 1 V<sup>3+</sup> en interaction magnétique. Bien que dans le composé YCa<sub>3</sub>(VO)<sub>3</sub>(BO<sub>3</sub>)<sub>4</sub> [65] (Fig. I.11), un nombre important d'impuretés soient détectés, et que dans le composé KV<sub>3</sub>Ge<sub>2</sub>O<sub>9</sub> [34] (Fig. I.12), la présence éventuelle d'interactions ferromagnétiques entrant en compétition avec les interactions antiferromagnétiques, éloignent ces matériaux des modèles homogènes purement antiferromagnétiques. De tels composés possèdent néanmoins un gap de spin et restent de bons candidats pour présenter un comportement décrit par ces modèles.

### 2.3 Composés de nickel

Notons simplement qu'il existe d'autres composés formés de feuillets de réseau kagomé, pour lesquelles les ions peuvent présenter des interactions antiferromagnétiques. L'un des ces composés est le composé kagomé "en escalier" Ni<sub>3</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub>, pour lequel des mesures de propriétés thermodynamiques et de diffusion RMN ont permis d'identifier plusieurs phases à basse température (<12K) [51].

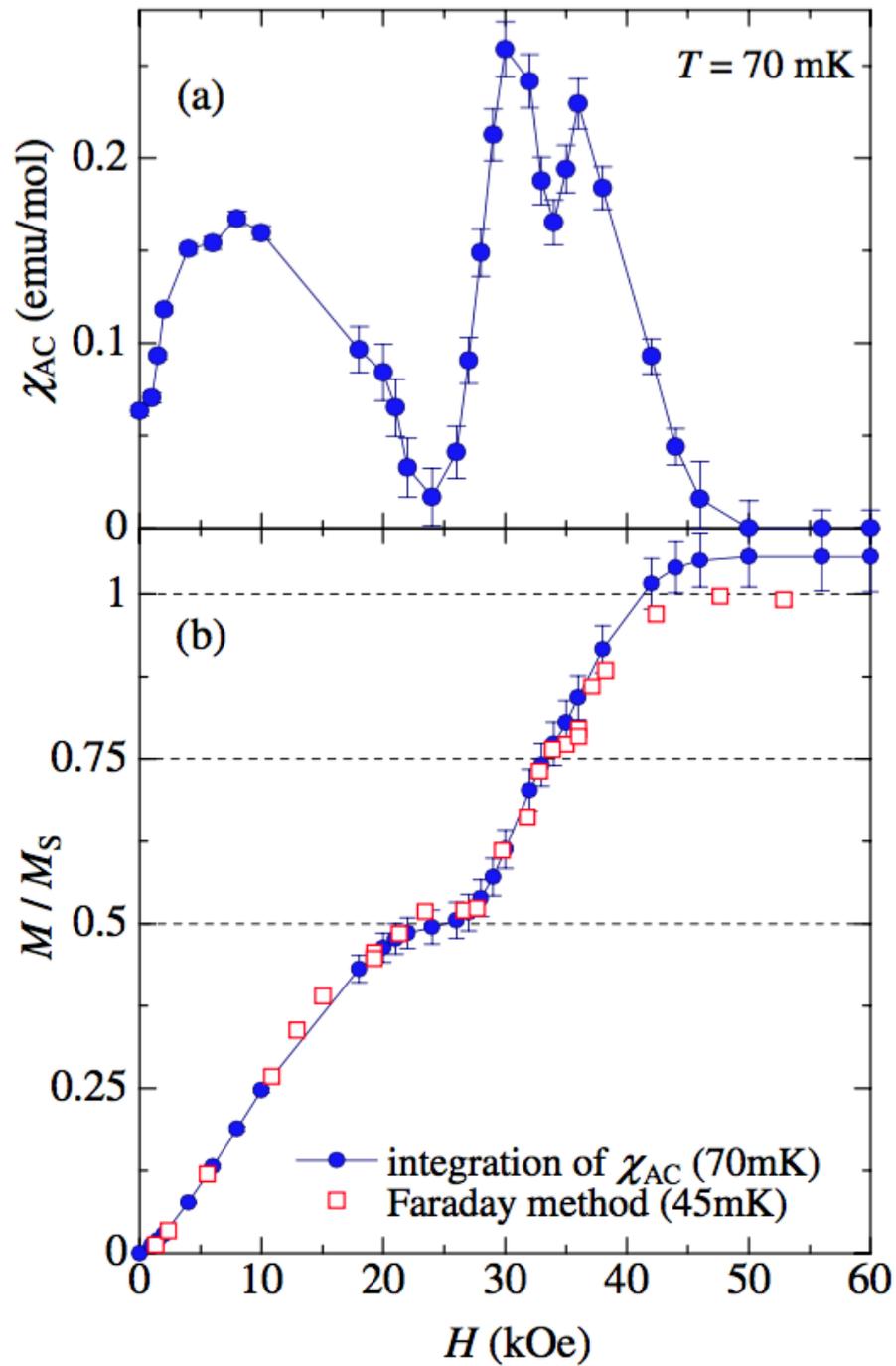


FIGURE I.9 – (a) Susceptibilité magnétique mesurée à  $T = 70$  mK en fonction du champ magnétique dans le composé m-MPYNN.BF<sub>4</sub> de spin 1. (b) Aimantation longitudinale réduite en fonction du champ magnétique dans ce même composé. Les points bleus sont calculés à partir de l'intégration de la susceptibilité. Les carrés rouges proviennent de mesures directes de l'aimantation, utilisant la méthode de Faraday. [figure tirée de la référence [62]]

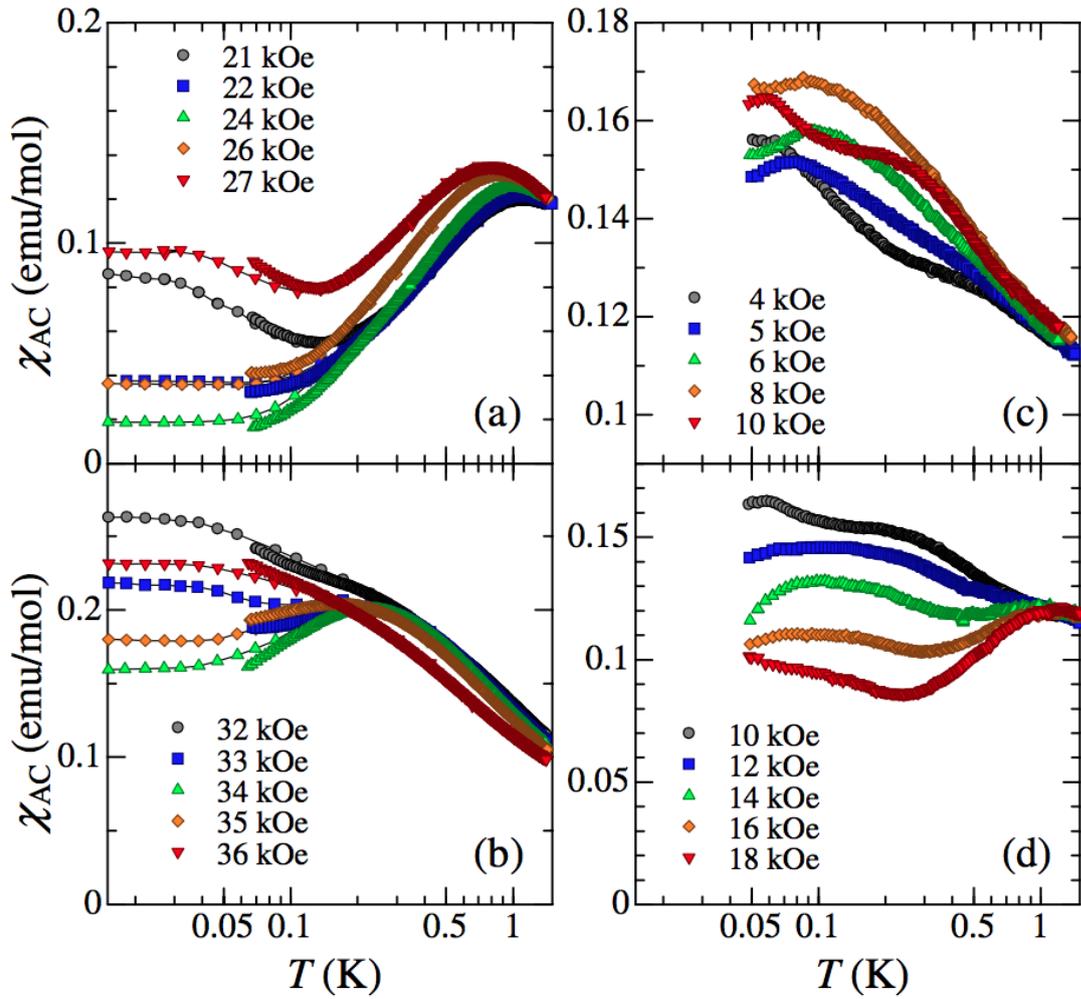


FIGURE I.10 – Susceptibilité magnétique mesurée en fonction de la température dans un composé  $m\text{-MPYNN.BF}_4$  ( $S = 1$ ) pour différentes valeurs du champ magnétique. [figure tirée de la référence [62]]

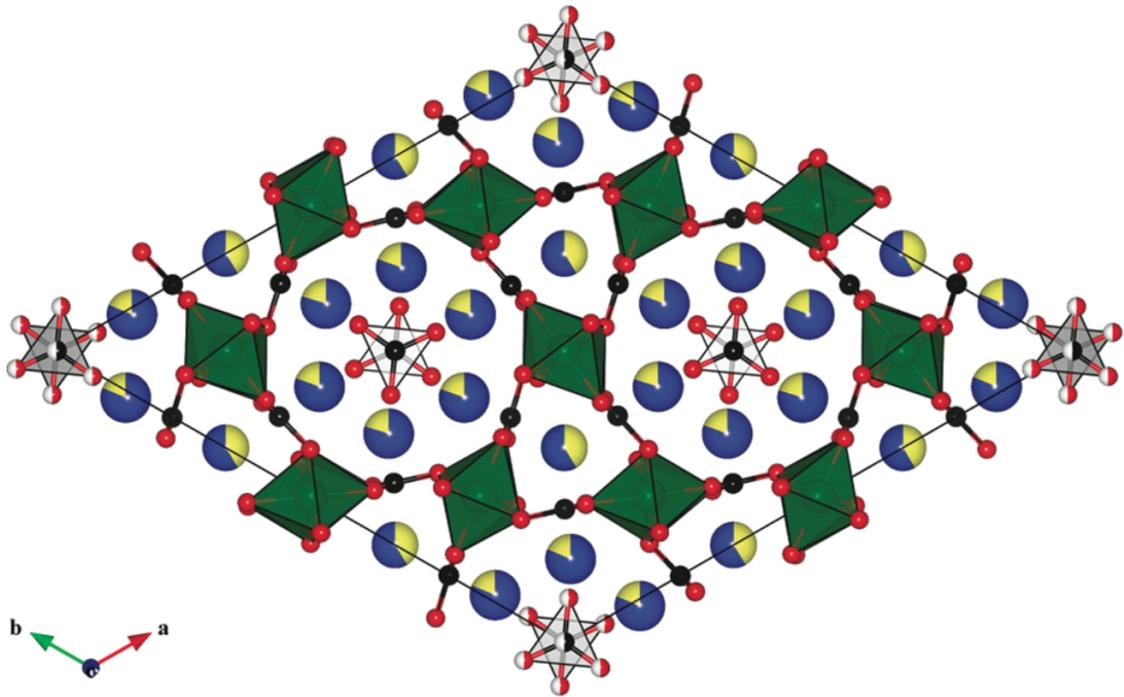


FIGURE I.11 – Structure du composé  $\text{YCa}_3(\text{VO})_3(\text{BO}_3)_4$  d'ions  $\text{V}^{3+}$  de spin 1 à 150K déterminée par diffusion de neutrons et de rayons X. Les atomes d'yttrium sont représentés en jaune, les atomes de calcium en bleu, les atomes de vanadium et les octaèdres  $\text{VO}_6$  en vert, les atomes de bore et les triangles  $\text{BO}_3$  en noir et les atomes d'oxygène en rouge. L'occupation fractionnelle est représentée par des sphères segmentées (le blanc représente un site vide). [figure tirée de la référence [65]]

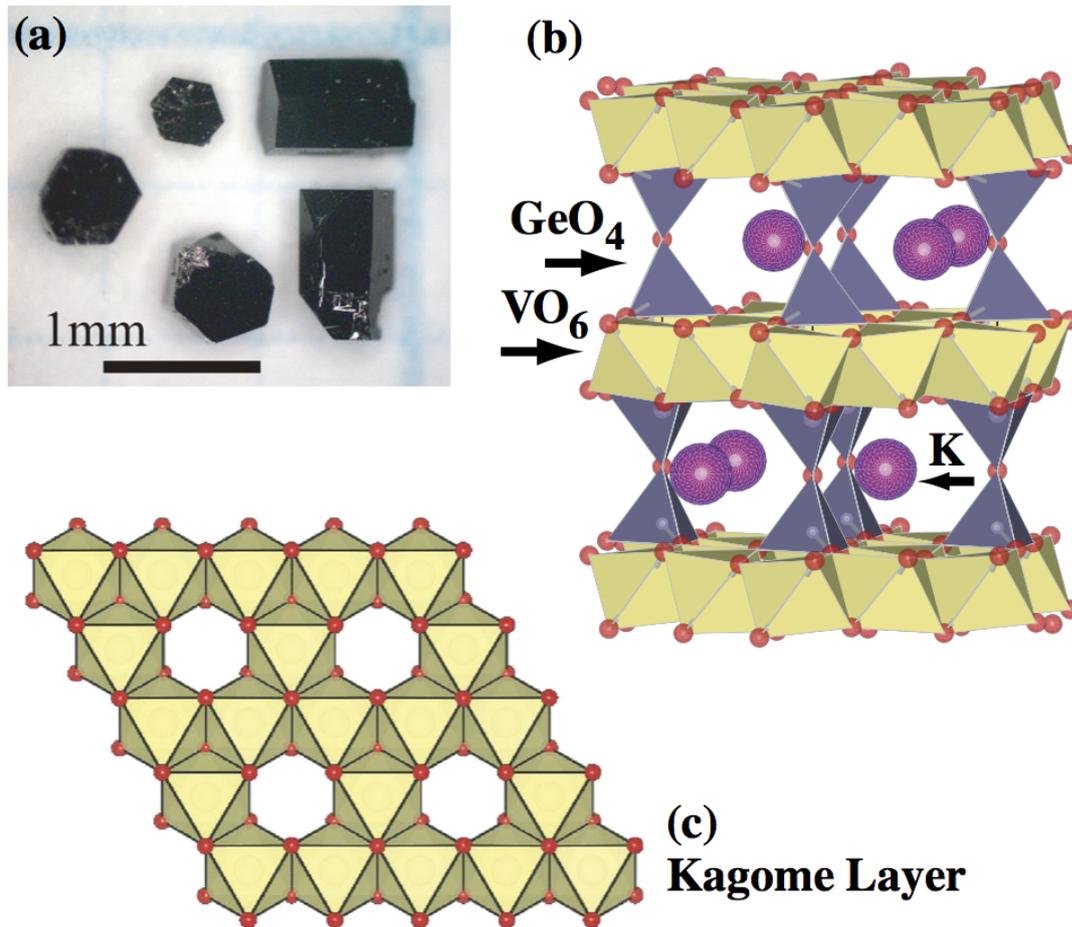


FIGURE I.12 – (a) Photographie de l'oxyde de vanadium  $KV_3Ge_2O_9$ . (b) Structure cristalline du  $KV_3Ge_2O_9$ . Les tétraèdres et les octaèdres correspondent au groupement  $GeO_4$  et  $VO_6$ , respectivement. (c) Couche d'octaèdre  $VO_6$ . Les ions de vanadium, situés au milieu des octaèdres, forment un réseau kagomé de spin 1. [figure tirée de la référence [34]]

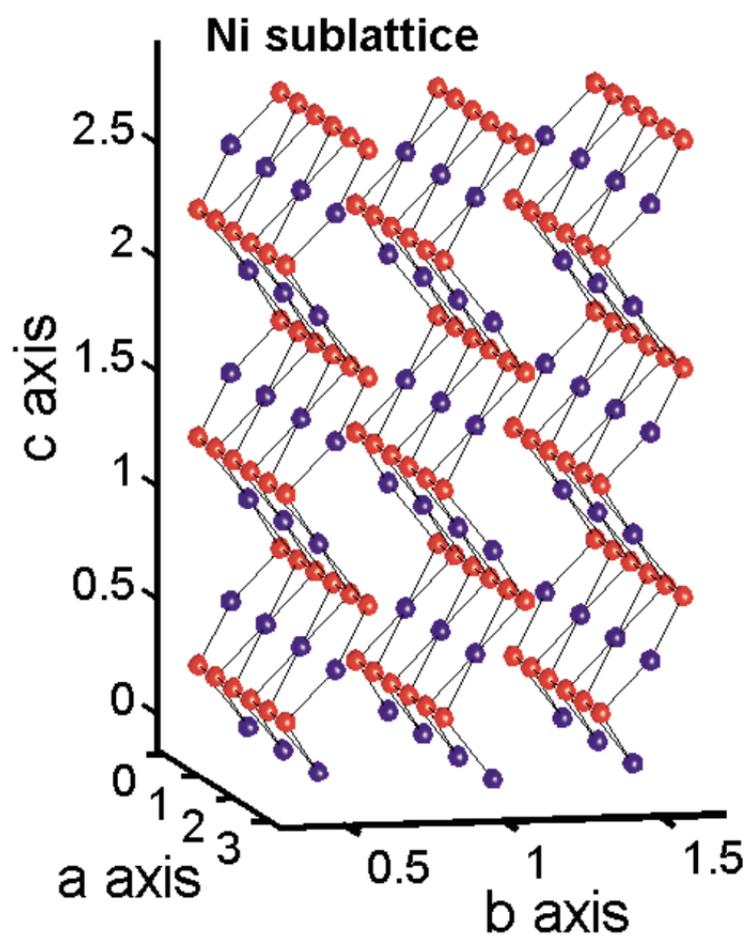


FIGURE I.13 – Structure des ions de nickel dans le composé  $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_8$ . Des couches de réseau kagomé en forme d’escalier se superposent. Les deux types de nickel  $\text{Ni}^{2+}$  de spin 1 sont représentés en bleu et en rouge. [figure tirée de la référence [51]]

À titre d'information, mentionnons le composé  $\text{BaNi}_3(\text{OH})_2(\text{VO}_4)_2$  [25], structurellement analogue à la vesignieite, qui présente des interactions antiferromagnétiques et ferromagnétiques, ainsi qu'une transition vitreuse à 19K.

### 3 Spin 3/2

Il existe deux types de jarosite, la jarosite ferreuse  $\text{KFe}_3(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_2$  (également appelé Fe-jarosite ou simplement jarosite) et la jarosite chromée  $\text{KCr}_3(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_2$  (abrégée Cr-jarosite). Le magnétisme de la jarosite ferreuse est formé d'ions  $\text{Fe}^{3+}$  de spin  $5/2$ , en interaction antiferromagnétique, sur un réseau kagomé [97]. Ce matériau possède un ordre à longue portée, structure à  $120^\circ$ , à une température inférieure à 65K [75]. Le composé qui nous intéresse ici est la jarosite chromée, où les ions  $\text{Cr}^{3+}$  de spin  $3/2$  se substituent aux ions  $\text{Fe}^{3+}$  de la jarosite ferreuse. De la même façon, la physique des spins est décrite par des interaction antiferromagnétique sur un réseau kagomé et une transition vers une phase ordonnée apparaît à des températures très basses, inférieur à 4.5K [75]. Des mesures de susceptibilité magnétique sous champ magnétique intense [72] (jusqu'à 60T) ont mis en évidence une anomalie dans la courbe d'aimantation à  $1/3$  de l'aimantation totale. Cette anomalie apparaît lorsque que le champ magnétique est appliqué parallèlement aux plans kagomé. À faible température, des interactions ferromagnétiques et des couplages DM, causent de l'ordre à basse température, réduisent l'anomalie à  $1/3$  lorsque l'on diminue la température.

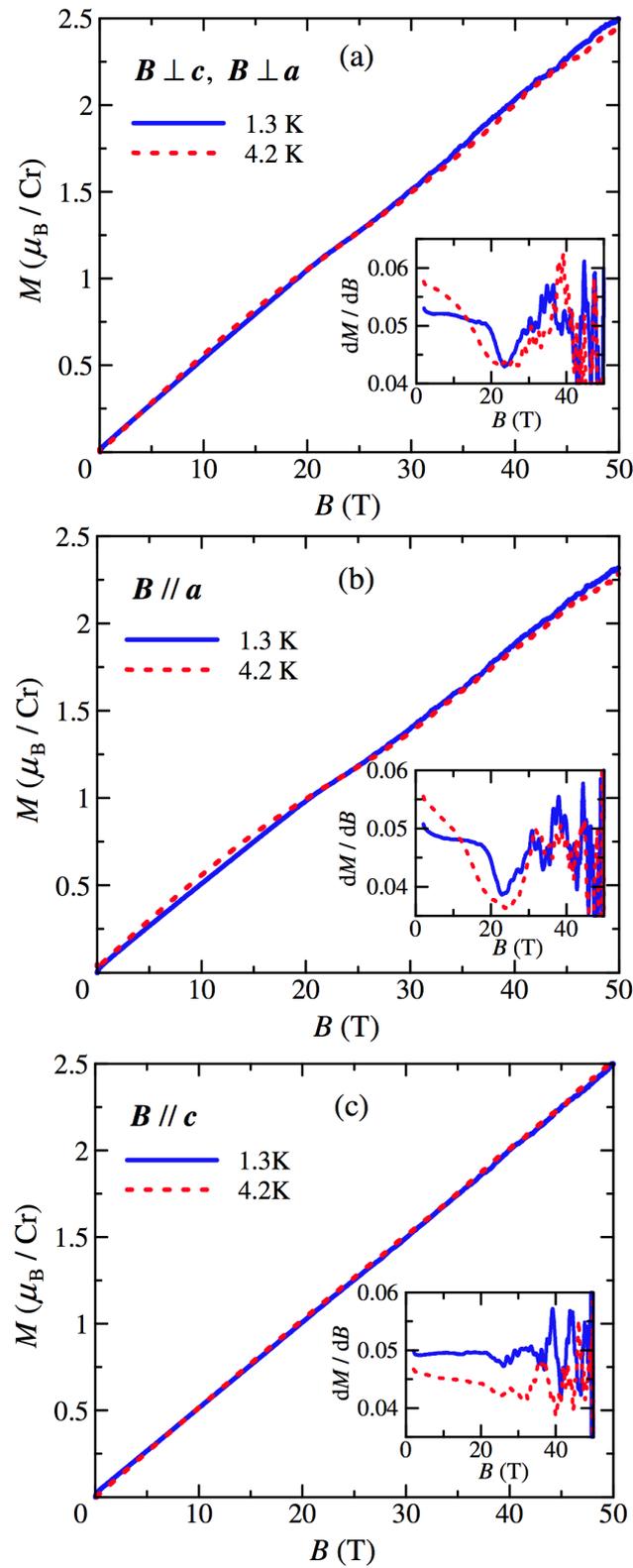


FIGURE I.14 – Aimantation sous champ magnétique intense de la jarosite chromée (Cr-jarosite) ( $S = 3/2$ ) dans le plan (a,b) et perpendiculaire au plan (c), en fonction de l'intensité du champ magnétique. Les encarts montrent la susceptibilité magnétique  $dM/dB$ . Nous voyons que l'anomalie semble se réduire lorsque la température diminue. [figure tirée de la référence [72]]

Nous venons de voir qu'il existe un grand nombre de composés kagomé antiferromagnétiques frustrés. Les ions responsables des interactions magnétiques peuvent prendre différentes valeurs de spin et être soumis à des interactions supplémentaires, comme des interactions faiblement ferromagnétiques induites par des déformations du réseau et des interactions Dzyaloshinsky-Moriya anisotropes. Cette thèse a pour but d'étudier la physique centrale de ce type de système, c'est-à-dire des modèles ne comportant que les interactions dominantes (antiferromagnétiques) et de simuler leur comportement sous un champ magnétique. La compréhension de cette physique simplifiée est un point de départ important dans l'étude des matériaux réels, présentant une grande complexité, comme nous venons de le voir.

# Chapitre II

## Modèles étudiés et méthodes

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Modèles théoriques . . . . .</b>	<b>24</b>
1.1	Frustration magnétique . . . . .	24
1.2	Un exemple de système frustré : le réseau kagomé . . .	25
1.3	Hamiltonien . . . . .	28
1.4	Couplage Zeeman . . . . .	32
<b>2</b>	<b>Une méthode novatrice : les réseaux de tenseurs . . .</b>	<b>35</b>
2.1	Introduction . . . . .	35
2.2	Une dimension : <i>Matrix Product State</i> . . . . .	36
2.3	Deux dimensions : <i>Projected Entangled Pair State</i> . . .	51
2.4	Représentations exactes de fonctions d'onde analytiques en termes de réseaux de tenseurs . . . . .	55
2.5	Méthodes d'optimisation . . . . .	65

---

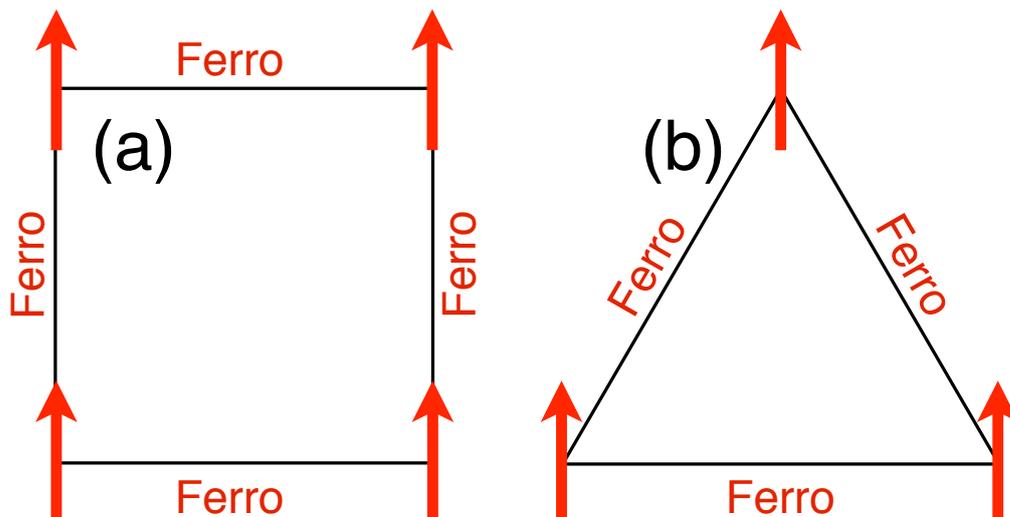


FIGURE II.1 – Interactions ferromagnétiques aux plus proches voisins sur un carré (a) et un triangle (b). Dans les deux cas, chaque lien minimise l'énergie.

Afin de décrire les matériaux présentés dans le chapitre précédent, un certain nombre de modèles théoriques ont été développés et étudiés. Tous sont des modèles effectifs, qui ne prennent en compte que les états de plus basse énergie, simplifiant ainsi l'analyse du modèle *ab initio* issu de l'équation de Schrödinger. Nous poserons par la suite  $\hbar = 1$  pour simplifier l'écriture des hamiltoniens.

## 1 Modèles théoriques

### 1.1 Frustration magnétique

Prenons un système de spins d'Ising  $\sigma$  où les valeurs possibles de  $\sigma$  sont  $+1$  et  $-1$ , représentées sur les figures par une flèche pointant vers le haut et vers le bas, respectivement. Supposons maintenant que l'énergie d'un lien  $l$  soit donnée par  $e_l = -\sigma_i\sigma_j$ , où  $i$  et  $j$  sont les deux sites appartenant au lien  $l$ . Il apparaît alors que pour minimiser l'énergie, les deux spins doivent avoir la même orientation. Si nous considérons maintenant un réseau quelconque, de dimension et de taille arbitraires, l'énergie totale minimum est atteinte si tous les spins sont dirigés vers le haut, ou tous dirigés vers le bas. La figure II.1 montre le cas pour quatre sites sur un carré et trois sites sur un triangle. L'énergie totale minimise l'énergie locale de chaque lien. On parle ici de ferro-aimant puisque les interactions internes au système font émerger une aimantation macroscopique.

Considérons maintenant que l'énergie d'un lien soit donnée par  $e_l = \sigma_i\sigma_j$ , énergie due à une interaction antiferromagnétique. Pour minimiser localement l'énergie, les deux spins d'Ising doivent avoir des sens opposés. Sur la figure II.2, deux systèmes antiferromagnétiques sont représentés, le système triangulaire étant frustré tandis que le système carré ne l'est pas. En effet, sur le carré, tous les liens minimisent leur énergie alors que pour le triangle, il existe un spin dit "frustré" qui peut prendre indifféremment la valeur  $+1$  ou  $-1$  sans changer l'énergie totale du

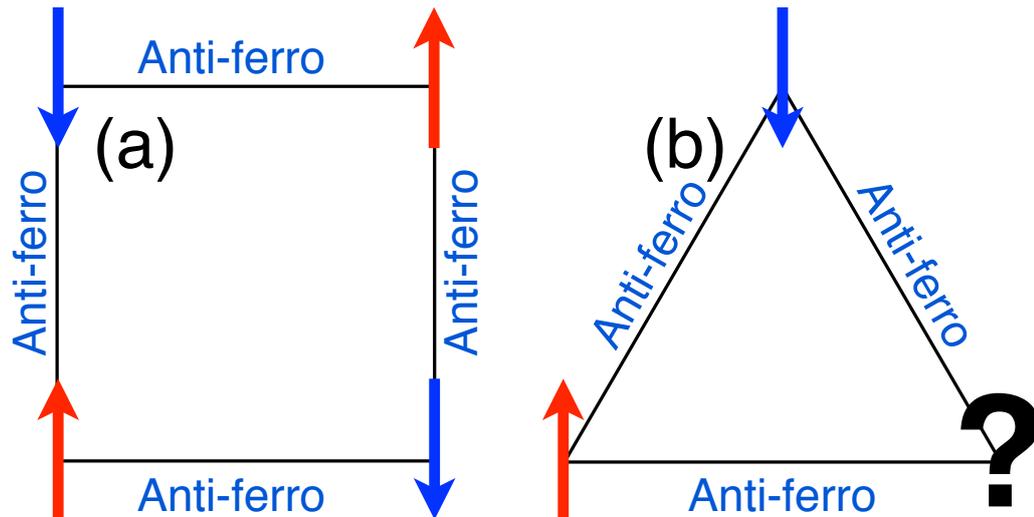


FIGURE II.2 – Interactions antiferromagnétiques aux plus proches voisins. Sur le carré (a), chaque lien minimise l'énergie. Sur le triangle (b), la géométrie interdit une minimisation locale pour chaque lien. Le troisième spin est alors frustré, ce qui donne naissance à une dégénérescence macroscopique (6 fois dégénéré dans le cas du triangle).

système : c'est la frustration géométrique [105].

Il existe également une frustration d'interaction où ce n'est plus le type de réseau qui amène la frustration mais le type d'interaction du matériau, comme par exemple sur la figure II.3, avec des interactions aux plus proches voisins (le long des arêtes du carré) antiferromagnétiques, mais également aux seconds proches voisins (sur les diagonales du carré). Ce type de frustration peut également être dû au désordre si par exemple, le couplage est aléatoirement ferromagnétique ou antiferromagnétique (voir Fig. II.4).

Dès lors, il existe une multitude de systèmes comportant ce type de phénomènes, parmi lesquels nous étudierons les modèles sur réseau kagomé antiferromagnétiques.

## 1.2 Un exemple de système frustré : le réseau kagomé

De son vrai nom pavage tri hexagonal, le réseau kagomé est un parfait exemple de réseau géométriquement frustré à deux dimensions. Comme décrit dans le paragraphe précédent, lorsque sur un triangle nous avons des couplages antiferromagnétiques, la frustration émerge alors naturellement du système. Le réseau kagomé (voir Fig. II.5) est composé de triangles n'ayant en commun qu'un seul angle entre eux, à la différence du réseau triangulaire où les triangles se partagent un côté. Nous avons également vu que le troisième spin du triangle peut fluctuer entre ses deux valeurs sans changer l'énergie totale du système ; il s'agit d'une propriété très importante car le nombre d'état de même énergie (minimum) croît exponentiellement avec la taille du système. À la limite thermodynamique, nous avons une "dégénérescence macroscopique" de l'état fondamental.

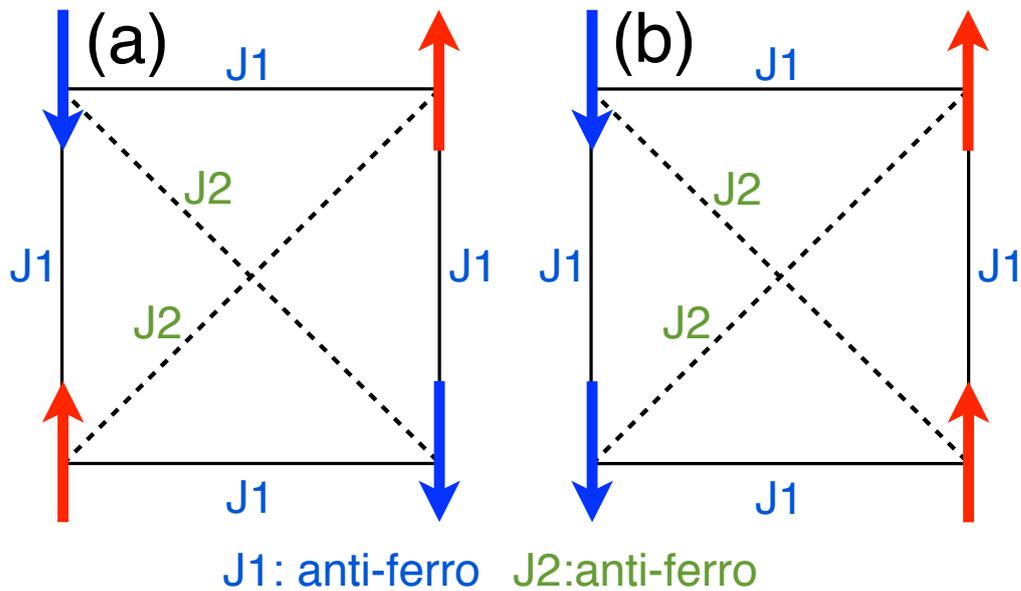


FIGURE II.3 – Interactions antiferromagnétiques aux plus proches et seconds voisins. La frustration est due aux interactions. Dans le cas (a), les spins minimisent l'énergie sur les arêtes du carré. Dans le cas (b), les spins minimisent l'énergie sur les diagonales ainsi que sur les arêtes horizontales.

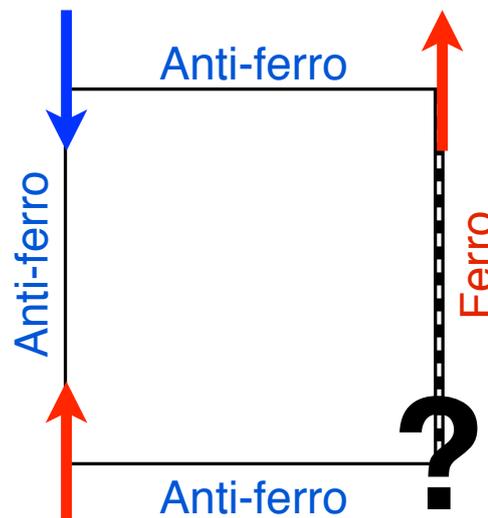


FIGURE II.4 – Interactions antiferromagnétiques et ferromagnétiques réparties aléatoirement sur les arêtes d'un carré menant à un système frustré. Ce type de frustration est due aux interactions et non plus à la géométrie.

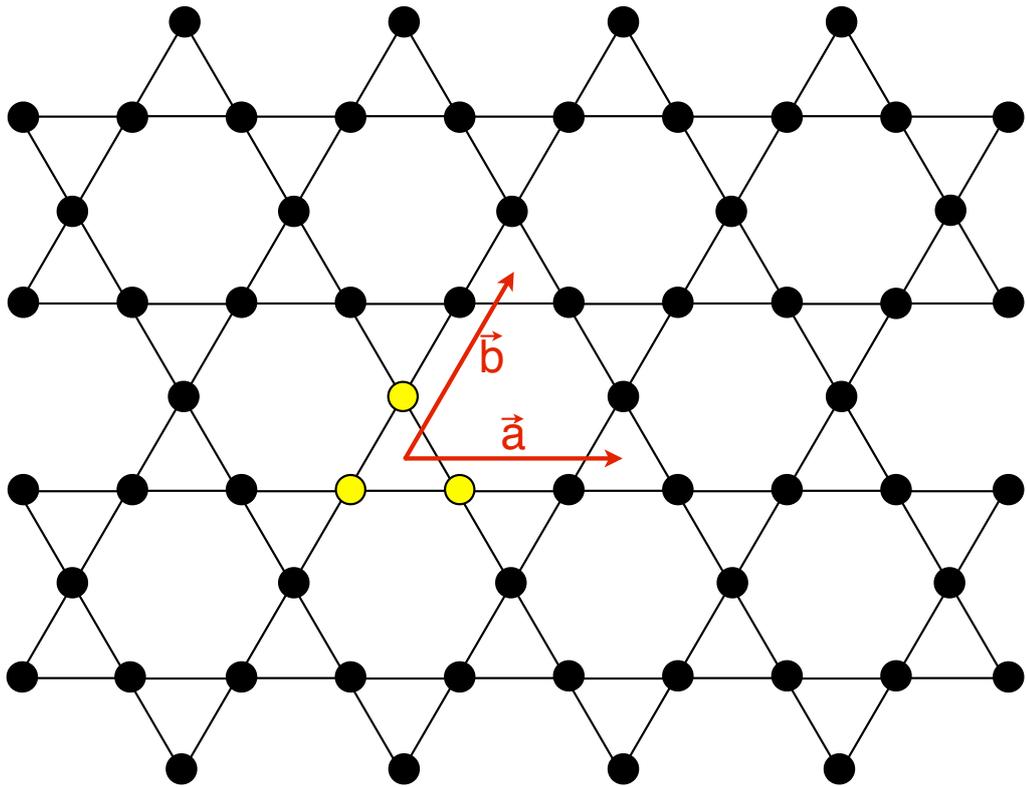


FIGURE II.5 – Réseau kagomé, composé de triangles partageant un angle avec les triangles voisins. La cellule élémentaire est composée de trois sites localisés aux angles d'un triangle, représentée en jaune, et les vecteurs de réseau  $\vec{a}$  et  $\vec{b}$  sont représentés en rouge.

### 1.3 Hamiltonien

Les modèles de base de la matière condensée sont issus de l'équation de Schrödinger dans le paradigme de la seconde quantification

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\sigma} \iiint d^3r \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left[ -\frac{\hbar}{2m} \Delta + V_{\text{lattice}}(\vec{r}) \right] \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \\ & + \sum_{\sigma, \sigma'} \int \dots \int d^3r d^3r' \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') U_{\text{eff}}(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (\text{II.1})$$

avec  $\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r})$  l'opérateur de création d'un électron de spin  $\sigma$  et de fonction d'onde  $\psi(\vec{r})$ . Le terme  $-\frac{\hbar}{2m} \Delta$  correspond à l'énergie cinétique de l'électron,  $V_{\text{lattice}}$  est le potentiel créé par les ions du cristal et  $U_{\text{eff}}$  est l'énergie d'interaction coulombienne effective entre deux électrons, modifiée par l'effet d'écrantage des autres électrons. La limite  $U_{\text{eff}} \rightarrow 0$  conduit à la théorie des bandes, puisque les électrons n'interagissent pas dans son interprétation. Le fait que  $U_{\text{eff}} \neq 0$  mène à l'étude de système d'électrons corrélés. Un changement de base dans la base locale et discrète des sites du réseau  $\hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) = \sum_i \phi_i^*(\vec{r}) c_{i,\sigma}^{\dagger}$  et l'approximation du spectre de basse énergie nous permet d'établir le célèbre modèle de Hubbard

$$\mathcal{H}_{\text{Hubbard}} = - \sum_{i>j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} \quad (\text{II.2})$$

Le premier terme est le *terme de saut* et le deuxième terme "compte" le nombre d'électrons sur le site  $i$ , avec  $n_{i\sigma} = c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}$ . La valeur de  $t/U$  est une "mesure" de la conductivité du matériau. Bien que les électrons interagissent à longue portée, la répulsion sur site  $U$  étant bien plus grande que la répulsion sur deux sites différents, cet élément pourrait être ajouté de façon perturbative au modèle mais ne contribuerait pas au spectre de basse énergie. L'opérateur  $c_{i,\sigma}^{\dagger}$  crée un électron localisé sur le site  $i$  et de spin  $\sigma$ . L'opérateur  $n_{i,\sigma}$  compte le nombre d'électrons de spin  $\sigma$  sur le site  $i$ . Il ne peut prendre que les valeurs 0 ou 1. En prenant la limite  $U \gg t$ , nous arrivons au modèle  $t$ - $J$

$$\mathcal{H}_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left( \tilde{c}_{i\sigma}^{\dagger} \tilde{c}_{j\sigma} + \tilde{c}_{j\sigma}^{\dagger} \tilde{c}_{i\sigma} \right) + J \sum_{\langle i,j \rangle} \left( \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right) \quad (\text{II.3})$$

où  $\langle i, j \rangle$  est la somme entre les premiers proches voisins,  $\tilde{c}_{i\sigma} = c_{i\sigma} (1 - n_{i\bar{\sigma}})$ ,  $J$  est la constante de couplage magnétique,  $\mathbf{S} = S^x \mathbf{u}_x + S^y \mathbf{u}_y + S^z \mathbf{u}_z$  et  $n_i = \sum_{\sigma} n_{i,\sigma}$ . Cette modification interdit la double occupation sur chaque site  $i$ , quelque soit le spin des électrons. Dans le cas de demi-remplissage, le nombre d'électrons  $n_e$  est égal au nombre de sites  $N$ . Chaque site est alors occupé par un et un seul électron, ce qui interdit aux électrons de se déplacer sur le réseau : nous avons alors un isolant de Mott. D'après le hamiltonien, il ne reste plus qu'une interaction magnétique au plus proches voisins.

#### 1.3.1 Modèle Heisenberg et ses descendants

Les matériaux isolants deviennent alors purement magnétiques, et présente donc des hamiltoniens magnétiques dont le plus connu est le hamiltonien de Hei-

senberg

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (\text{II.4})$$

On dit que l'interaction est ferromagnétique si  $J < 0$  et antiferromagnétique si  $J > 0$ . Il peut se réécrire sous la forme

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \quad (\text{II.5})$$

Le premier terme est le terme d'Ising pour le cas de spins  $S = \frac{1}{2}$  et le second terme permet des échanges de spins du type  $|\uparrow\downarrow\rangle \rightarrow |\downarrow\uparrow\rangle$ . Celui-ci peut se généraliser par des interactions à plus longue portée et dépendantes des liens

$$\mathcal{H} = \sum_{i>j} J_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (\text{II.6})$$

Il peut également présenter une anisotropie de spin.

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \Delta_x S_i^x S_j^x + \Delta_y S_i^y S_j^y + \Delta_z S_i^z S_j^z \quad (\text{II.7})$$

Plusieurs hamiltoniens connus dérivent de ce modèle. Lorsque  $\Delta_x = \Delta_y = 1$  et  $\Delta_z = \Delta$ , nous avons alors le modèle XXZ, avec comme point particulier  $\Delta = 1$  qui est le modèle de Heisenberg, et  $\Delta = 0$  est le modèle XY. La combinaison des modèles (II.6) et (II.7) peut servir de modèle pour des systèmes présentant à la fois du désordre et une anisotropie.

### 1.3.2 Modèle AKLT

Développé par Affleck, Kennedy, Lieb et Tasaki en 1987 [1], le modèle AKLT a tout d'abord été décrit dans le cas d'une chaîne de spins  $S = 1$ . Il est le hamiltonien parent d'un état *solide de lien de valence*, ou *Valence Bond Solid* (VBS). Ce dernier est inspiré de l'état dimérisé du modèle Majumdar-Ghosh [60]  $\mathcal{H}_{MG} = \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{2} \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}$ . Supposons une chaîne de spin  $S = 1$   $|S_i\rangle$ , où chaque spin est alors décomposé en deux spins  $s = 1/2$  virtuels à gauche  $|s_i^G\rangle$  et à droite  $|s_i^D\rangle$  (Fig. II.6). Nous lions maintenant les spins virtuels sur deux sites différents en singulets  $|s_i^D, s_{i+1}^G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle)$ , et projetons les spins virtuels sur le spin physique  $|S_i = 1, M_i\rangle = P_{S=1}^{M_i} |s_i^G, s_i^D\rangle$ . Cet état est le seul solide de liens de valence qui ne brise pas la symétrie de translation du système. Son hamiltonien parent est le projecteur sur le spin  $S_{\text{tot}} = 2$  de deux spins proches voisins.

$$\mathcal{H}_{\text{AKLT}} = \sum_i P^{2S} (\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}) \quad (\text{II.8})$$

Cette expression traduit le fait que lorsque nous considérons simplement deux spins  $S = 1$ , d'après la description il y a quatre spins  $s = 1/2$  dont deux forment un singulet. Le reste étant sans interaction, les deux spins virtuels restants forment alors un singulet et un triplet. Le quintuplet est alors supprimé par le lien singulet de l'état AKLT. Le rôle du projecteur est ici contre intuitif puisqu'il

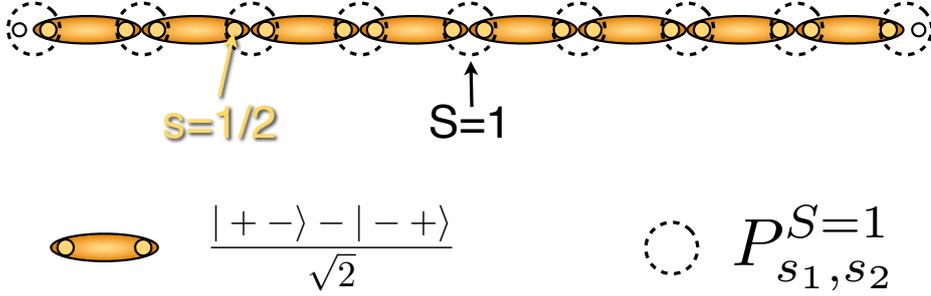


FIGURE II.6 – État AKLT pour une chaîne de spins  $S = 1$ . Les spins physiques sont décomposés en deux spins virtuels  $s = 1/2$ , formant des singulets sur les liens et symétrisés sur le site.

intervient comme hamiltonien et non dans l'expression d'un état. En effet, alors qu'un projecteur a pour but de garder les états projetés (par exemple le projecteur de Gutzwiller), cette projection nous donne simplement l'énergie d'un état. L'état alors projeté a une énergie non nulle  $E = 1$  tandis que les autres états ont une énergie nulle  $E = 0$ . Ce projecteur peut s'écrire comme une somme de deux termes, l'un bilinéaire, l'autre biquadratique, à une constante près :

$$\mathcal{H}_{\text{AKLT}} = \sum_i \left[ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{3} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2 + \frac{2}{3} \right] \quad (\text{II.9})$$

Nous pouvons généraliser ce modèle pour tout type de réseau à 2 et 3 dimensions. Étant donné un réseau quelconque de coordonnée  $z$ , puisque sur chaque lien il y a un singulet de deux spins  $1/2$  virtuels, et que tous les spins virtuels sont symétrisés sur chaque site, il est nécessaire d'avoir un spin total  $S = z/2$ . Le hamiltonien est le projecteur sur le spin total  $S_{\text{tot}} = 2S$ , qui prend la forme d'une somme de termes  $(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^\alpha$ , où  $\alpha \in [0, 2S]$ . Ce projecteur s'écrit :

$$P^{2S}(\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j) = \frac{1}{\mathcal{N}} \prod_{J=0}^{2S-1} \left( \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{2} [J(J+1) - 2S(S+1)] \right) \quad (\text{II.10})$$

Le préfacteur  $\frac{1}{\mathcal{N}}$  est généralement choisi de telle sorte que le préfacteur du terme bilinéaire  $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$  soit égal à 1.

Dans le cas du réseau kagomé, que nous traiterons dans le chapitre suivant, le modèle AKLT correspond à un système de spins  $S = 2$ , puisqu'il y a quatre voisins par site. De la même façon, le hamiltonien est alors un projecteur sur le spin  $2S$  de deux sites voisins. La description de deux spins voisins, correspondant à  $2z$  spins  $1/2$ , comprend deux d'entre eux liés en singulet, et  $2z - 2$  spins dégénérés, pouvant former des spins de  $0$  à  $2S - 1$ . Le hamiltonien sera composé d'une somme de termes  $(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^\alpha$ , où  $\alpha \in [0, 2S]$ , pondérés par des coefficients donnés par l'équation (II.10). Donnons l'exemple du hamiltonien AKLT pour le réseau

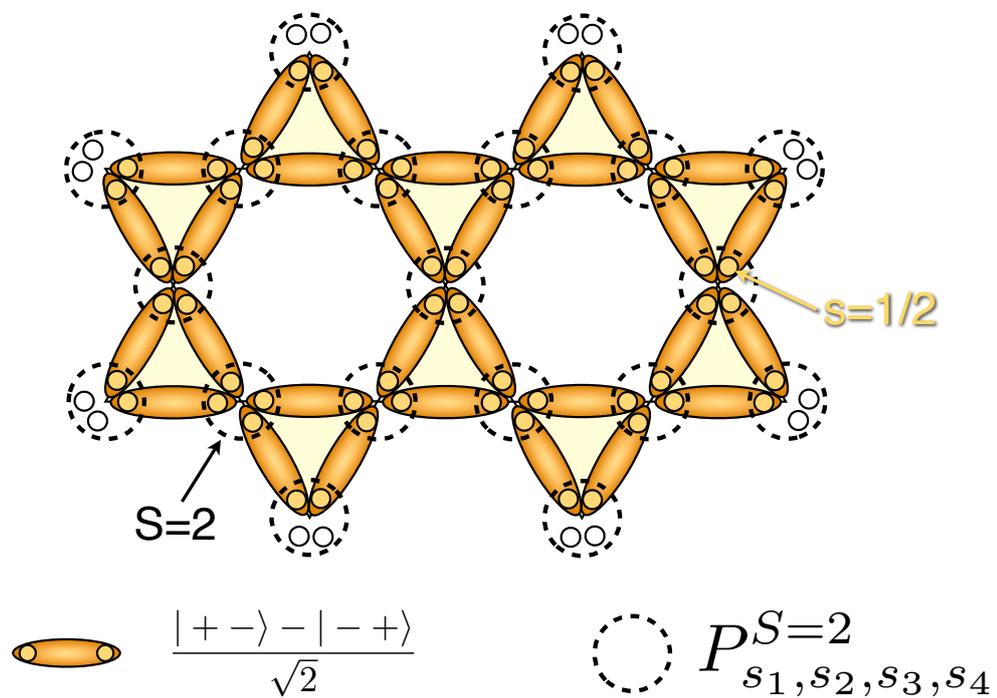


FIGURE II.7 – État AKLT sur le réseau kagomé de spin  $S = 2$ . Les spins physiques sont décomposés en quatre spins virtuels  $1/2$ , formant des singulets sur les liens et symétrisés sur le site.

kagomé (Fig. II.7) (correspondant également au réseau carré) :

$$\mathcal{H}_{\text{AKLT}} = \sum_{\langle i,j \rangle} \left[ \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \frac{7}{10} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 + \frac{7}{45} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^3 + \frac{1}{90} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^4 \right] \quad (\text{II.11})$$

Dans la pratique, il est numériquement plus simple d'écrire le hamiltonien sous sa forme de projecteur, c'est à dire en utilisant les coefficients de Clebsch-Gordan  $C_{S,m_1;S,m_2}^{2S,m_1+m_2}$ . Le hamiltonien AKLT pour deux spins 2 s'écrira donc :

$$\mathcal{H}_{\text{AKLT}} = \sum_{\langle i,j \rangle} C_{2,m_i;2,m_j}^{4,m_i+m_j} |2, m_i; 2, m_j\rangle \langle 2, m_i; 2, m_j| \quad (\text{II.12})$$

## 1.4 Couplage Zeeman

Lorsque nous plaçons un spin  $\mathbf{S}$  dans un champ magnétique extérieur  $\mathbf{B}$ , l'ensemble interagit. Cette interaction est appelé *couplage Zeeman*, du nom du physicien Pieter Zeeman qui a découvert cet effet en 1896, et reçu le Prix Nobel pour cette découverte en 1902. L'énergie de cet ensemble est

$$\mathcal{H}_{\text{Zeeman}} = -\frac{g_S \mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \quad (\text{II.13})$$

Pour simplifier les modèles, nous poserons  $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$  et  $h = \frac{g_S \mu_B}{\hbar} B$ , de sorte que le terme Zeeman se réduit à la simple expression :

$$\mathcal{H}_{\text{Zeeman}} = -h S_z \quad (\text{II.14})$$

Pour un système magnétique, composé de  $N$  sites en interaction, le terme Zeeman vient s'ajouter au hamiltonien du système pour donner un hamiltonien sous champ. Ces deux termes peuvent avoir une "entente cordiale", au sens où ils peuvent tous les deux minimiser l'énergie, comme par exemple un ferro-aimant qui s'alignera dans la direction du champ magnétique. En revanche, et ceux sont les cas qui vont nous intéresser, ces deux termes peuvent entrer en conflit, à la manière de la frustration, et ainsi présenter une physique très riche en passant par une succession de phases différentes lorsque nous augmentons progressivement le champ magnétique.

Lorsque nous appliquons un champ magnétique externe à un système, il joue le rôle de potentiel chimique pour les excitations du matériau. Afin d'illustrer cette affirmation, prenons pour exemple un système de deux spins 1/2 en interaction via un couplage antiferromagnétique. Son état fondamental est alors un singulet  $|S = 0, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle)$ , et ses états excités forment un triplet  $|S = 1, M = +1\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle$ ,  $|S = 1, M = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle)$  et  $|S = 1, M = -1\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle$ . Lorsque le champ magnétique est appliqué, les énergies  $E_S^M$  des états deviennent alors  $E_0^0(h) = -\frac{3}{4}J$ ,  $E_1^0(h) = \frac{1}{4}J$ ,  $E_1^{-1}(h) = \frac{1}{4}J + h$  et  $E_1^{+1}(h) = \frac{1}{4}J - h$  (voir figure II.8). Il existe alors une valeur du champ  $h_c$  pour laquelle  $E_0^0(h_c) = E_1^{+1}(h_c)$  et au-delà de laquelle  $E_0^0(h_c^+) > E_1^{+1}(h_c^+)$ . Cette valeur est  $h_c = J$  et est, par conséquent, directement relié au gap de spin du système. Elle marque la transition entre un état fondamental singulet sans aimantation et un état fondamental où les deux spins sont polarisés.

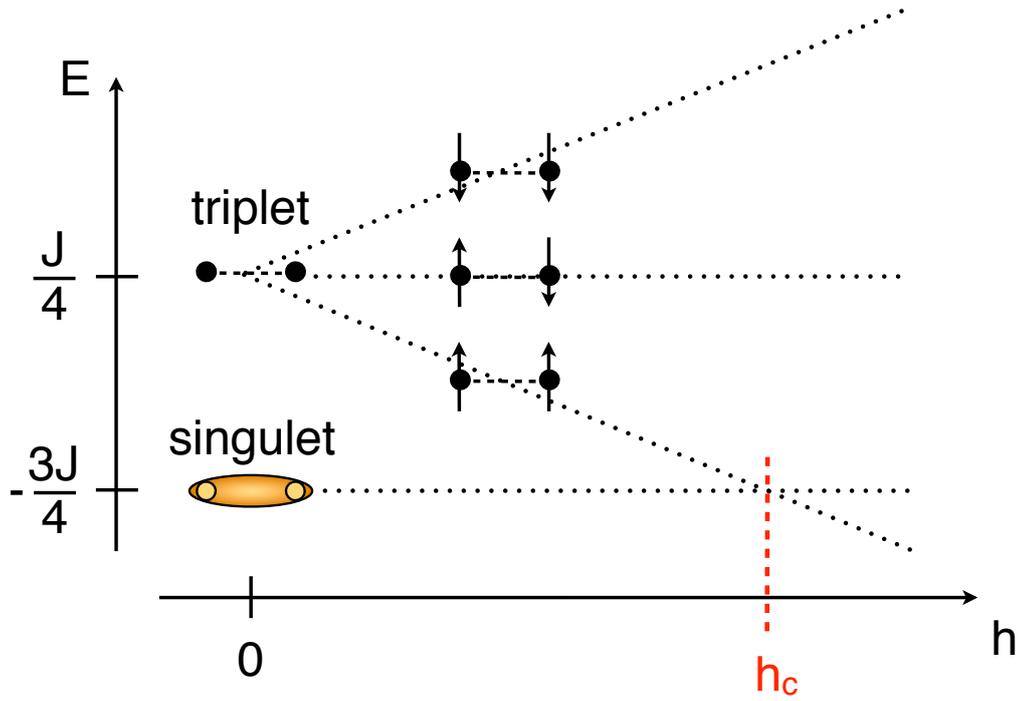


FIGURE II.8 – Effet du couplage Zeeman sur un système de deux spins  $\frac{1}{2}$  en interaction antiferromagnétique. À champ nul, l'état singulet  $|S = 0, M_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle - |\downarrow, \uparrow\rangle)$  est l'état fondamental et ses états excités forment un triplet  $|S = 1, M_S = +1\rangle = |\uparrow, \uparrow\rangle$ ,  $|S = 1, M_S = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle)$  et  $|S = 1, M_S = -1\rangle = |\downarrow, \downarrow\rangle$ . Lorsque nous appliquons un champ magnétique d'intensité  $h$  selon l'axe-z, l'énergie dépend alors de  $h$  via le couplage Zeeman  $\mathcal{H}_{Zeeman} = -hS_z$ . L'énergie des états dont  $M_S = 0$  reste inchangée tandis qu'elle croît linéairement pour l'état  $M_S = -1$  et décroît linéairement pour l'état  $M_S = +1$ . On a une transition de phase à  $h = h_c$  de l'état singulet  $|S = 0, M_S = 0\rangle$  vers l'état polarisé  $|S = 1, M_S = +1\rangle$ , également appelé excitation triplet, ou encore triplon.

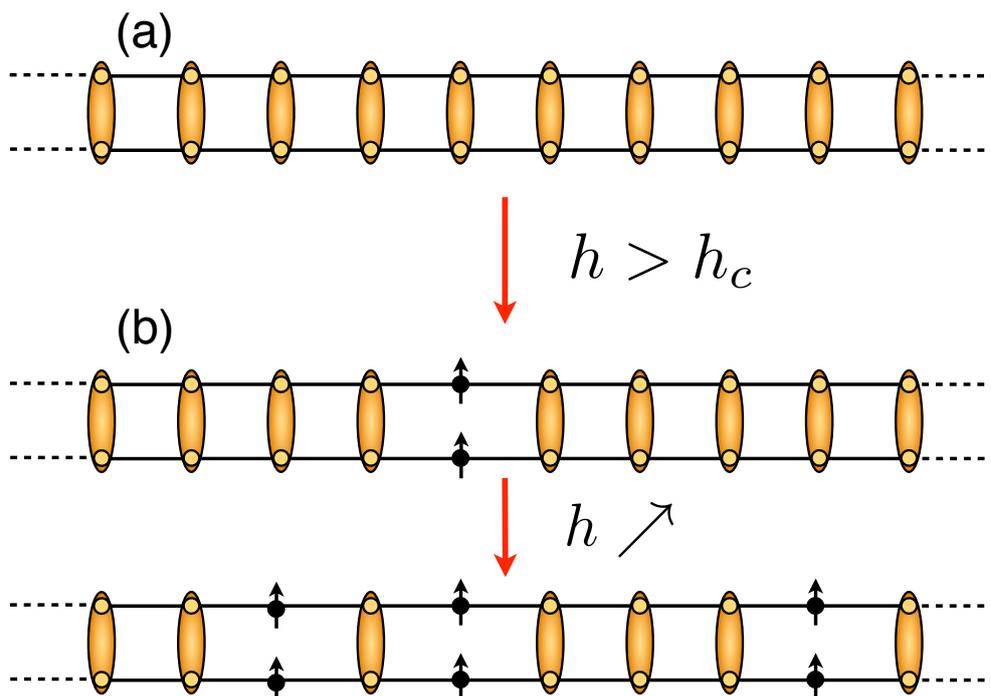


FIGURE II.9 – Exemple de l’effet du couplage Zeeman sur un système étendu. (a) Échelle de spins  $\frac{1}{2}$  couplés en singulet le long des échelons. (b) Système à un triplon pour une valeur du champ magnétique  $h = h_c + \epsilon$ . Lorsque  $h$  augmente, la densité de triplons dans le système augmente. Dans ce cas, le champ magnétique joue le rôle de potentiel chimique pour les excitations.

Considérons maintenant une échelle de spins où ceux-ci sont couplés en singulet le long des échelons (figure II.9 (a)). Comme pour le cas simple de deux spins, il existe un gap et l’amplitude de champ magnétique nécessaire à “casser” cet état a une valeur fini  $h_c$  (figure II.9 (b)). Au dessus de cette valeur, la densité d’excitations est alors contrôlé par l’amplitude du champ magnétique. Nous avons alors un paramètre réglable qui détermine cette densité, de la même façon que le potentiel chimique contrôle le nombre de particules dans un système de fermions (ou de bosons) en interaction.

Pour des systèmes infinis à deux dimensions, l’application d’un champ magnétique présente un intérêt tout particulier si le modèle étudié est frustré. En effet, la combinaison de la frustration et du couplage Zeeman peut faire apparaître des phases exotiques de la matière, comme par exemple des phases superfluides, mais également des phases où l’aimantation ne croît plus avec le champ mais se stabilise pour une valeur de l’aimantation correspondant à un fraction particulière de l’aimantation totale du cas complètement polarisé. Ces phases sont appelé *plateaux d’aimantation* et intéressent aussi bien les physiciens expérimentaux que les physiciens théoriciens [16, 61]. Leur intérêt s’est vu démultiplier grâce aux avancées importantes faites dans le domaine des champs magnétiques intenses. En effet, l’observation de ces phénomènes exigent des champs magnétiques de l’ordre de

plusieurs dizaines de tesla.

Pour étudier numériquement ces modèles, nous devons nous munir de méthodes capables à la fois de simuler des systèmes frustrés, mais également à deux dimensions. Bien qu'il existe plusieurs choix possibles, nous nous sommes dirigés vers des méthodes issues de l'information quantique.

## 2 Une méthode novatrice : les réseaux de tenseurs

### 2.1 Introduction

Depuis des décennies, les méthodes numériques ne cessent de se développer, aidées par des processeurs de plus en plus puissant. Rappelons qu'en physique du solide, nous souhaitons sonder le spectre de basse énergie d'un système de  $N$  sites, où chaque site porte une dimension physique  $d$ . Cela se traduit exactement par la diagonalisation d'une matrice  $d^N \times d^N$ , la matrice hamiltonienne, agissant dans un espace de Hilbert de dimension  $d^N$ . Dans ce contexte, les techniques de diagonalisation exacte sont restreintes à des systèmes de très petite taille,  $N = \ln M / \ln d$ , où  $M$  est la taille des plus grandes matrices diagonalisable à l'aide processeurs les plus performants. À l'heure actuelle,  $M \sim 10^{10}$ , ce qui donne pour un système de dimension physique  $d = 2$ ,  $N \sim 33$ . Pour donner un ordre d'idée, pour un système de 100 sites, il faudrait être capable de diagonaliser une matrice  $M \times M$ , où  $M \sim 10^{30}$ . Malgré les progrès technologiques, il est clair que d'autres méthodes sont nécessaires si nous souhaitons étudier des systèmes de très grande taille, voire de taille "infinie", à la limite thermodynamique.

Les deux grandes classes de méthodes numériques pour les simulations de modèles quantiques en matière condensée sont les méthodes *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG) [106] et Monte Carlo quantique. Il s'agit là des deux méthodes les plus utilisées car elles permettent d'étudier un grand nombre de modèles et ont souvent montré leur efficacité. Il existe toutefois d'autres méthodes, comme les méthodes de champs moyens, d'ondes de spins ou encore les méthodes variationnelles. Cependant, elles présentent toutes des limitations, au niveau des approximations ou encore au niveau de la restriction du sous-ensemble de modèles qu'elles permettent d'étudier. En effet, les méthodes DMRG permettent d'étudier tout type de phénomène mais sont restreintes à une dimension, ou des systèmes quasi-unidimensionnels tels que des cylindres ou des échelles à plusieurs "montants". Bien que les méthodes Monte Carlo autorisent les simulations dans les dimensions plus grandes (deux et trois), elles sont restreintes à des systèmes non frustrés et bosoniques, à cause du tristement célèbre *problème du signe* [58, 99]. Des efforts sont fournis afin d'améliorer ces méthodes, comme par exemple la DMRG grand canonique [39, 40], ou encore le Monte Carlo variationnel [24] et le Fixed-Node Monte Carlo [98]. Il existe toutefois une alternative à ces problèmes que l'on appelle les réseaux de tenseurs, ou méthodes Tensor Network [14, 78], et qui ont d'abord été développées dans le cadre de la théorie de l'information quantique. Précisons qu'il ne s'agit pas de proposer une méthode capable d'étudier tous les

types de problèmes mais d'offrir la possibilité d'étudier des modèles tels que des modèles frustrés à deux dimensions, et permettant une nouvelle approche et une caractérisation via l'intrication quantique présentent dans certains systèmes.

## 2.2 Une dimension : *Matrix Product State*

En théorie de l'information quantique, le concept d'intrication est fondamental. Il permet d'appréhender les qubits, ces bits quantiques qui peuvent prendre comme valeur  $|\text{qubit}\rangle = |0\rangle$ ,  $|\text{qubit}\rangle = |1\rangle$  ou une superposition de ces deux états  $|\text{qubit}\rangle = \cos\theta|0\rangle + \sin\theta|1\rangle$ , où  $\theta$  est une phase quelconque, et les portes logiques quantiques agissant sur ces qubits. En théorie de la matière condensée, le concept d'intrication prend également un rôle important lorsque l'on étudie les phases topologiques de la matière. En effet, la théorie des transitions de phases de Landau faillit dans ce cas car il existe alors des transitions entre deux phases désordonnées, au sens où il n'existe pas de paramètre d'ordre local permettant de les identifier. Le paramètre d'ordre devient alors non-local, conséquence de l'intrication des spins dans un matériau magnétique. Nous allons voir que la formulation en états *produit de matrices* (*Matrix Product State* ou MPS) est un outil puissant pour étudier ce type de systèmes intriqués.

### 2.2.1 Règles diagrammatiques

Afin d'illustrer les calculs mis en jeu dans la représentation en réseau de tenseurs, il est nécessaire d'introduire les règles de représentation diagrammatiques de ceux-ci. Elles ont été créées dans le but d'appréhender de façon simple un calcul puisqu'elles permettent une visualisation directe, d'un algorithme ou d'une démonstration par exemple, sans utilisation de formule complexe, comme il en existe à une dimension, mais surtout à deux dimensions. Ces diagrammes sont basés sur la représentation de tenseurs de rang- $k$  dans l'espace  $\mathbb{C}$ . Nous allons voir (Fig. II.10) comment représenter (a) un scalaire ( $k = 0$ ), (b) un vecteur ( $k = 1$ ), (c) une matrice ( $k = 2$ ) et (d) un tenseur ( $k = 5$ ). La convention d'Einstein s'applique lorsque deux branches sont reliées. Des exemples sont donnés pour l'application d'une matrice sur un vecteur (e), le produit de deux matrices (f) et enfin un tenseur de rang 5 résultant d'une contraction particulière d'un tenseur de rang 4 avec un tenseur de rang 5 (g).

### 2.2.2 Définition d'un état produit de matrices

Soit un état quantique quelconque  $|\Psi\rangle$  de  $N$  sites, tel que :

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} c_{i_1, i_2, \dots, i_N} |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \quad (\text{II.15})$$

où les  $|i_k\rangle$  sont les états propres dans une base choisie. En général, pour des spins  $S$ , ces états sont les états propres  $|S, m_S\rangle$  de  $S^z$ , l'opérateur de spin selon l'axe-z, où  $m_S \in [-S, S]$ . Nous pouvons réécrire les coefficients  $c_{i_1, i_2, \dots, i_N}$  comme le produit

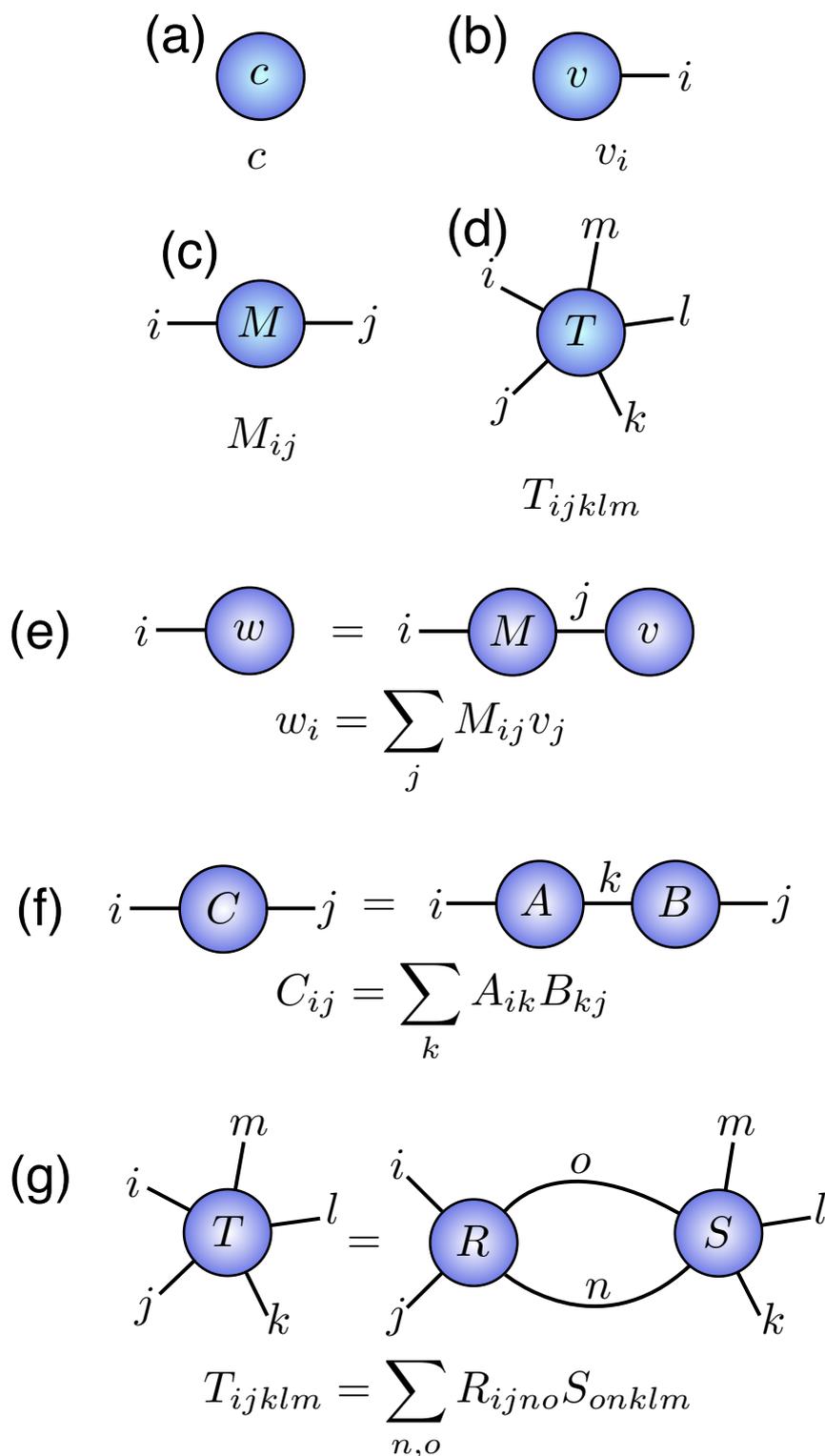


FIGURE II.10 – Règles de représentation diagrammatique d'un scalaire (a), d'un vecteur (b), d'une matrice (c) et d'un tenseur de rang 5 (d). La convention d'Einstein s'applique lorsque deux branches sont reliées. Des exemples sont donnés pour l'application d'une matrice sur un vecteur (e), le produit de deux matrices (f) et enfin un tenseur de rang 5 résultant d'une contraction particulière d'un tenseur de rang 4 avec tenseur de rang 5 (g).

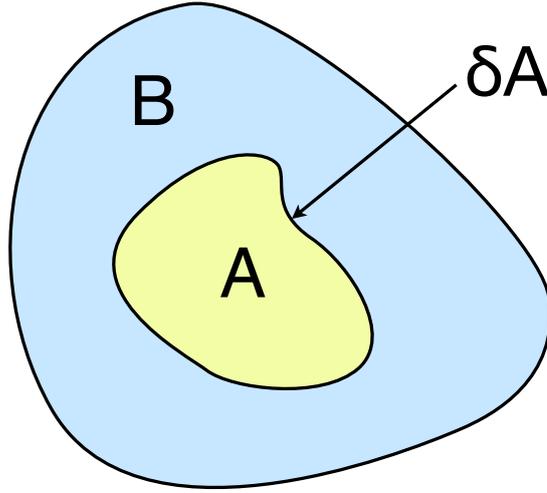


FIGURE II.11 – Loi des aires pour l’entropie d’intrication. Pour des systèmes gappés à interactions locales, l’entropie d’intrication  $S_I$  est proportionnelle à la limite  $\delta A$  entre les sous-systèmes  $A$  et  $B$ .

de matrices complexes  $A^{[k],i_k}$  de dimension  $D_{k-1} \times D_k$ , où  $[k]$  représente le  $k^{\text{ième}}$  site. Dans le cas d’une chaîne ouverte,  $D_0 = D_N = 1$  et les coefficients s’écrivent :

$$c_{i_1, i_2, i_3, \dots, i_{N-1}, i_N} = A^{[1], i_1} A^{[2], i_2} A^{[3], i_3} \dots A^{[N-1], i_{N-1}} A^{[N], i_N} \quad (\text{II.16})$$

Dans le cas de chaînes fermés, c’est-à-dire aux conditions aux bords périodiques, nous posons  $D_k = D \forall k$  et nous prenons la trace du produit de matrices :

$$c_{i_1, i_2, i_3, \dots, i_{N-1}, i_N} = \text{Tr} \left[ A^{[1], i_1} A^{[2], i_2} A^{[3], i_3} \dots A^{[N-1], i_{N-1}} A^{[N], i_N} \right] \quad (\text{II.17})$$

Afin de décrire un état aléatoire dans l’espace de Hilbert, nous devrions utiliser des matrices de dimension  $D \rightarrow \infty$ . Heureusement pour nous, la nature est clémente. En effet, beaucoup de hamiltoniens importants dans la description de phénomènes naturels ont des interactions locales, et cette localité a des conséquences très importantes pour nos MPS. En particulier, nous pouvons démontrer qu’un hamiltonien possédant un gap d’énergie et à interactions locales obéit à ce que l’on appelle la *loi des aires*[21, 36] pour l’entropie d’intrication  $S_I$  entre deux sous parties du système. Alors que pour un état quelconque,  $S_I$  est proportionnelle au “volume” du plus petit des deux sous-systèmes, les états du bas du spectre énergétique ont une entropie d’intrication  $S_I$  proportionnelle à la “surface” séparant les deux sous-systèmes (voir la figure II.11). En d’autres termes, pour un système de dimension  $dim$ ,  $S_I \propto N^{dim-1}$  : elle est constante pour un système unidimensionnel et augmente linéairement pour un système bidimensionnel. Afin de comprendre le lien entre la dimension de lien et l’intrication, nous devons introduire la notion de décomposition de Schmidt. Nous reviendrons ensuite à la description en MPS et nous verrons qu’elle est parfaitement adaptée aux états décrit par un hamiltonien local et dont le spectre en énergie est gappé.

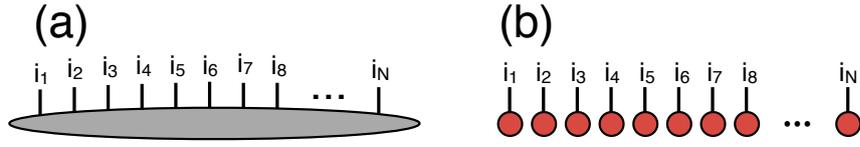


FIGURE II.12 – Représentations diagrammatiques des coefficients  $c_{i_1, i_2, \dots, i_N}$  d'un état quelconque (a) et d'un état produit, non intriqué (b).

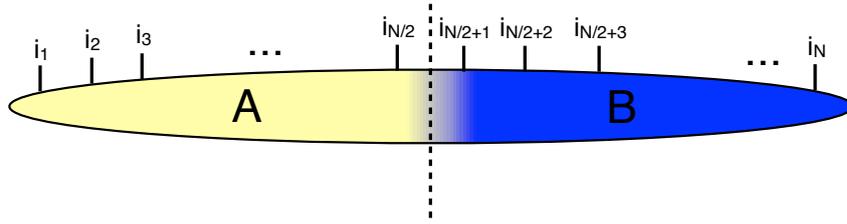


FIGURE II.13 – Représentation diagrammatique des coefficients d'un système de  $N$  sites séparé en deux sous-systèmes  $A$  et  $B$  de  $N/2$  sites chacun.

### 2.2.3 Décomposition de Schmidt

La description en MPS repose sur la décomposition de Schmidt. Soit un état quelconque d'une chaîne de  $N$  spins  $S$  pouvant prendre comme valeur  $i \in [-S, S]$  :

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} c_{i_1, i_2, \dots, i_N} |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \quad (\text{II.18})$$

Il n'existe qu'un nombre très réduit d'états pouvant s'écrire comme un produit d'états locaux :

$$|\Psi\rangle = \bigotimes_{k=1}^N |\psi_k\rangle \quad (\text{II.19})$$

avec  $|\psi_k\rangle = \sum_{i_k} c_{i_k} |i_k\rangle$ . On peut schématiser ces états par des diagrammes représentant les coefficients  $c$ , avec des pattes correspondant aux indices physiques. Sur la figure II.12, nous avons représenté un état quelconque (a) ainsi qu'un état produit (b), les  $N$  coefficients étant alors déconnectés. Existe-t-il une représentation intermédiaire, entre les  $(2S+1)^N$  éléments du premier cas et les  $N(2S+1)$  éléments du second? Oui, et cette représentation est basée sur la décomposition de Schmidt.

Séparons maintenant notre système en deux sous-systèmes  $A$  et  $B$  de  $N/2$  spins chacun (voire la figure II.13). La décomposition de Schmidt de cet état est donnée par la formule

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{\chi} \lambda_{\alpha} |\phi_{\alpha}^A\rangle |\phi_{\alpha}^B\rangle \quad (\text{II.20})$$

Il s'écrit alors comme la somme de  $\chi$  produits de deux états, pondérés par les coefficients de Schmidt  $\lambda_{\alpha} \in \mathbb{R}$ , où  $\chi$  est appelé le rang de Schmidt. Les nouveaux

états  $|\phi_\alpha^{A,B}\rangle$  forment deux bases orthonormées, respectivement pour  $A$  et  $B$ , et s'écrivent :

$$\begin{aligned} |\phi_\alpha^A\rangle &= \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{N/2}} \Gamma_\alpha^{[A]i_1, i_2, \dots, i_{N/2}} |i_1, i_2, \dots, i_{N/2}\rangle \\ |\phi_\alpha^B\rangle &= \sum_{i_{N/2+1}, \dots, i_N} \Gamma_\alpha^{[B]i_{N/2+1}, \dots, i_N} |i_{N/2+1}, \dots, i_N\rangle \end{aligned} \quad (\text{II.21})$$

Les  $\Gamma^{[A,B]}$  sont les éléments de deux matrices unitaires de changement de base pour  $A$  et  $B$ . Le nombre de coefficients nécessaires à la description de Schmidt est  $2\chi(2S+1)^{N/2}$ . Il est clair que si  $\chi < (2S+1)^{N/2}/2$ , cette décomposition nous permet de réduire le nombre de coefficients décrivant le système. La décomposition de Schmidt reposant sur la décomposition en valeurs singulières, il en résulte que la valeur maximale de  $\chi$  est  $(2S+1)^{N/2}$ , ce qui augmente (double) le nombre de coefficients définissant le système.

La matrice densité réduite du sous-système  $A$  s'écrit comme la trace sur le sous-système  $B$  de la matrice densité

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B\{|\Psi\rangle\langle\Psi|\} \quad (\text{II.22})$$

En reprenant l'équation II.20, nous voyons que la matrice densité réduite de  $A$  s'écrit simplement :

$$\hat{\rho}_A = \sum_\alpha \lambda_\alpha^2 |\phi_\alpha^A\rangle\langle\phi_\alpha^A| \quad (\text{II.23})$$

Cette matrice est diagonale dans la base  $|\phi_\alpha^A\rangle$  et ses éléments diagonaux sont les coefficients de Schmidt élevés au carré. Nous noterons qu'elle possède les bonnes propriétés puisque  $\lambda_\alpha^2 \geq 0 \forall \alpha$ , et que nous pouvons normaliser la somme telle que  $\sum_\alpha \lambda_\alpha^2 = 1$ . À noter également que si  $\chi < (2S+1)^{N/2}$ , la matrice densité réduite peut être ramener une matrice plus petite de taille  $\chi \times \chi$  puisque certains de ses éléments sont alors nuls. À partir de la formule générale pour la matrice densité  $\hat{\rho} = \exp(-\hat{\mathcal{H}}/k_B T)$ , nous pouvons définir une nouvelle opérateur  $\hat{\mathcal{H}}_A = -\ln \hat{\rho}_A$  en posant  $k_B T = 1$ . Les valeurs propres  $-2 \ln \lambda_\alpha$  de ce nouvel opérateur forment le *spectre d'intrication* du sous-système  $A$ . Pour illustrer les propriétés de ce spectre, nous allons voir quelques exemples. Le spectre d'un état produit est le plus simple puisqu'il ne présente qu'une seule valeur propre  $-2 \ln \lambda_0 = 0$  dans son spectre (figure II.14 (a)) (les autres valeurs tendant vers l'infini). Lorsque que l'état ne peut s'écrire comme le produit de deux états, il est alors *intriqué* et son spectre présente alors plusieurs niveaux. Le cas le plus extrême apparait lorsque l'état est dit "maximalement intriqué", où toutes ses valeurs sont dégénérées :  $-2 \ln \lambda_\alpha = N \ln d$  (Fig. II.14 (b)). Le cas intermédiaire peut présenter des propriétés diverses comme avoir un gap avec un "fondamental" dégénéré ou non, ou alors un continuum. (figures II.14 (c), II.14 (d) et II.14 (e)).

Nous pouvons également définir une quantité permettant de quantifier l'intrication d'un sous-système avec son environnement, appelé *entropie d'intrication*,  $S_I = -\text{Tr}(\rho_A \ln \rho_A)$ , ou encore en utilisant les coefficients de Schmidt  $S = -\sum_i \lambda_i^2 \ln \lambda_i^2$ . Pour un système de  $2N$  sites, l'entropie d'intrication est comprise entre  $S_I = 1$ , pour une chaîne non intriquée, et  $S_I = N \ln d$  pour une chaîne maximalement intriquée.

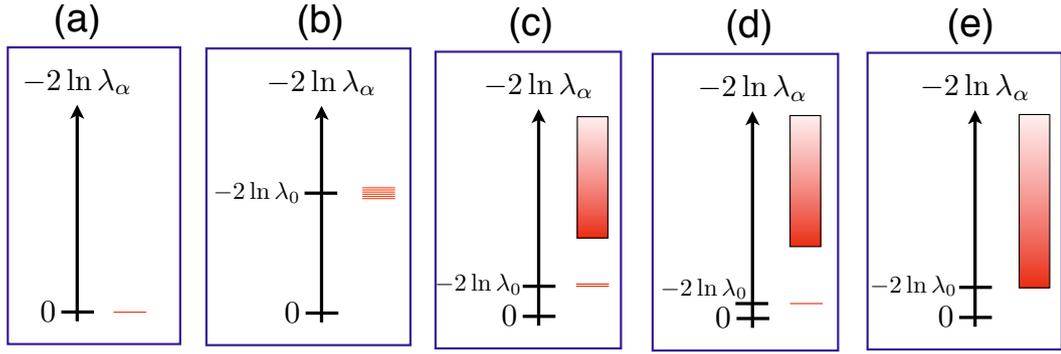


FIGURE II.14 – Différents types de spectres d'intrication  $-2 \ln \lambda_\alpha$  possible pour deux sous-système de  $N$  particules de dimension physique  $d$ . Le cas d'un état non-intriqué (a) présente un spectre avec un seul état à 0. Un système "maximalement" intriqué présente une dégénérescence  $g = d^N$  au niveau  $\ln d^N$ . Il existe des systèmes présentant un continuum lorsque  $N \rightarrow \infty$ , avec un gap et un fondamental dégénéré (c), non dégénéré (d) et sans gap (e).

#### 2.2.4 Approximation en *Matrix Product State*

D'après la décomposition exacte, le rang de Schmidt croît exponentiellement avec la taille du système. Cependant, nous avons vu que dans le cas d'un hamiltonien local gappé, le système suit la loi des aires pour son intrication ce qui réduit considérablement le nombre d'états possible pour l'état fondamental (Fig.II.15). Grâce à cette propriété, nous pouvons appliquer une troncature sur le nombre d'états de Schmidt, et nous appellerons cette nouvelle dimension  $D$ , la dimension de lien, ou interne, du système telle que  $D < \chi$ . En effet, pour un état choisi aléatoirement, de haute énergie, les coefficients de Schmidt ont des poids équivalents (Fig. II.16(a)) : il est donc indispensable de les prendre tous en compte dans les calculs. En revanche, pour l'état fondamental, la valeur des coefficients décroît exponentiellement (Fig. II.16(b)) : nous pouvons alors choisir une valeur de coupure, et donc garder les  $D$  plus grandes valeurs. C'est cette valeur que nous allons utiliser par la suite. L'espace ciblé par un MPS de dimension  $D$  finie est un sous-espace de l'espace de Hilbert (Fig.II.17), mais également sous-espace des états vérifiant la loi des aires.

Pour résumer, la figure II.18 montre la décomposition en MPS d'un état intriqué, par décomposition en valeurs singulières successives d'une extrémité de la chaîne à l'autre. La dimension du lien peut être réduite à une dimension  $D$  inférieure au rang de Schmidt en gardant les  $D$  plus grandes valeurs singulières, et les matrices unitaires, issues de la décomposition, correspondantes. À chaque étape, la matrice diagonale  $\lambda$  est réabsorbée dans la décomposition. Il n'existe pas de norme pour l'écriture des réseaux de tenseurs, nous utiliserons des lettres latines capitales, par exemple  $A^s$  dans le cas où les coefficients s'écrivent comme

$$c_{i_1, i_2, i_3, \dots, i_N} = A^{i_1} A^{i_2} A^{i_3} \dots A^{i_N} \quad (\text{II.24})$$

ou alors nous utiliserons les notations  $\Gamma$  et  $\lambda$  si nous souhaitons utiliser explicite-

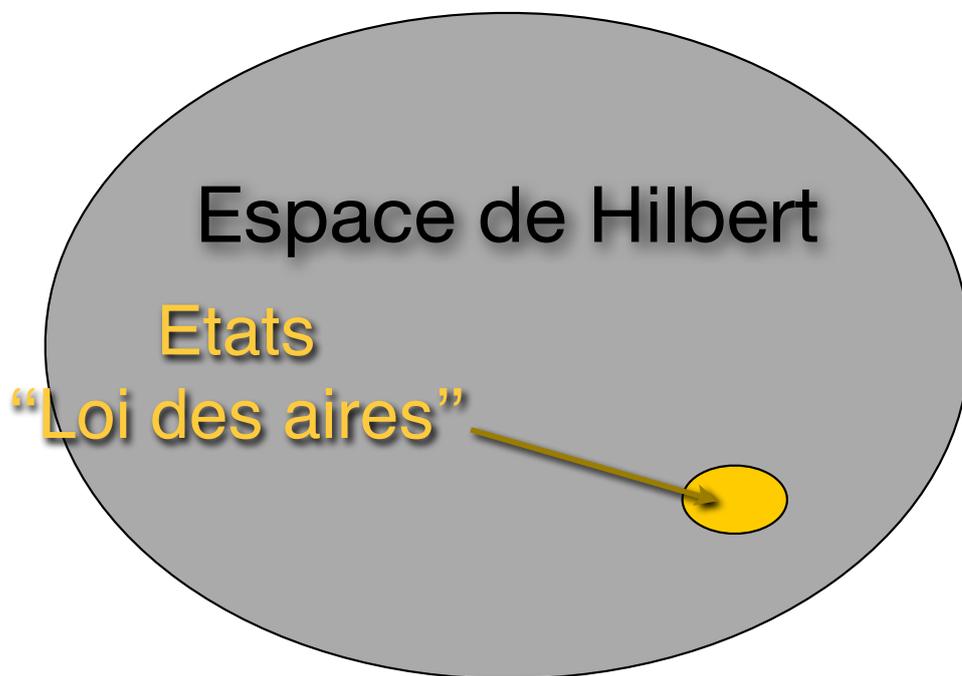


FIGURE II.15 – Espace des états suivant la loi des aires dans l'espace de Hilbert total du système.

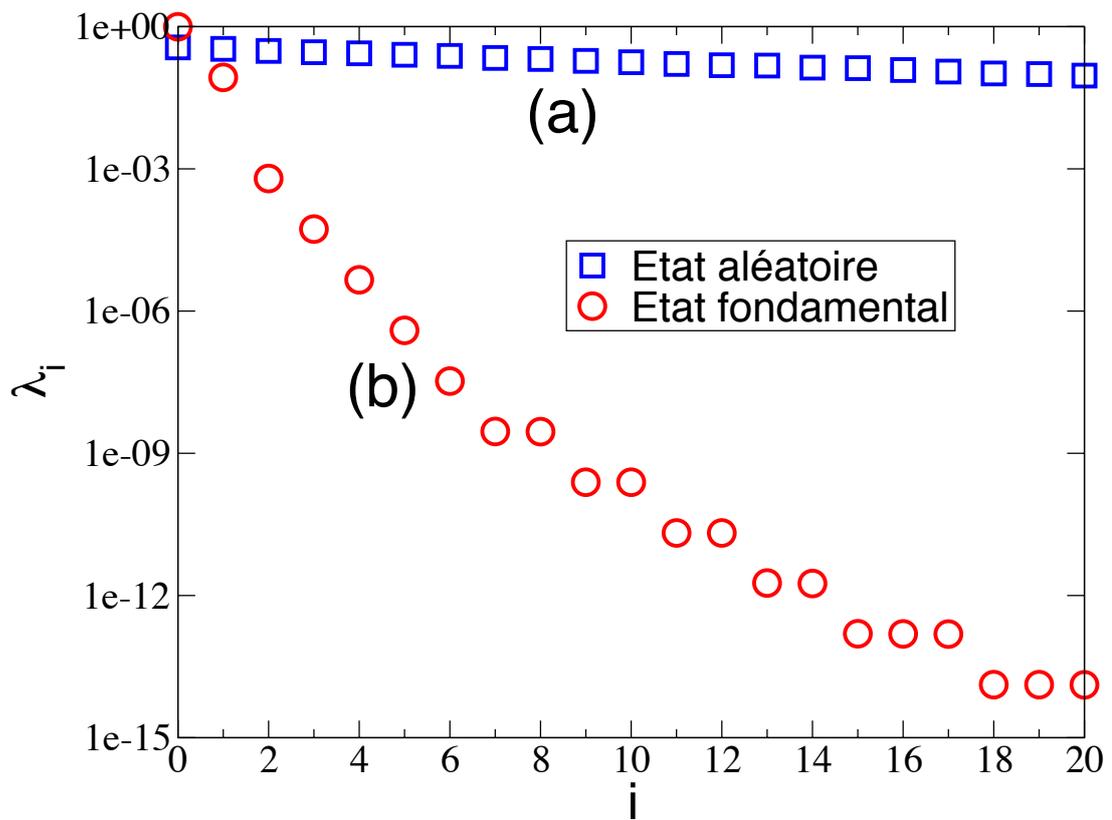


FIGURE II.16 – Coefficients de Schmidt  $\lambda_i$  d'un état aléatoire (a) et de l'état fondamental du modèle d'Ising à champ transverse  $\mathcal{H} = -\sum_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + g \sum_i \sigma_i^x$  ( $g=1.5$ ) (b), ce hamiltonien étant local et possédant un gap.

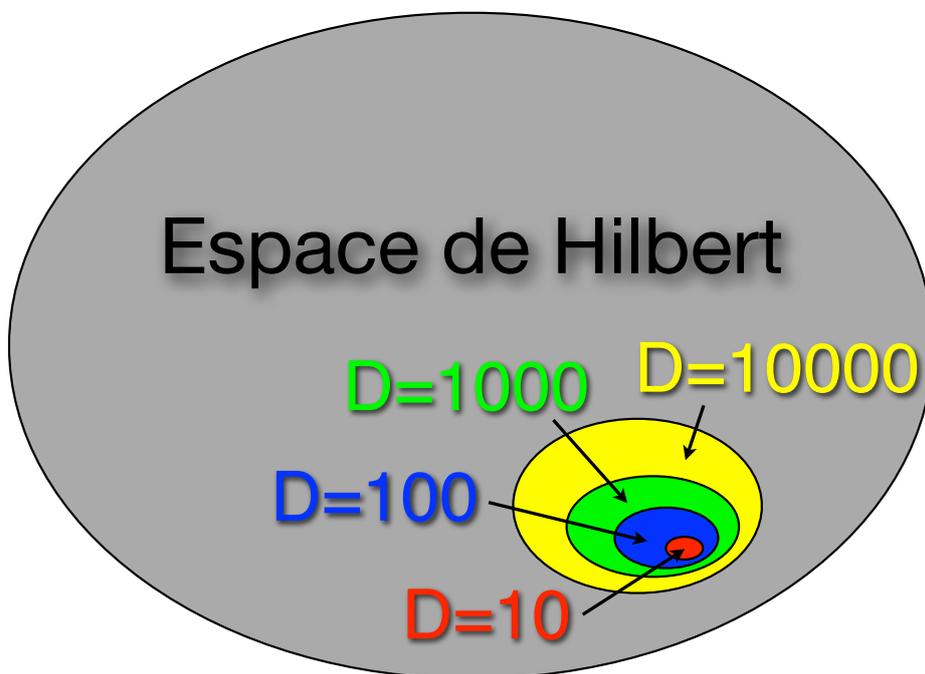


FIGURE II.17 – Espaces des MPS pour différentes valeurs de  $D$ , compris dans l'espace de Hilbert total du système.

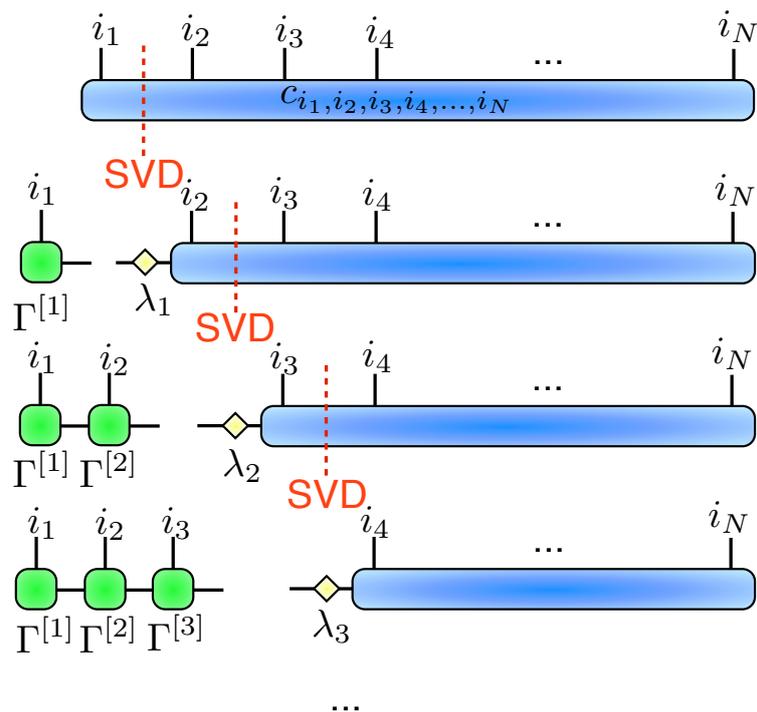


FIGURE II.18 – Décomposition d’une chaîne de  $N$  sites en MPS en utilisant des décompositions en valeurs singulières (SVD) successives. À chaque étape, les valeurs singulières sont réabsorbées dans l’ensemble des sites restants.

ment les valeurs singulières, contenues dans les matrices diagonales  $\lambda$ , tel que

$$C_{i_1, i_2, i_3, \dots, i_N} = \Gamma^{i_1} \lambda \Gamma^{i_2} \lambda \Gamma^{i_3} \dots \lambda \Gamma^{i_N} \quad (\text{II.25})$$

Cette dernière forme MPS est présentée sur la figure II.19 qui, à la différence de la décomposition précédente, inclut explicitement les valeurs singulières en appliquant l'identité  $\lambda \cdot \lambda^{-1}$  et en réécrivant les matrices telles que  $\tilde{\Gamma} = \lambda^{-1} \Gamma$ .

### 2.2.5 Forme canonique

Les réseaux de tenseurs possèdent un degré de liberté dans leur espace interne tel qu'une transformation de jauge agissant dans cet espace laisse invariant l'état global. Cette transformation, notée  $U_k$ , offre la possibilité d'une infinité de représentation décrivant exactement le même état.

$$\tilde{A}^{[k], i_k} = U_{k-1}^{-1} A^{[k], i_k} U_k \quad (\text{II.26})$$

Ici, l'ensemble des matrices  $\{\tilde{A}^{[k], i_k}\}$  décrivent le même état que l'ensemble de matrices  $\{A^{[k], i_k}\}$ . Dans le cas où nous optimisons les matrices sans fixer la jauge, il est donc impossible de comparer deux états simplement en considérant les matrices individuellement. Toutefois, nous pouvons définir une représentation particulière, appelée *forme canonique*, vérifiant les deux règles suivantes :

1. Le vecteur propre dominant de la matrice de transfert gauche, et droite, est "l'identité".
2. Les matrices diagonales  $\lambda$  contiennent les valeurs singulières issues de la décomposition de Schmidt.

Nous verrons plus tard ce que nous appelons la matrice de transfert. Toutefois, nous pouvons formuler la règle 1 par l'équation (II.27) pour la matrice de transfert gauche et l'équation (II.28) pour la matrice de transfert droite. La règle 2 est respectée dans la décomposition présentée figure II.19, pour la matrice transfert gauche. Il suffirait de renverser l'ordre de décomposition pour obtenir la forme canonique pour la matrice de transfert droite.

$$\sum_s \sum_k \lambda_k^2 (\Gamma_{k,i}^s)^* \Gamma_{k,j}^s = \eta \delta_{i,j} = \left[ \begin{array}{c} \lambda \\ \Gamma^* \\ s \\ \Gamma \\ \lambda \end{array} \right]_{i,j} = \eta \left[ \begin{array}{c} i \\ j \end{array} \right] \quad (\text{II.27})$$

$$\sum_s \sum_k (\Gamma_{i,k}^s)^* \Gamma_{j,k}^s \lambda_k^2 = \eta \delta_{i,j} = \left[ \begin{array}{c} i \\ \Gamma^* \\ s \\ \Gamma \\ j \end{array} \right]_{k} = \eta \left[ \begin{array}{c} i \\ j \end{array} \right] \quad (\text{II.28})$$

### 2.2.6 Systèmes infinis : *infinite-Matrix Product State*

Supposons maintenant que nous souhaitions étudier une chaîne à la limite thermodynamique. Les états produits de matrices infinis, ou *infinite-Matrix Product State* (iMPS), permettent le calcul exact de grandeurs telles que l'énergie ou l'aimantation locale, directement à la limite macroscopique. Cela est dû à la propriété

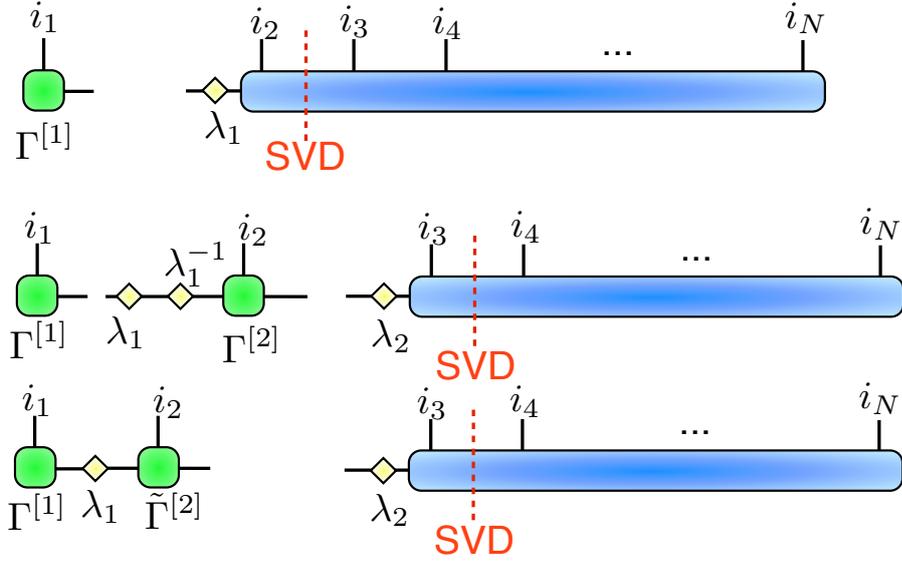


FIGURE II.19 – Décomposition préservant la forme canonique gauche d’un MPS. À chaque étape, l’identité  $\lambda\lambda^{-1}$  est appliquée et  $\lambda^{-1}$  est absorbé dans la matrice  $\Gamma$ .

de la matrice de transfert  $T$  des MPS. Nous allons voir que grâce à elle, les valeurs moyennes locales, qui, alors que dans le cas “classique” nécessitent un calcul global comprenant tout le système, se ramène à un simple calcul local, même en présence d’intrication. Pour simplifier la démonstration, nous allons supposer que le système est homogène, c’est-à-dire que chaque site est représenté par les mêmes matrices  $A_{i,j}^{m_s}$ . La matrice de transfert est définie par l’expression :

$$T_{(i,i'),(j,j')} = \sum_{m_s} A_{i,j}^{m_s} (A_{i',j'}^{m_s})^* = \begin{array}{c} i' \text{---} \boxed{A^*} \text{---} j' \\ | \\ m_s \\ | \\ i \text{---} \boxed{A} \text{---} j \end{array} = (i, i') \boxed{T} (j, j') \quad (\text{II.29})$$

La matrice de transfert  $T$  est alors de dimension  $D^2 \times D^2$ , pour des matrices  $A^{m_s}$  de dimension  $D \times D$ . Dans le cas où la cellule élémentaire du système est  $N_S > 1$ , nous pouvons écrire une matrice de transfert  $T_n$  différentes pour chaque site de cette cellule, la matrice de transfert totale s’écrivant alors  $T = \prod_{n=1}^{N_S} T_n$ . Dans un premier temps, nous supposons qu’il existe des bords,  $(V_G|$  à gauche et  $|V_D)$  à droite, sous la forme de deux vecteurs de dimensions  $D^2$ . –Nous utilisons la notation vectorielle  $(\cdot|$  et  $|\cdot)$  pour les vecteurs dans l’espace auxiliaire des liens afin de les différencier des états physiques  $\langle \cdot |$  et  $|\cdot \rangle$ . – L’exemple le plus simple consiste à calculer la norme de l’état  $|\Psi(A)\rangle$  décrite par les matrices  $A$ . Le diagramme figure II.20 (a) nous présente ce calcul. Il s’écrit :

$$\langle \Psi(A) | \Psi(A) \rangle \underset{N \rightarrow \infty}{=} (V_G | T^N | V_D) \quad (\text{II.30})$$

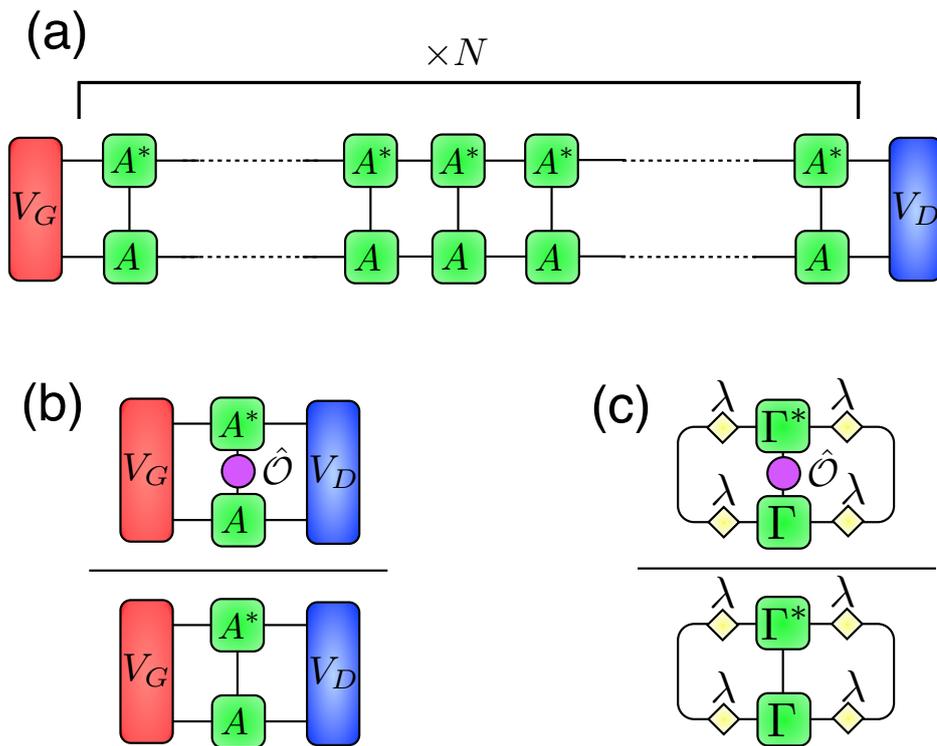


FIGURE II.20 – (a) Calcul de la norme d'un état  $|\Psi\rangle$  homogène infini décrit par des matrices  $A$ . (b) Calcul d'une observable  $\langle \hat{O} \rangle$  sur l'état  $|\Psi\rangle$ , avec  $|V_G\rangle$  et  $|V_D\rangle$  les vecteurs dominants de la matrice de transfert. (c) Calcul d'une observable  $\langle \hat{O} \rangle$  sur l'état  $|\Psi\rangle$  utilisant la forme canonique.

où encore, de façon équivalente

$$\langle \Psi(A) | \Psi(A) \rangle \underset{N \rightarrow \infty}{=} (V_G | T^N T T^N | V_D) \quad (\text{II.31})$$

Il est possible d'écrire de nouveaux vecteurs ( $\tilde{V}_G |$  et  $|\tilde{V}_D$ ) tels que ( $\tilde{V}_G | \underset{N \rightarrow \infty}{=} (V_G | T^N$  et  $|\tilde{V}_D) \underset{N \rightarrow \infty}{=} T^N | V_G$ ). Si nous écrivons les vecteurs de départs dans la base des vecteurs propres de  $T$ , nous obtenons

$$\begin{aligned} T^N | V_D) &= T^N \sum_{i=0}^{D^2-1} c_i |\phi_i) \\ T^N | V_D) &= \sum_{i=0}^{D^2-1} c_i \lambda_i^N |\phi_i) \end{aligned} \quad (\text{II.32})$$

Une réécriture simple donne

$$\left( \frac{1}{\lambda_0} T \right)^N | V_D) = c_0 |\phi_0) + \sum_{i=1}^{D^2-1} c_i \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right)^N |\phi_i) \quad (\text{II.33})$$

Nous voyons alors que  $\left( \frac{1}{\lambda_0} T \right)^N \rightarrow |\phi_0)(\phi_0|$  lorsque  $N \rightarrow \infty$ , pour  $|\lambda_0| > |\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots$ . Dans ce cas, si nous prenons comme vecteurs de bord ( $V_G |$  et  $|V_D$ ) les deux vecteurs dominants, c'est-à-dire correspondant à la valeur propre la plus grande, à gauche et à droite, la norme se réécrit simplement (à un facteur de normalisation près)

$$\langle \Psi(A) | \Psi(A) \rangle = (V_G | T | V_D) \quad (\text{II.34})$$

Le calcul de la valeur moyenne d'une observable locale sur un site  $\hat{O}$  est représenté figure II.20 (b) et peut s'écrire

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{(V_G | T^{\hat{O}} | V_D)}{(V_G | T | V_D)} \quad \text{avec} \quad T_{(i,i'),(j,j')}^{\hat{O}} = \sum_{m,m'} A_{i,j}^m \mathcal{O}_{m,m'} (A_{i',j'}^{m'})^* \quad (\text{II.35})$$

Dans le cas de la forme canonique, par définition, les vecteurs gauche et droit dominants sont "l'identité", comme présenté sur la figure II.20 (c).

### 2.2.7 Exemples de représentations exactes

Nous allons voir deux exemples issus de l'information quantique puis deux exemples de chaîne de spins dont le hamiltonien admet comme état fondamental un MPS.

#### i) État GHZ

L'état Greenberger-Horne-Zeilinger [17] est défini par  $N > 2$  qubits dans une superposition d'état où tous les qubits sont  $|0\rangle$ , ou bien  $|1\rangle$

$$|\text{GHZ}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle \otimes^N + |1\rangle \otimes^N) \quad (\text{II.36})$$

Son MPS prend la forme

$$A^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, A^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.37})$$

*ii) État W*

L'état W est un autre exemple, avec l'état GHZ, de système à trois qubits non-biséparable, c'est à dire qu'ils ne peuvent pas être séparé en un état à un qubit et un état formé par les deux autres qubits.

$$|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle) \quad (\text{II.38})$$

$$\begin{aligned} A^{[1]0} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, A^{[1]1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ A^{[2]0} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, A^{[2]1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ A^{[3]0} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, A^{[3]1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{II.39})$$

Notons que bien que les qubits soient permutable, les matrices représentatives ne le sont pas.

*iii) État Majumdar-Ghosh*

Ce célèbre modèle, étudié en 1969 par Chancel K. Majumdar et Dipan K. Ghosh [60], est un cas particulier du modèle  $J_1$ - $J_2$  pour une chaîne de spins  $\frac{1}{2}$ . Rappelons que ce modèle inclut des interactions anti-ferromagnétiques entre plus proches voisins avec une intensité  $J_1$  et entre seconds proches voisins avec une intensité  $J_2$ .

$$\mathcal{H}_{J_1-J_2} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (\text{II.40})$$

Lorsque  $J_2 = J_1/2$ , le modèle admet alors deux états fondamentaux dégénérés. Les spins se couplent en singulets, menant à deux états dimérisés, l'un portant les singulets sur ses liens pairs, l'autre sur ses liens impairs. Cette dégénérescence résulte d'une brisure de symétrie de la translation  $\mathcal{T}$  de la chaîne, les états de plus basse énergie n'étant plus qu'invariant par translation  $2\mathcal{T}$ .

$$\begin{aligned} |\text{MG}_{\text{pair}}\rangle &= \bigotimes_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_{2n}, \downarrow_{2n+1}\rangle - |\downarrow_{2n}, \uparrow_{2n+1}\rangle) \\ |\text{MG}_{\text{impair}}\rangle &= \bigotimes_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_{2n-1}, \downarrow_{2n}\rangle - |\downarrow_{2n-1}, \uparrow_{2n}\rangle) \end{aligned} \quad (\text{II.41})$$

$$A^{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, A^{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.42})$$

Cet état est la représentation d'une combinaison linéaire des deux états dégénérés

$$|\Psi\rangle = |\text{MG}_{\text{pair}}\rangle + |\text{MG}_{\text{impair}}\rangle \quad (\text{II.43})$$

Cela explique le fait que la représentation soit invariante par translation (chaque site est décrit par les mêmes matrices  $A^{-\frac{1}{2}}$  et  $A^{+\frac{1}{2}}$ ).

#### iv) *État AKLT*

Comme introduit dans la section 1.3.2 de ce chapitre, le modèle AKLT est le seul *solide de liens de valences* à une dimension invariant par translation du réseau.

$$A^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sigma^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, A^0 = \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, A^{+1} = \frac{-1}{\sqrt{2}}\sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.44})$$

Ce MPS présente beaucoup d'intérêts lorsqu'il s'agit d'étudier des modèles de spins sur des réseaux de tenseurs. En effet, il s'écrit en termes de matrices  $2 \times 2$ , ce qui est minimal, et est invariant par translation. Si nous calculons son spectre d'intrication à l'aide de sa formulation MPS [13], nous obtenons un spectre ne comportant que deux états dégénérés, la matrice densité réduite n'ayant que  $\chi = 2$  valeurs propres non nulles. D'après la conjecture de Li et Haldane [54], le spectre d'intrication est directement relié aux états de bord du système. Dans ce cas présent, les deux états correspondent au spin virtuel  $\frac{1}{2}$ , décrit théoriquement, puis utilisé comme qubit dans le cas d'une chaîne photonique AKLT [49, 90]. Son avantage est qu'il peut être généralisé pour tout type de réseau, quelque soit sa dimension, à condition de respecter une "taille" de spin  $S = z/2$  où  $z$  est la coordonnée du réseau.

## 2.3 Deux dimensions : *Projected Entangled Pair State*

### 2.3.1 Motivations et définitions

Les PEPS [100, 101], abréviation de *Projected Entangled Pair State* qui signifie *état de paires intriquées projetées*, sont la généralisation naturelle des MPS à des dimensions spatiales plus grandes. Nous ne considérerons que le cas à deux dimensions d'espace ( $2d$ ). Les PEPS  $2d$  sont à la base de plusieurs méthodes pour simuler des systèmes quantiques sur réseau  $2d$ , tels que les algorithmes PEPS [100] ou PEPS infinis (iPEPS) [48], groupe de renormalisation tensoriel (TRG) [53], groupe de seconde renormalisation (SRG) [111, 114], groupe de renormalisation tensoriel d'ordre supérieur (HOTRG) [109], ainsi que les méthodes basées sur les matrices de transfert d'angle (CTM) et tenseurs d'angle [70, 71, 77, 79].

Les PEPS sont des réseaux de tenseurs correspondant à un ensemble  $2d$  de tenseurs. Ils représentent un état quantique  $|\Psi\rangle$  tel que

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \mathcal{F} \left[ A^{[1], i_1} A^{[2], i_2} \dots A^{[N], i_N} \right] |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \quad (\text{II.45})$$

où  $\mathcal{F}[\cdot]$  correspond à une contraction particulière des tenseurs  $A^{[k], i_k}$ . Par exemple, pour un réseau carré  $4 \times 4$ , nous représentons cette contraction pour un système

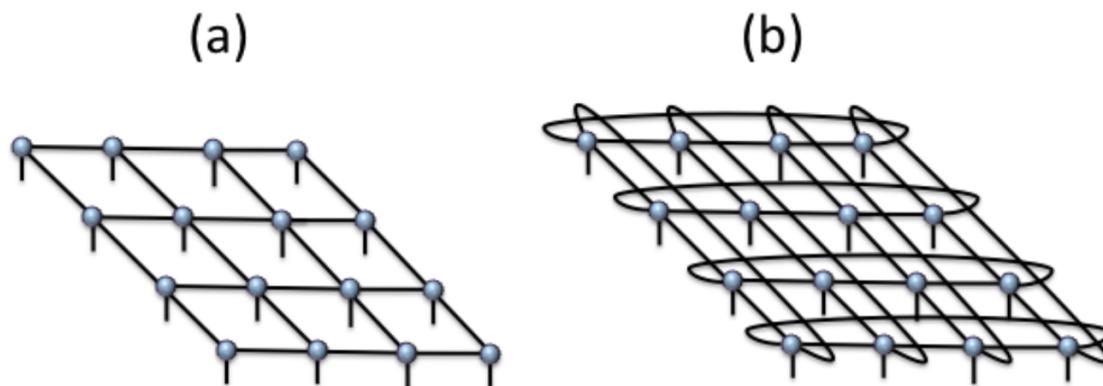


FIGURE II.21 – PEPS pour un réseau carré de  $4 \times 4$  sites avec conditions aux bords ouvertes (a) et conditions aux bords périodiques (b). [figure tirée de la référence [78]]

à conditions aux bords ouvertes (Fig. II.21(a)) et aux conditions aux bords périodiques (Fig. II.21(b)). En tant que tel cette généralisation peut sembler très simple, mais nous allons voir que les propriétés du PEPS sont remarquablement différentes de celles de MPS. Nous pouvons également définir des PEPS pour d'autres types de réseau comme le réseau hexagonal, triangulaire, ou encore kagomé. Nous reviendrons sur le cas du réseau kagomé lorsque nous aborderons la représentation en tenseurs simples.

### 2.3.2 Propriétés

Nous présentons maintenant quelques propriétés de base des PEPS (issues de la référence [78]) :

#### 1. Invariance par translation et limite thermodynamique.

Comme dans le cas des MPS, nous pouvons choisir que tous les tenseurs du PEPS soient différents, ce qui conduit à un PEPS non invariant par translation. Toutefois, il est également possible d'imposer une invariance par translation et de prendre la limite thermodynamique en choisissant une cellule élémentaire qui se répète à l'infini sur le réseau, voir par exemple la figure II.22.

#### 2. Les PEPS sont denses.

Comme c'est le cas pour les MPS, les PEPS forment une famille dense d'états, ce qui signifie qu'ils peuvent représenter n'importe quel état quantique dans l'espace de Hilbert à plusieurs corps, simplement en augmentant la valeur de la dimension de lien  $D$ . La dimension de lien  $D$  d'un PEPS doit être exponentiellement grande avec la taille du système afin de couvrir l'ensemble de l'espace de Hilbert. Néanmoins, nous nous attendons à ce que  $D$  soit raisonnablement petit pour les états de basses énergies de modèles quantiques intéressants. En pratique, cela est observé numériquement, mais il y a également des arguments théoriques en faveur de cette propriété. Par exemple, il est bien connu que  $D = 2$  est suffisant pour gérer les fonctions de corrélation à

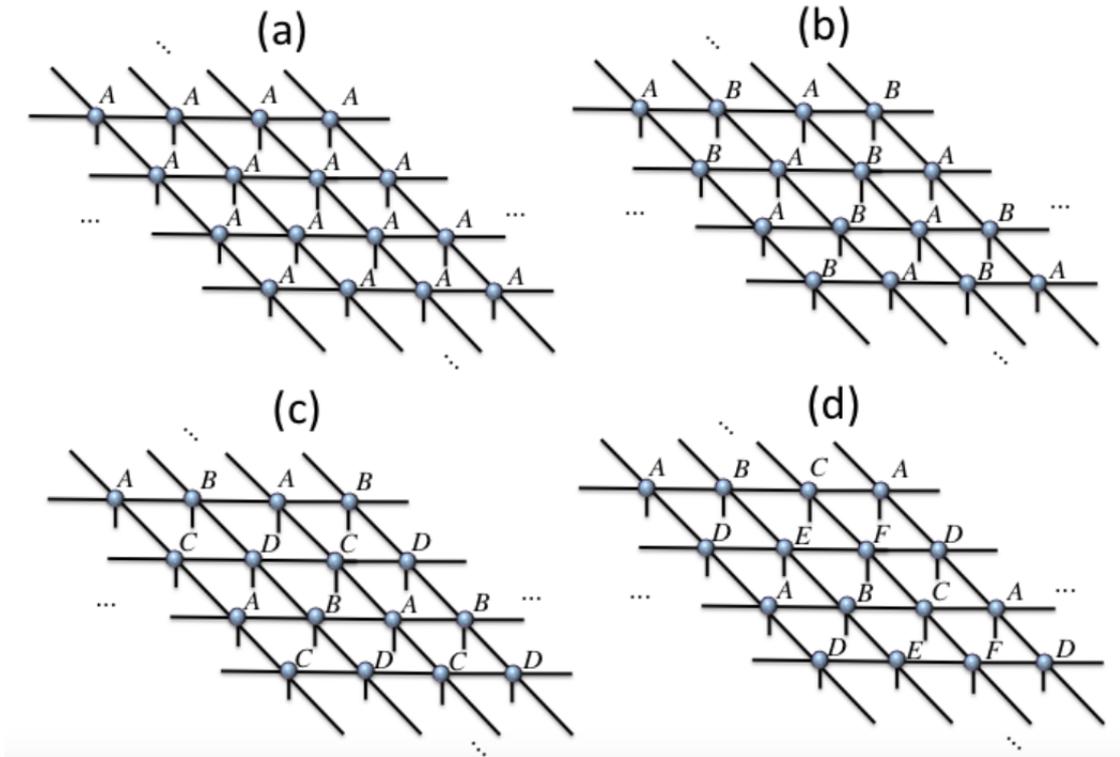


FIGURE II.22 – Différents PEPS invariants par translation, avec une cellule élémentaire de 1 (a), 2 (b), 4 (c) et 6 sites (d). [figure tirée de la référence [78]]

décroissance algébrique (et donc les états critiques) [102], qui est une différence remarquable avec les MPS. Ils peuvent également approximer avec une précision arbitraire les états thermalisés de hamiltoniens locaux [35, 107].

### 3. Loi des aires

Comme vu précédemment, les PEPS satisfont également la loi des aires pour l'entropie d'intrication (voir figure II.11). Dans la pratique, l'entropie d'intrication d'un bloc de PEPS de circonférence  $L$  et de dimension de lien  $D$  est toujours  $S(L) = \mathcal{O}(L \log D)$ . Comme vu précédemment, cette propriété est satisfaite par de nombreux états de systèmes quantiques, tels que certains états fondamentaux et excités de basse énergie de hamiltoniens locaux.

### 4. La contraction exact de PEPS est un problème de la classe #P.

Le calcul exact du produit scalaire entre deux PEPS est un problème exponentiellement dur. Cela signifie que pour deux PEPS arbitraires de  $N$  sites, cela prendra toujours un temps  $\mathcal{O}(\exp(N))$ , peu importe l'ordre dans lequel nous essayons de contracter les différents tenseurs. Du point de vue de la complexité de calcul, le calcul du produit scalaire de deux PEPS est un problème dans la classe de complexité #P [92]. Nous n'allons pas entrer dans les détails des classes de complexité mais voir ce que cela signifie en termes plus simples. La classe de complexité #P est la classe de problèmes liés à compter le nombre de solutions à des problèmes NP-complets. En outre, la classe NP-complet est communément comprise comme une classe de problèmes très difficiles en termes de complexité de calcul, et il est largement admis qu'il

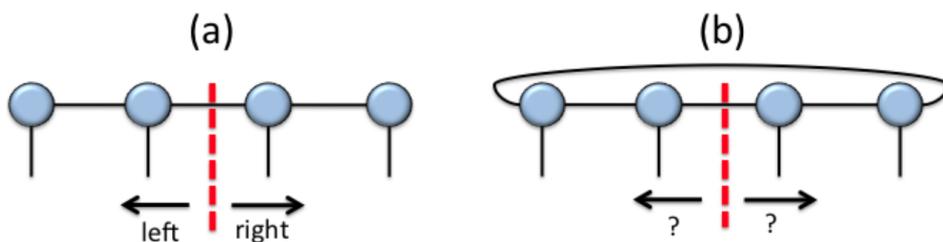


FIGURE II.23 – Pour un réseau de tenseurs ne comportant pas de boucles (typiquement un MPS à conditions aux bords ouvertes), nous pouvons définir une décomposition de Schmidt sans équivoque sur chaque lien, permettant ainsi une forme canonique (a). Dans le cas où au moins une boucle existe (pour des MPS à conditions aux bords périodiques et pour les PEPS), cette décomposition n’est plus possible, la forme canonique ne pouvant donc plus être définie (b). [figure tirée de la référence [78]]

n’y a pas d’algorithme classique (ou éventuellement quantique) capable de résoudre de tels problèmes. Une affirmation similaire est également vraie pour la classe  $\#P$ . Par conséquent, contrairement aux MPS, le calcul de produits scalaires exacts de PEPS arbitraires est, en principe, inefficace. Cependant, il est possible dans la pratique d’approximer ces valeurs moyennes en utilisant des méthodes numériques astucieuses (voir l’annexe B et l’annexe C).

## 5. Pas de forme canonique exacte

Contrairement aux MPS à conditions aux bords ouvertes, il n’existe pas de forme canonique d’un PEPS, au sens où il est impossible de choisir une base orthonormale simultanément pour tous les indices de lien. En fait, cela arrive déjà pour les MPS à conditions aux bords périodiques ou, plus généralement, dès qu’il y a une boucle dans le réseau de tenseurs. Strictement parlant, une boucle dans le réseau de tenseurs signifie que nous ne pouvons pas diviser formellement le réseau en deux parties gauche et droite en coupant un seul indice, de sorte que la décomposition de Schmidt entre gauche et droite n’a pas de sens dans cette situation. En pratique, cela signifie que nous ne pouvons pas définir une base orthonormée (c’est-à-dire une base de Schmidt) à gauche et à droite pour un indice donné, et donc nous ne pouvons pas définir une forme canonique en ce sens (voir Fig. II.23). Néanmoins, on observe numériquement que pour des PEPS non-critiques, il est généralement possible de trouver une forme quasi-canonique, forme qui est utilisée dans les méthodes d’optimisation numérique appelées *Simple Update* [47].

## 2.4 Représentations exactes de fonctions d'onde analytiques en termes de réseaux de tenseurs

### 2.4.1 État AKLT

Nous avons déjà traité le cas de cet état à une dimension, mais comme nous l'avons également vu, nous pouvons le généraliser pour tout type de système. La dimension de lien  $D$  nécessaire est  $D = 2$  et correspond aux degrés de liberté des spins  $1/2$  vivant sur les liens. Sa description peut se faire en deux étapes. La première consiste à symétriser les  $z$  spins,  $z = 4$  pour le réseau kagomé. Il en résulte un tenseur intermédiaire de rang 5  $T_{i,j,k,l}^M$ ,  $M \in [-2, 2]$  et  $i, j, k, l \in [-1/2, +1/2]$ . Ce premier tenseur est alors une combinaison de coefficients de Clebsch-Gordan  $C_{s_1, m_1; s_2, m_2}^{S, M}$ , avec  $M = m_1 + m_2$ , correspondant à la projection des quatre spins  $1/2$  sur le spin 2

$$T_{i,j,k,l}^M = C_{1,i+j; 1,k+l}^{2, M=i+j+k+l} C_{\frac{1}{2}, i; \frac{1}{2}, j}^{1, i+j} C_{\frac{1}{2}, k; \frac{1}{2}, l}^{1, k+l} \quad (\text{II.46})$$

Cependant, si nous utilisons ce tenseur, les états de liens seront de la forme  $|\text{lien}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, +\rangle + |-, -\rangle)$ , ce qui ne correspond pas à l'état singulet attendu. La deuxième étape consiste à appliquer une rotation  $\mathcal{U} = \exp(-i\frac{\theta}{2}\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma})$  sur les spins virtuels, avec  $\theta$  l'angle de rotation,  $\mathbf{n}$  le vecteur de rotation et  $\vec{\sigma}$  les matrices de Pauli. Afin d'obtenir les états singulets, il faut appliquer une rotation de  $\theta = \pi$  sur l'un des deux spins de l'état lié autour de l'axe  $y$ , ce qui donne  $\mathcal{U} = i\sigma^y$ . Cela donne le tenseur final  $A$  :

$$A_{i,j,k,l}^M = - \sum_{j', l'} T_{i, j', k, l'}^M \sigma_{j', j}^y \sigma_{l', l}^y \quad (\text{II.47})$$

ce qui correspond à la forme diagrammatique donnée sur la figure II.24. Toutefois, nous pouvons utiliser une version plus symétrique en utilisant  $\mathcal{U}' = \sqrt{\mathcal{U}}$  sur chaque spin  $1/2$  :

$$A'_{i,j,k,l}^M = \sum_{i', j', k', l'} T_{i', j', k', l'}^M \mathcal{U}'_{i, i'} \mathcal{U}'_{j', j} \mathcal{U}'_{k, k'} \mathcal{U}'_{l', l} \quad (\text{II.48})$$

avec  $\mathcal{U}' = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$

nous obtenons alors une représentation diagrammatique plus symétrique (voir Fig. II.25). Néanmoins, ces deux tenseurs représente le même état. Cela est dû à la liberté de jauge qu'il existe sur les liens d'un réseau de tenseurs.

### 2.4.2 État *Resonating Valence Bonds*

L'état de liens de valence résonants, ou *Resonating Valence Bonds* (RVB), a été décrit pour la première fois par P. W. Anderson [2] en 1973, et est connu pour être le premier état théorique décrivant un liquide de spin. Il s'agit d'un système de spins  $1/2$ , tous physiques cette fois, lié à l'un de ses proches voisins en état singulet (figure II.26). Sa description en réseau de tenseurs correspond à des

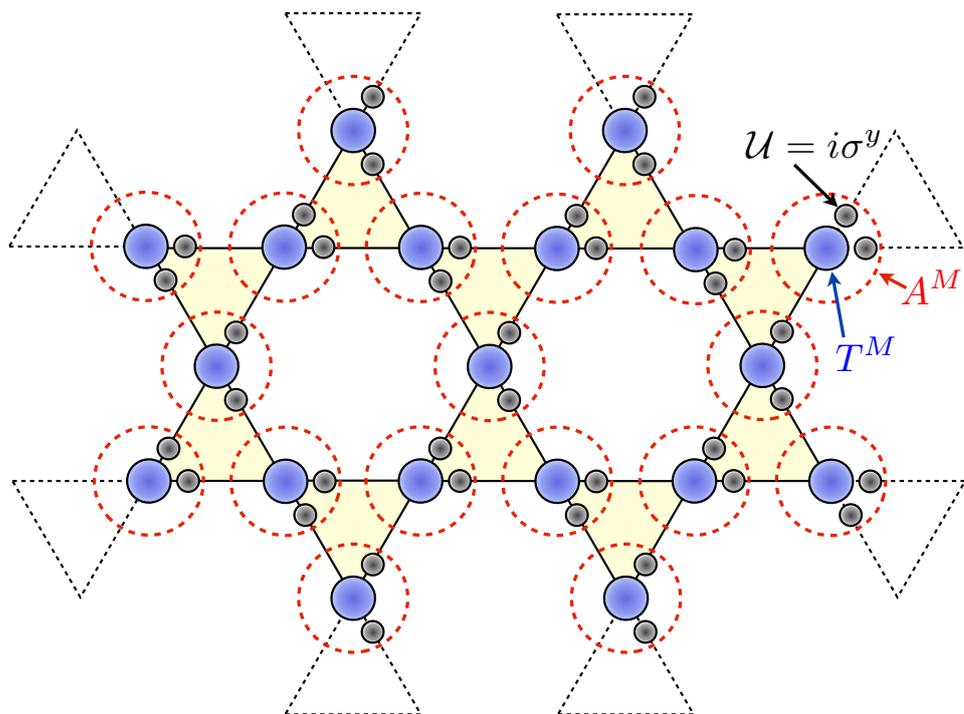


FIGURE II.24 – État AKLT sur réseau kagomé. Le tenseur  $A^M$  se compose d'un tenseur  $T^M$ , projecteur des spins 1/2 sur le spin 2, et de matrices de rotations  $\mathcal{U}$  sur chaque lien.

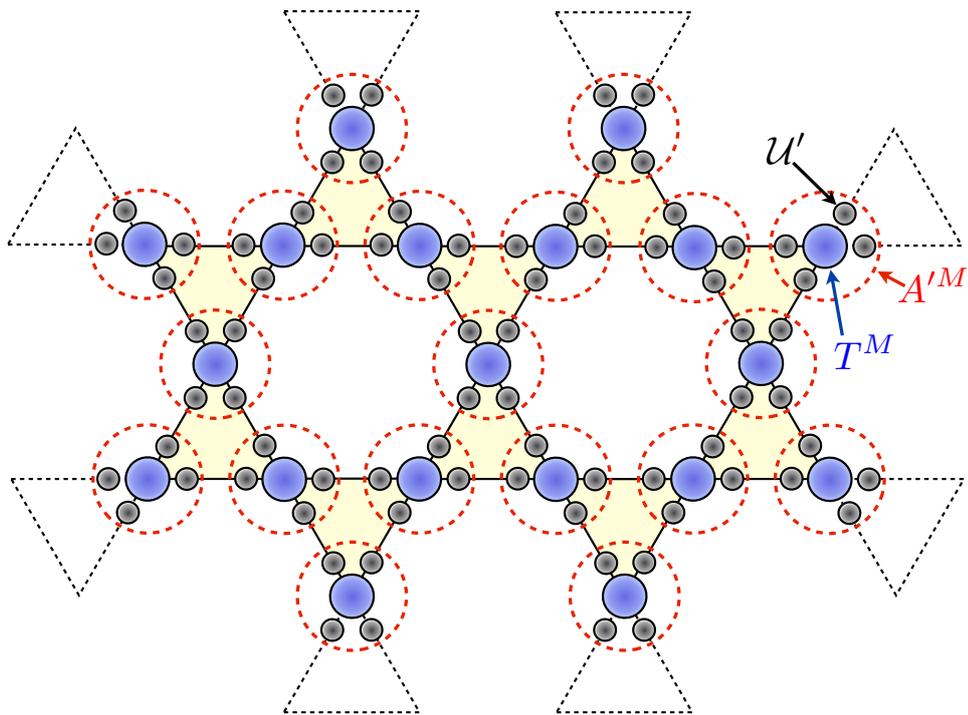


FIGURE II.25 – État AKLT symétrique sur réseau kagomé. Le tenseur  $A'^M$  se compose d'un tenseur  $T^M$ , projecteur des spins  $1/2$  sur le spin  $2$ , et de matrices  $U'$  sur chaque lien, telles que  $U'^2 = U$  correspond à la rotation de la figure II.24.

tenseurs de dimension  $D = 3$ , les degrés de liberté étant  $\frac{1}{2} \oplus 0$  (les composantes 0 et 1 correspondent aux degrés de liberté réels de spin et la composante 2 à l'absence de singulet). Le spin 0 correspond à l'absence de singulet, le spin virtuel  $1/2$  est directement projeté sur le spin physique. La construction est similaire à celle de l'état AKLT, incluant une première étape projetant les degrés de liberté virtuels sur le degré de liberté physique, suivi d'une rotation approprié sur les liens. Le tenseur intermédiaire  $T_{i,j,k,l}^{M_s}$  est :

$$T_{i,2,2,2}^i = T_{2,i,2,2}^i = T_{2,2,i,2}^i = T_{2,2,2,i}^i = 1 \quad \text{avec } i \in [0, 1] \quad (\text{II.49})$$

les autres termes du tenseurs étant nuls. Ce tenseur est le projecteur des degrés de liberté  $(\frac{1}{2} \oplus 0)_i \otimes (\frac{1}{2} \oplus 0)_j \otimes (\frac{1}{2} \oplus 0)_k \otimes (\frac{1}{2} \oplus 0)_l$  vers le spin  $(\frac{1}{2}_i \otimes 0_j \otimes 0_k \otimes 0_l) \oplus (0_i \otimes \frac{1}{2}_j \otimes 0_k \otimes 0_l) \oplus (0_i \otimes 0_j \otimes \frac{1}{2}_k \otimes 0_l) \oplus (0_i \otimes 0_j \otimes 0_k \otimes \frac{1}{2}_l)$ . De la même manière que pour l'état AKLT, il est nécessaire d'appliquer une rotation sur les liens du tenseur, soit une rotation  $\mathcal{U}$  (II.50) de  $\pi$  selon l'axe  $y$  agissant sur le spin  $1/2$ , soit une partie de la rotation  $\mathcal{U}'$  (II.51) sur chaque indice du tenseur (cf. état AKLT).

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.50})$$

$$\mathcal{U}' = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.51})$$

### 2.4.3 Représentation avec tenseurs simplexes : exemple de l'état AKLT

Décrit pour la première fois dans le cas du réseau kagomé [87, 91], puis généralisé pour tout type de réseau [110], cette représentation consiste en deux types de tenseurs : les tenseurs sur site, portant un indice physique (comme dans le cas de PEPS "standards") ainsi que des tenseurs simplexes permettant de connecter plusieurs tenseurs de site à la fois. Pour les PEPS "standards", ces tenseurs simplexes sont simplement les liens entre deux tenseurs de sites. Nous présentons le cas particulier du réseau kagomé avec tenseurs simplexes connectant les trois sites composant chaque triangle du réseau. En particulier, nous présentons l'exemple de l'état AKLT dans cette représentation comme outil pédagogique. Le lecteur intéressé à des cas plus généraux pourra se reporter à la référence [110].

Nous avons vu que l'état AKLT, sous sa forme PEPS simple, possède la particularité qu'elle ne nécessite qu'une dimension de lien  $D = 2$ , ce qui en fait l'état "réseau tenseur" le plus simple. En revanche, sous sa forme simplexe, sa description nécessite une dimension  $\tilde{D} = 3$  plus grande, bien que le nombre totale de coefficients soit réduit. Nous avons déjà la représentation "classique" de l'état AKLT. Nous pouvons le réécrire à l'aide de deux tenseurs simplexes  $R_{\alpha,\beta,\gamma}$  connectant trois tenseurs de site  $\Gamma_{\mu,\nu}^m$ , l'un sur les triangles *up*, l'autre sur les triangles *down* (Fig. II.27). La description physique ne fait intervenir que des spins virtuels  $S = 1$ , ce qui explique la dimension  $\tilde{D} = 3$ , symétrisé sur les sites afin d'obtenir

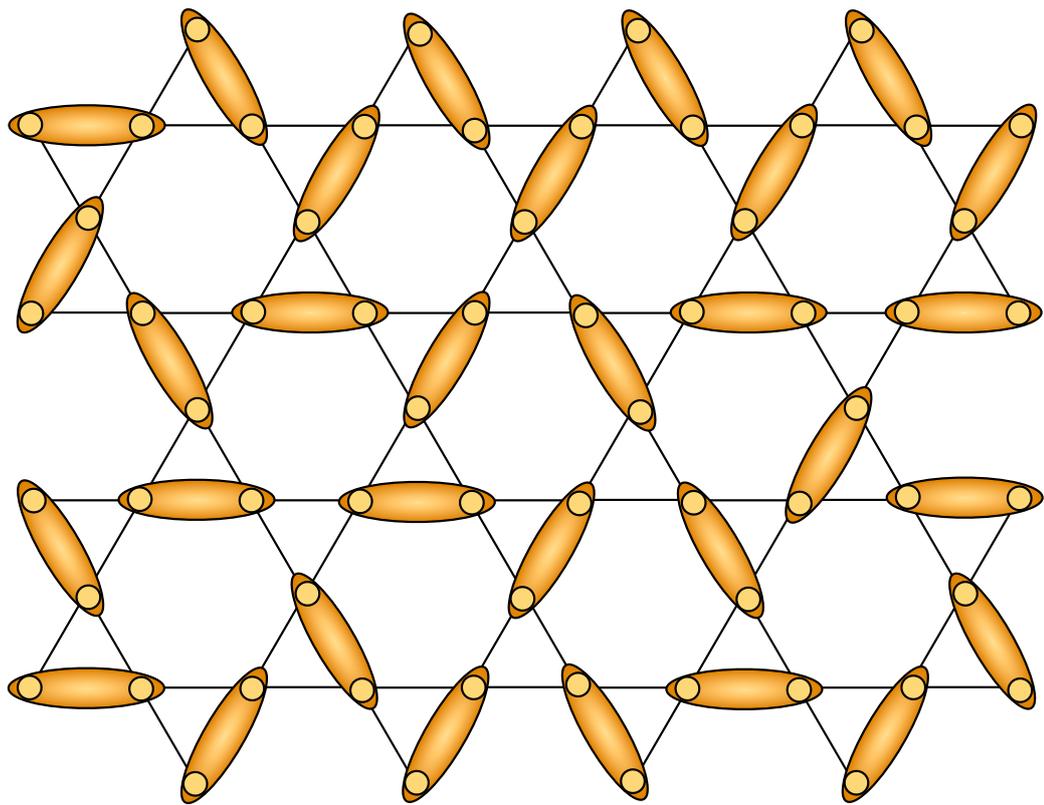


FIGURE II.26 – État RVB sur réseau kagomé. Le schéma présente un remplissage compact particulier de singulets de spins  $1/2$ , l'état RVB étant une superposition équiprobable de toutes les configurations possibles.

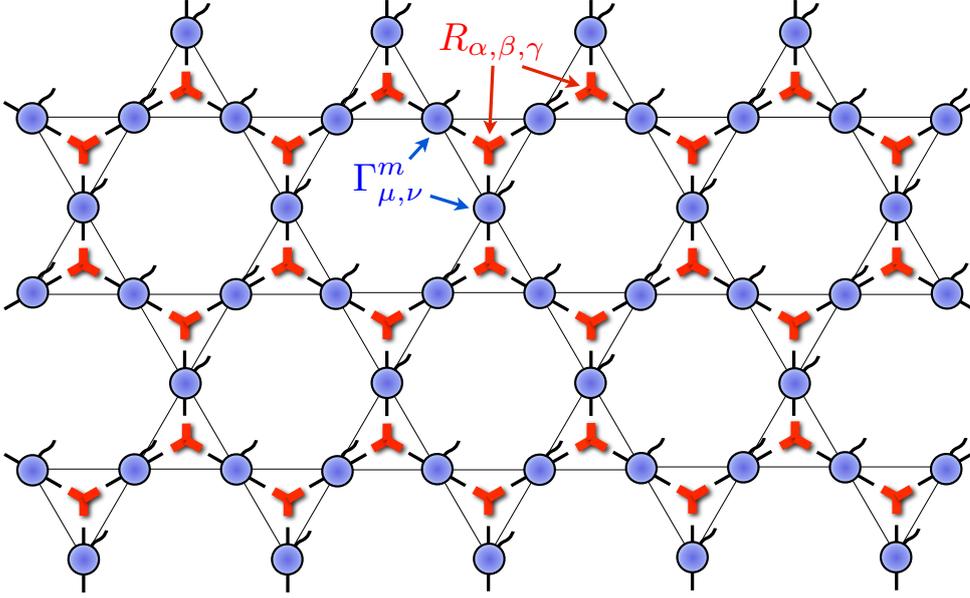


FIGURE II.27 – Représentation de l’état AKLT ( $S = 2$ ) sur le réseau kagomé utilisant des tenseurs simplex  $R_{\alpha,\beta,\gamma}$  connectant les trois sites  $\Gamma_{\mu,\nu}^m$  des triangles pavant le réseau. Ainsi défini, le réseau kagomé peut être vu comme un réseau hexagonal “décoré”.

un spin physique  $S = 2$ , et projetés trois par trois (à l’intérieur de leur triangle d’appartenance) sur le spin  $S = 0$ .

$$\begin{aligned} R_{\alpha,\beta,\gamma} &= \epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} & \alpha, \beta, \gamma &\in [1, 3] \\ \Gamma_{\mu,\nu}^m &= C_{1,\mu;1,\nu}^{S=2,m} & m &\in [-2, 2] \end{aligned} \quad (\text{II.52})$$

$\epsilon$  est le tenseur anti-symétrique de Levi-Civita, qui donne les coefficients d’un état de spin 0 constitué de trois spins 1, au facteur de normalisation  $\frac{1}{\sqrt{6}}$  près. Les  $C_{1,\mu;1,\nu}^{S=2,m}$  sont les coefficients de Clebsch-Gordan pour la composition de deux spins 1 en un spin 2. Le nombre d’éléments est maintenant de  $N_{splx} = 2\tilde{D}^3 + 3d\tilde{D}^2$  avec  $\tilde{D} = 3$ , alors que précédemment, la formulation nécessitait  $N_{cl} = 3dD^4$  avec  $D = 2$ , et  $d = 5$  dans les deux cas, ce qui donne  $N_{splx} = 189 < N_{cl} = 240$ . La comparaison du nombre d’éléments non nuls mène au même constat  $N_{splx} = 39 < N_{cl} = 42$ .

#### 2.4.4 Fonctions d’onde paramétrées sous champ

Nous allons voir que nous pouvons construire des PEPS paramétrés, permettant ainsi le contrôle des propriétés de l’état. Ces états, servant à minimiser l’énergie de modèles particuliers, peuvent comprendre un “dopage” comme pour les modèles

$J_1 - J_2$  [104] et  $t - J_1 - J_2$  [85] sur réseau carré, ou encore être une interpolation entre deux états, comme l'état RVB-dimères [91], ou encore Resonating AKLT Loop (RAL)-RVB de spin  $S = 1$  [56]. D'autres états peuvent être construits dans le but de présenter des propriétés particulières comme une chiralité [84]. Dans cette section, nous allons voir le cas particulier de l'état AKLT de spin  $S = 3/2$  sous champ magnétique [86] sur réseau hexagonal.

Dans ce travail, le comportement de liquides de spins *gappés* sous un champ magnétique appliqué est étudié. À petit champ, avant que le gap de spin disparaisse, le système reste dans le même état fondamental singulet. Par conséquent, la courbe d'aimantation (c'est-à-dire l'aimantation en fonction du champ) de systèmes possédant un gap de spin commence généralement par un plateau d'aimantation à aimantation nulle, jusqu'à un champ critique  $h_{c1}$  (qui correspond au gap de spin en unités appropriées) avant que l'aimantation commence à croître continûment. En d'autres termes, la phase d'aimantation nulle (avec gap) a une susceptibilité magnétique nulle et peut donc être considérée comme un liquide "incompressible", contrairement à la phase d'aimantation finie compressible (c'est-à-dire sans gap) existant entre les champs  $h_{c1}$  et  $h_{c2}$ , au-delà duquel le système est complètement polarisé. Pour décrire la phase sans gap, un PEPS peut être construit, portant une aimantation finie et provenant d'une représentation PEPS simple du liquide de spin à champ nul correspondant. Notons que pour les champs inférieurs à  $h_{c1}$ , la représentation PEPS de l'état fondamental est inchangée.

Par construction, cet *ansatz* de liquide de spin sans gap préserve toutes les symétries d'espace mais peut ou non briser la symétrie de spin  $U(1)$  dans le plan perpendiculaire au champ magnétique, menant à un superfluide (de spin) ou un liquide de Bose, respectivement. Notons que les cristaux brisant la symétrie de translation et stabilisant ainsi des plateaux d'aimantation à des valeurs commensurables de l'aimantation, ne sont pas abordés ici.

Nous voyons le cas du hamiltonien AKLT pour un spin  $S = 3/2$  sous un champ magnétique appliqué :

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} P^{2S} (\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_j) - h \sum_i S_i^z \quad (\text{II.53})$$

où la somme est sur tous les plus proches voisins,  $P^{S_{\text{tot}}=3}$  est le projecteur sur le spin total  $S_{\text{tot}} = 3$  agissant sur l'espace de Hilbert des sites  $i$  et  $j$  et  $h = g\mu_B H$  est le champ effectif réduit. L'état fondamental AKLT sur réseau hexagonal correspond à trois spins  $1/2$  sur chaque site, projetés sur le spin physique  $3/2$ . Après l'application d'un champ  $h$  finie, l'aimantation  $m = \langle \sum_i S_i^z \rangle$  commence à augmenter au-dessus du champ critique  $h_{c1}$  pour lequel l'énergie Zeeman dépasse l'énergie du gap de spin. Intuitivement, une augmentation de la densité  $x = m/m_{\text{sat}}$  des singulets sont transformés en triplets polarisés jusqu'au champ de saturation  $h_{c2}$ , où tous les singulets sont changés en triplets et  $m = m_{\text{sat}} = SN$ , où  $N$  est le nombre de sites (Fig. II.28(a)). Dans cette description, les triplets "résonnent" pour minimiser l'énergie et former un état AKLT à liens triplets résonants, *resonating triplet bonds* (RTB). Un moyen de construire un état RTB AKLT est d'étendre le PEPS AKLT de dimension  $D = 2$  à un PEPS de dimension  $D = 3$  avec des liens  $|01\rangle - |10\rangle + |22\rangle$ , où  $|1\rangle$  et  $|2\rangle$  correspondent tous deux à  $S_z = +\frac{1}{2}$  et  $|22\rangle$  représente un triplet. Les

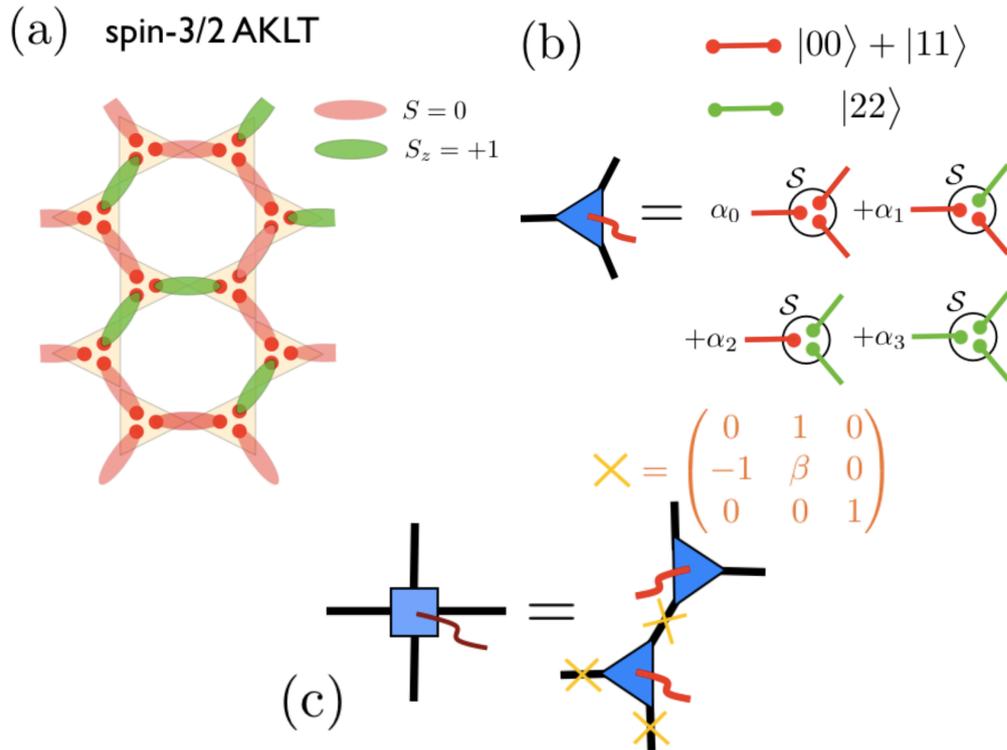


FIGURE II.28 – (a) État AKLT  $S = 3/2$  sur réseau hexagonal sous un champ magnétique extérieur. Chaque spin est divisé en trois spins virtuels  $1/2$  (points rouges). Une configuration de liens de valence est construite en combinant les spins  $1/2$  voisins en singulet (liens rouges) ou en triplets (liens verts). (b) Une généralisation à  $D = 3$  du PEPS AKLT est obtenue en considérant, en plus des états maximalelement intriqués  $|00\rangle + |11\rangle$ , des liens  $|22\rangle$  correspondants aux triplets. Ensuite, les spins sur chaque site sont symétrisés, et à une configuration avec  $p$  triplets est assignée un poids  $\alpha_p$ . (c) Les tenseurs sur les sous-réseaux  $A$  et  $B$  sont regroupés pour former un réseau carré effectif. Sur les liens, les matrices  $X$  transforment les états  $|00\rangle + |11\rangle$  en état  $|01\rangle - |01\rangle + \beta|11\rangle$ .

trois spins sont d'abord symétrisés comme dans l'état AKLT, et ensuite projetés sur une configuration avec  $p$   $|2\rangle$  avec un poids relatif  $\alpha_p$  (Fig. II.28(b)). Nous nous attendons à ce que les triplons interagissent faiblement, de sorte que par simplicité, les coefficients  $\alpha_p$  sont choisis égaux à leur probabilité statistique  $\alpha_p^*(\lambda)$  avec  $\alpha_0^*(\lambda) = (1 - \lambda)^3$ ,  $\alpha_1^*(\lambda) = 3\lambda(1 - \lambda^2)$ ,  $\alpha_2^*(\lambda) = 3\lambda^2(1 - \lambda)$  and  $\alpha_3^*(\lambda) = \lambda^3$ , dépendant d'un seul paramètre  $\lambda \in [0, 1]$  jouant le rôle de fugacité pour les triplons. Une façon différente d'introduire la fluctuation de triplons  $S_z = +1$  est d'autoriser un mélange de triplets et de singulets sur chaque lien, c'est-à-dire de remplacer le singulet virtuel  $|01\rangle - |10\rangle$  par un état  $|01\rangle - |10\rangle + \beta|11\rangle$  avant la symétrisation, gardant la dimension de lien  $D = 2$ . Ce mélange peut également être réalisé sur l'état  $D = 3$ , décrit ci-dessus, créant une famille de PEPS à deux paramètres. Ces états sont généralement non invariants sous une rotation autour de l'axe  $z$ , et peuvent donc avoir une aimantation finie dans le plan. L'énergie variationnelle  $E_{\text{AKLT}}(x) = \frac{1}{N}\langle H_{\text{AKLT}} \rangle$  des PEPS RTB-AKLT est étudiée ici. Choisir  $\beta = 0$  et faire varier  $\lambda$  fournit (approximativement) la meilleure énergie pour  $x > 0.2$ , tandis que pour  $x < 0.2$ , le PEPS avec  $\lambda = 0$  et  $\beta \neq 0$  a une énergie inférieure. La courbe d'énergie totale obtenue à partir de ces deux PEPS est déjà très précise, comme indiqué sur la figure II.29, lorsqu'elle est comparée à des énergies issues de diagonalisations exactes. En optimisant en fonction de  $\alpha$  et  $\beta$  simultanément, on peut abaisser l'énergie encore plus, en particulier pour  $x < 0.3$ . La courbe d'aimantation  $m(h)/m_{\text{sat}}$  peut être obtenue en minimisant  $E_{\text{AKLT}}(x) - (hS)x$  en fonction de  $x$ . Les pentes  $\frac{1}{S}dE_{\text{AKLT}}/dx$  à  $x = 0$  et  $x = 1$  nous donnent les champs critiques inférieur et supérieur  $h_{c1}$  et  $h_{c2}$  comme indiqué sur la figure II.29. Notons que, dans nos unités,  $h_{c1}$  est égal au gap de spin à champ nul. La physique à proximité de la saturation  $m/m_{\text{sat}}$  est exactement décrite par ce PEPS (avec  $\lambda \rightarrow 1$ ). Aussi, l'estimation  $h_{c1} \simeq 0.113$  (pour  $\alpha, \beta \rightarrow 0$ ) est assez proche de valeurs extrapolées (en champ nul) du gap  $\Delta_S \simeq 0.10$  [28, 29]. De façon générale, les PEPS AKLT dopés présentent une aimantation transverse alternée dans le plan perpendiculaire au champ, à savoir  $\langle S_i^x \rangle = (-1)^i \times \text{cst}$  (où  $(-1)^i = \pm 1$  dépend du sous-réseau) et  $\langle S_i^y \rangle = 0$ , et donc brise la symétrie  $U(1)$ . Cette propriété est générale pour n'importe quels  $\alpha_p$  et  $\beta$  (sauf, éventuellement, pour des points isolés). Lorsque  $m \rightarrow 0$  ( $m \rightarrow m_{\text{sat}}$ ), le système peut être vu comme une faible concentration  $x$  ( $1 - x$ ) de triplets (singulets) bosoniques en interaction, subissant une condensation de Bose et formant un superfluide corrélé. Dans l'approche semi-classique appliquée aux spins  $1/2$  formant des dimères, la quantité  $(\langle S_i^x \rangle / S)^2$  est la densité de condensat de triplons. Elle peut également être un bon indicateur, tout en restant une approximation, pour des spins  $S > 1/2$ , et est représentée figure II.30(a) en fonction de l'aimantation réduite pour  $\alpha_p = \alpha_p^*(\lambda)$ ,  $\beta = 0$  et pour  $\lambda = 0$ ,  $\beta \neq 0$ . Lorsque  $x \rightarrow 1$ , au voisinage de la saturation,  $(\langle S_i^x \rangle / S)^2 \rightarrow 2(1 - x)$ , correspondant exactement à la densité effective de singulet. En revanche, dans la limite de faible aimantation  $x \rightarrow 0$ ,  $(\langle S_i^x \rangle / S)^2 \rightarrow 19x$  ( $\alpha = 0$  et  $\beta \neq 0$  produisant le meilleur *ansatz*). Un état RTB-AKLT peut également être construit avec  $\alpha_2 = \alpha_3 = 0$ , forçant ainsi "à la main" la répulsion entre triplets. Fait intéressant, comme on le voit sur la figure II.30(b), le paramètre d'ordre superfluide s'annule maintenant pour une aimantation  $m/m_{\text{sat}} = 1/3$  (toujours comme la racine carrée) donnant naissance à un liquide de Bose (possédant un gap) avec restauration de la symétrie  $U(1)$ . Cet état

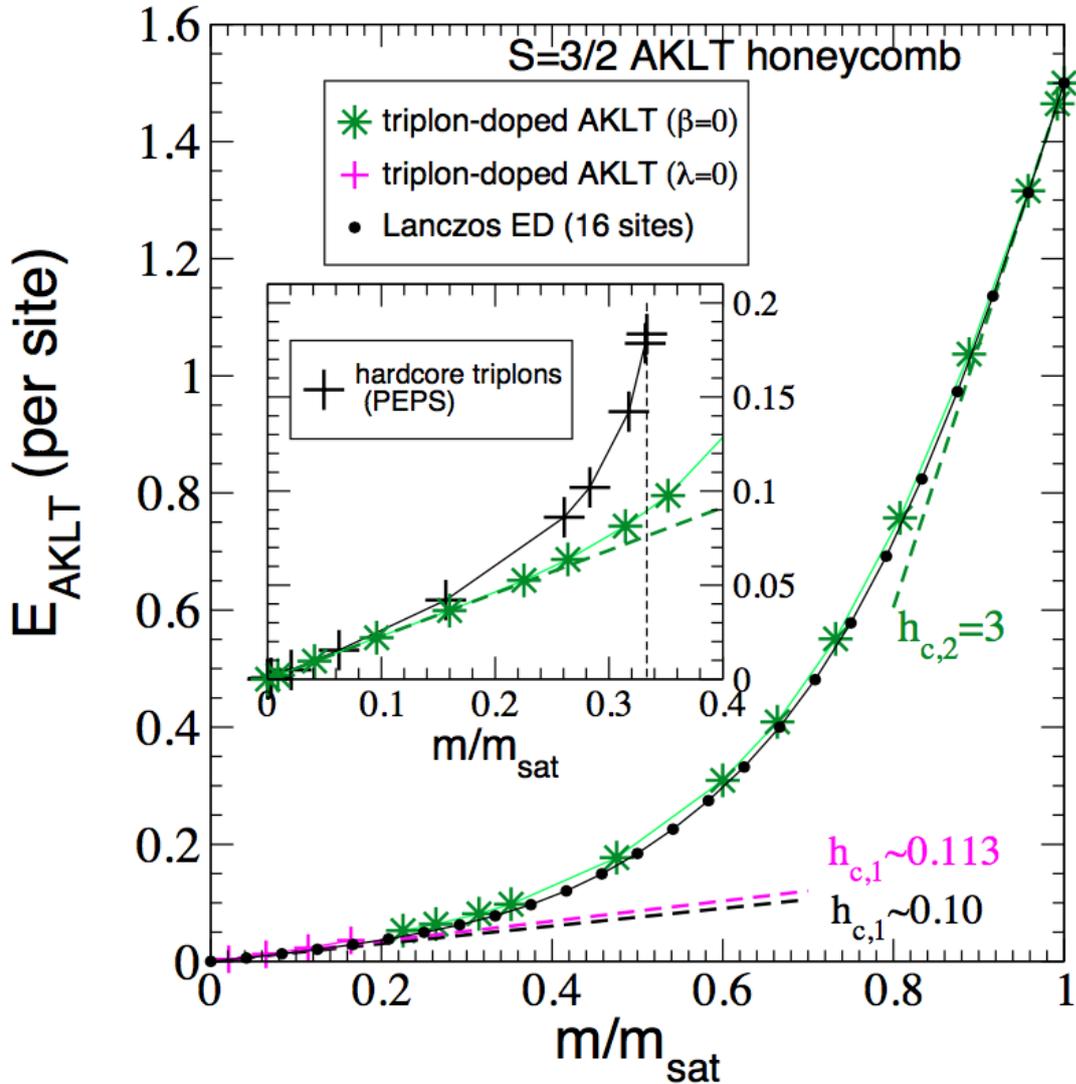


FIGURE II.29 – Énergie par site (différents symboles sont utilisés quand soit  $\lambda = 0$ , soit  $\beta = 0$ ) de l'état AKLT de spin 3/2 dopé en triplons en fonction de l'aimantation réduite. Le PEPS donne le comportement asymptotique exact proche de la saturation (la pente est  $h_{c,2} = 3$  à  $m = m_{\text{sat}}$ ) et la pente à champ faible ( $h_{c,2} \simeq 0.113$ ) est en accord avec la référence [27]. Encart : comparaison entre les énergies du PEPS AKLT avec triplons de cœur mou et de cœur dur. Les résultats des PEPS sont comparés à des données calculées à partir de diagonalisation exacte Lanczos effectuées par S. Capponi. [figure tirée de la référence [86]].

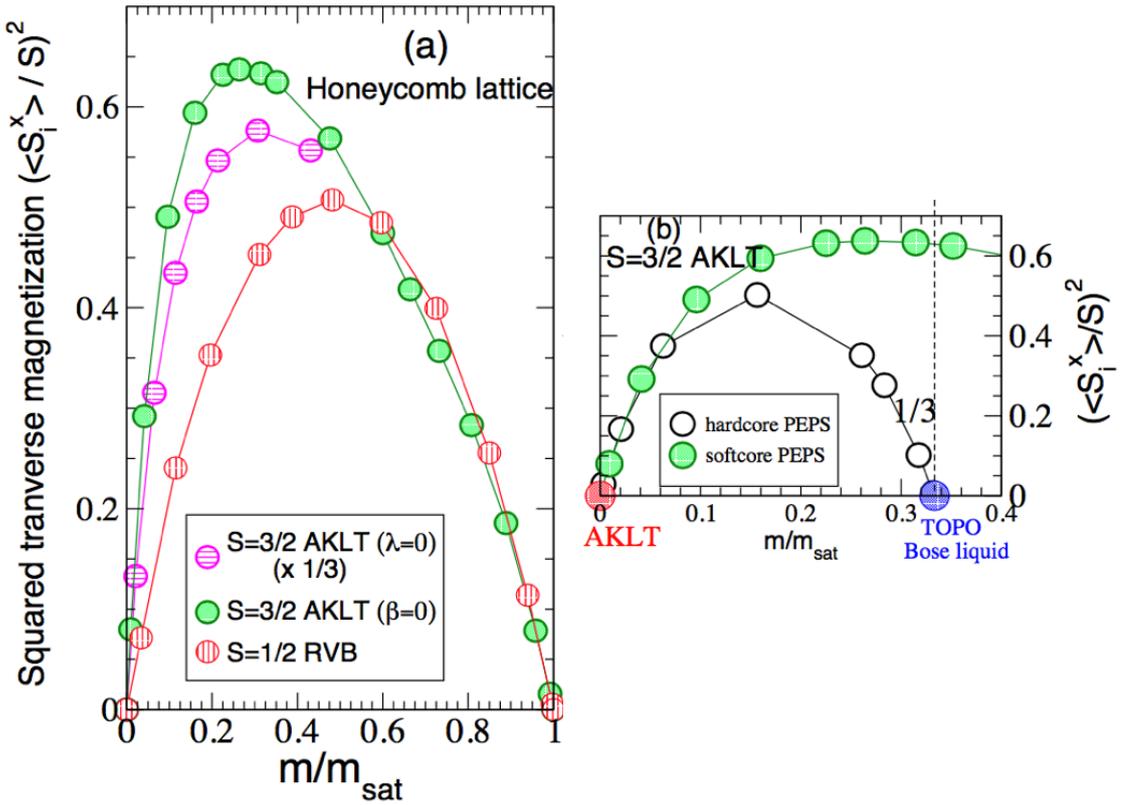


FIGURE II.30 – Carré de l’aimantation transverse  $(\langle S_i^x \rangle / S)^2$  en fonction de l’aimantation réduite. (a) AKLT  $S = 3/2$  dopé en triplons. (b) Comparaison de PEPS AKLT dopé en triplons de cœur mou (voir (a)) et de cœur dur. [figure tirée de la référence [86]].

est le “négatif” de l’état RVB  $S = 1/2$  : l’état AKLT singulet ( $m = 0$ ) peut être vu comme le nouveau “vide” quantique où les triplets de “cœur dur” résonnent à une densité de  $1/3$ . Cet état topologique (malgré sa mauvaise énergie variationnelle par rapport au hamiltonien AKLT (voir Fig.II.29) pourrait encore être stabilisé lorsque la répulsion effective des triplets est suffisamment grande (mais pas nécessairement infinie).

Dans le chapitre III, nous allons voir le modèle AKLT sur réseau kagomé sous l’influence d’un champ magnétique. Dans ce cas, nous utiliserons des algorithmes afin d’optimiser complètement les tenseurs, c’est-à-dire augmenter considérablement l’espace des paramètres. Nous allons voir dans la section suivante comment nous pouvons effectuer cette optimisation.

## 2.5 Méthodes d’optimisation

### 2.5.1 Évolution en temps imaginaire

De manière générale, il n’existe qu’une poignée d’état physique ayant une représentation exacte. Il faut donc optimiser ces tenseurs afin d’obtenir une énergie

variationnelle, et donc de pouvoir étudier les propriétés de l'état correspondant. Pour cela, trois techniques peuvent être employées. La première, que nous venons de voir, consiste à écrire des PEPS paramétrés, se ramenant à la minimisation d'une fonction de quelques variables (une variable unique étant souvent utilisée). Il s'agit ici d'intuiter des propriétés très particulière pour les tenseurs, souvent de dimension de lien  $D$  faible, autorisant ainsi des calculs plus rapide et une grande connaissance de l'état.

La deuxième manière, plus "force brute", consiste à optimiser tous les éléments des tenseurs. Si nous écrivons l'ensemble des tenseurs que nous souhaitons optimiser  $\{A\}$ , l'énergie s'écrit alors

$$E(\{A\}) = \frac{\langle \Psi(\{A\}) | \hat{\mathcal{H}} | \Psi(\{A\}) \rangle}{\langle \Psi(\{A\}) | \Psi(\{A\}) \rangle} \quad (\text{II.54})$$

où  $E(\{A\})$  est une fonction à  $NdD^z$  variables, où  $N$  est le nombre de sites du système ou de la cellule élémentaire,  $d$  la dimension physique,  $D$  la dimension de lien et  $z$  la coordinnce du réseau. Bien que le nombre de variables augmente linéairement avec le nombre de particules, pour un  $D$  fixé, nous voyons que minimiser l'énergie en fonction de ces variables reste un problème nécessitant les algorithmes les plus sophistiqués et des temps de calcul très long, ce qui en fait une technique non adaptée. Cependant, nous pouvons nous aider des principes de la mécanique quantique pour simplifier cette tâche, ce qui nous mène à la troisième méthode, très largement utilisée. Elle est basée sur l'évolution temporelle, régit par l'équation dynamique de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\Psi(t)\rangle \quad (\text{II.55})$$

où  $\hat{\mathcal{H}}$  est le hamiltonien décrivant le système, de dimension  $M$ . Cela mène à une évolution temporelle de l'état de la forme

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\hat{\mathcal{H}}}{\hbar}t} |\Psi(0)\rangle \quad (\text{II.56})$$

Par la suite, nous poserons  $\hbar = 1$ . Supposons maintenant qu'un état initial  $|\Psi_0\rangle = \sum_{i=0}^{M-1} c_i |\phi_i\rangle$ , où les  $|\phi_i\rangle$  sont les vecteurs propres de  $\hat{\mathcal{H}}$ , évolue en temps imaginaire  $\tau = it$ , nous obtenons

$$|\Psi(\tau)\rangle = \sum_{i=0}^{M-1} c_i e^{-E_i\tau} |\phi_i\rangle \quad (\text{II.57})$$

Réécrivons l'équation II.57 sous une forme plus adéquat

$$e^{E_0\tau} |\Psi(\tau)\rangle = c_0 |\phi_0\rangle + \sum_{i=1}^{M-1} c_i e^{-(E_i-E_0)\tau} |\phi_i\rangle \quad (\text{II.58})$$

$E_0$  étant l'énergie de l'état fondamental, toutes les différences  $(E_i - E_0) > 0$ . Si  $\tau \rightarrow +\infty$ , nous voyons que les  $e^{-(E_i-E_0)\tau} \rightarrow 0$ . En supposant que le recouvrement de l'état initial et l'état fondamental est non nul, c'est à dire  $c_0 \neq 0$ , et que l'état fondamental est non dégénéré, la limite de  $\tau$  tendant vers  $\infty$  tend vers l'état fondamental du système, à un coefficient de normalisation près. Cela conduit à  $e^{-\mathcal{H}\tau} \rightarrow |\phi_0\rangle\langle\phi_0|$  quand  $\tau \rightarrow \infty$ .

### 2.5.2 Algorithme *Simple Update*

Il existe deux familles d'algorithmes d'optimisation de tenseurs : les méthodes *Simple Update* et les méthodes *Full Update*. La différence majeure entre ces deux types d'optimisation est l'environnement considéré lors des calculs. Dans le cas du *Simple Update*, on utilise la forme quasi-canonique, où l'environnement est donné dans une approximation de type champ moyen au travers de matrices diagonales  $\lambda$  sur les liens. Dans le cas du *Full Update* (voir annexe A), nous calculons explicitement un environnement, en utilisant des méthodes types CTMRG (voir annexe B) ou encore basé sur une représentation MPS (voir annexe C). Il existe une version améliorée du *Full Update*, basée sur le "recyclage" de l'environnement et un choix de jauge fixe, appelée *Fast Full Update* [81]. Nous allons montrer un exemple simple sur le réseau carré afin de présenter le principe, puis l'algorithme sur des tenseurs simplexés sur le réseau kagomé qui est la méthode que nous avons utilisée lors de nos calculs. Nous présentons le principe du cas du *Full Update* dans l'annexe A.

#### i) Principe et exemple sur réseau carré

Afin d'illustrer le principe, nous voyons le cas d'un réseau carré infini, décrit par une cellule élémentaire de deux sites,  $A$  et  $B$ . Le but est, partant d'un état aléatoire et étant donné un hamiltonien local  $\mathcal{H}$ , de converger vers un ensemble de nouveaux tenseurs  $\tilde{A}$  et  $\tilde{B}$  tel que le produit scalaire  $\langle \Psi(\tilde{A}, \tilde{B}) | \Psi_0 \rangle$ , où  $|\Psi_0\rangle$  est l'état fondamental, soit maximum. Pour se faire, nous utilisons l'évolution en temps imaginaire présentée précédemment. Dans le but d'optimiser localement les tenseurs, nous utilisons une décomposition de Suzuki-Trotter, basée sur la formule de Baker–Campbell–Hausdorff, de l'opérateur d'évolution. Nous avons vu que

$$e^{-\tau\mathcal{H}}|\Psi(\tau=0)\rangle \underset{\tau \rightarrow \infty}{=} |\Psi_0\rangle \quad (\text{II.59})$$

La première étape est de discrétiser le temps imaginaire  $\tau$  en petit pas  $\delta\tau$ , de telle sorte que

$$e^{-N\delta\tau\mathcal{H}}|\Psi(\tau=0)\rangle \underset{N \rightarrow \infty}{=} |\Psi_0\rangle \quad (\text{II.60})$$

L'algorithme devient alors une succession d'application de l'opérateur  $e^{-\delta\tau\mathcal{H}}$ , jusqu'à ce que les tenseurs convergent vers un point fixe. Cependant, cette opérateur est global, ce qui rend son application sur un réseau infini impossible. Le hamiltonien étant local, il s'écrit

$$\mathcal{H} = \sum_{i \in \{A\}} (h_{i-1,i}^L + h_{i,i+1}^R + h_{i-1,i}^U + h_{i,i+1}^D) \quad (\text{II.61})$$

où  $\{A\}$  correspond au sous réseau des sites  $A$ , les labels  $L$ ,  $R$ ,  $U$  et  $D$  correspondent à une convention que nous utiliserons pour identifier les liens sur le réseau carré, à savoir  $L$  pour gauche (*left*),  $R$  pour droite (*right*),  $U$  pour haut (*up*) et  $D$  pour bas (*down*). Après une décomposition de Suzuki-Trotter, et grâce à la nature local du hamiltonien, l'opérateur devient

$$e^{-\delta\tau\mathcal{H}} = e^{-\delta\tau h_{i-1,i}} e^{-\delta\tau h_{i,i+1}^R} e^{-\delta\tau h_{i-1,i}^U} e^{-\delta\tau h_{i,i+1}^D} + \mathcal{O}(\delta\tau^2) \quad (\text{II.62})$$

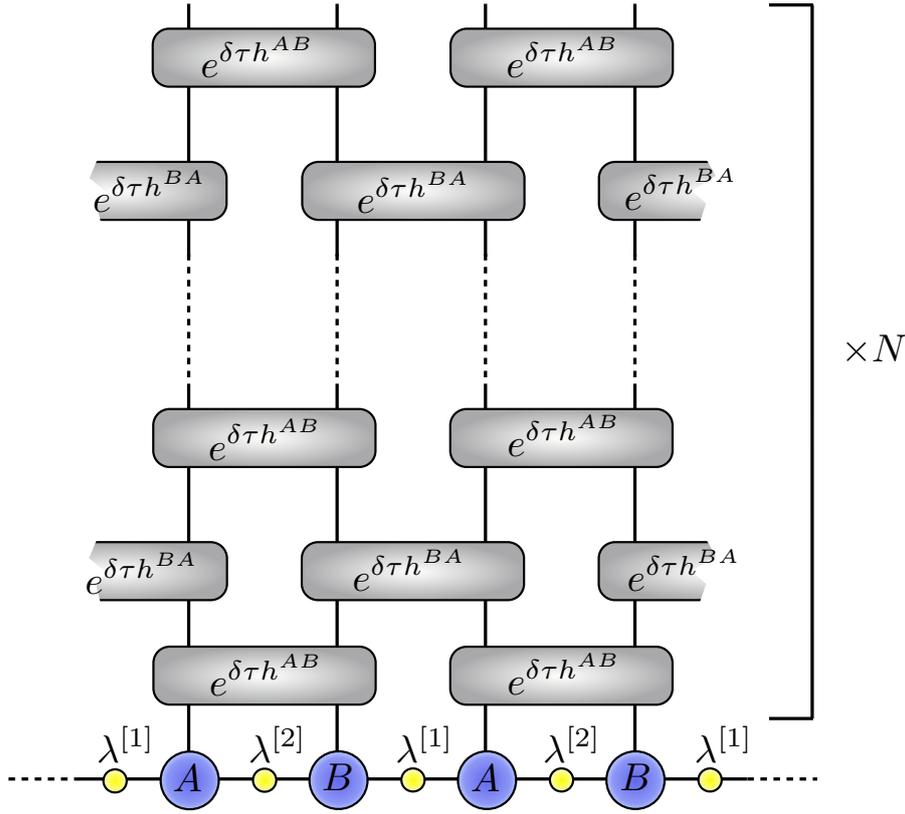


FIGURE II.31 – Application de l’opérateur d’évolution  $\mathcal{U}(\delta\tau) = e^{\delta\tau h}$  à sur un MPS.

Nous représentons sur la figure II.31 l’application de cet opérateur à une dimension (par soucis de lisibilité), cet application devant se voir dans les deux directions de l’espace, en “quinconce”. Pour la suite, nous allons considérer que  $h_{i,i+1}^L = h_{i,i+1}^R = h_{i,i+1}^U = h_{i,i+1}^D = h_{i,i+1}$  (ce qui est généralement le cas). L’opérateur d’évolution local peut s’écrire simplement  $U(\delta\tau) = e^{-\delta\tau h_{i,i+1}}$  et agit dans l’espace de Hilbert des deux sites  $A$  et  $B$ .

Pour cette optimisation, le PEPS infini (iPEPS) est composé de tenseurs  $A_{l_A, r_A, u_A, d_A}^{s_A}$  et  $B_{l_B, r_B, u_B, d_B}^{s_B}$ , ainsi que de matrices diagonales  $\lambda_k^{[n]}$ , où  $n \in [1, 4]$  correspond aux 4 liens différents du réseau (Fig.II.32).

Nous allons maintenant voir l’exemple d’une optimisation locale entre les tenseurs  $A$  et  $B$  le long du lien 2.

1. Cette première étape consiste à contracter les tenseurs  $A_{l_A, k, u_A, d_A}^{s_A}$  et  $B_{k, r_B, u_B, d_B}^{s_B}$  et les matrices  $\lambda_{l_A}^{[1]}$ ,  $\lambda_{r_B}^{[1]}$ ,  $\lambda_k^{[2]}$ ,  $\lambda_{u_A}^{[3]}$ ,  $\lambda_{d_B}^{[3]}$ ,  $\lambda_{d_A}^{[4]}$  et  $\lambda_{u_B}^{[4]}$  de façon approprié puis d’appliquer l’opérateur local  $U(\delta\tau)_{s_A, s_B}^{s'_A, s'_B}$  à ce bloc (Fig. II.33(a)). Les matrices  $\lambda$  absorbées sur les liens extérieurs correspondantes (dans une approche quasi-canonique) à l’approximation de l’environnement de la cellule considérée.
2. Le nouveau tensor de rang-8 et de dimension  $d^2 D^6$  ainsi obtenu peut être réécrit comme une matrice  $\Theta_{i_A, i_B}$  de dimension  $dD^3 \times dD^3$ . Les indices  $i$  correspondantes aux regroupements des indices des tenseurs initiaux, à savoir

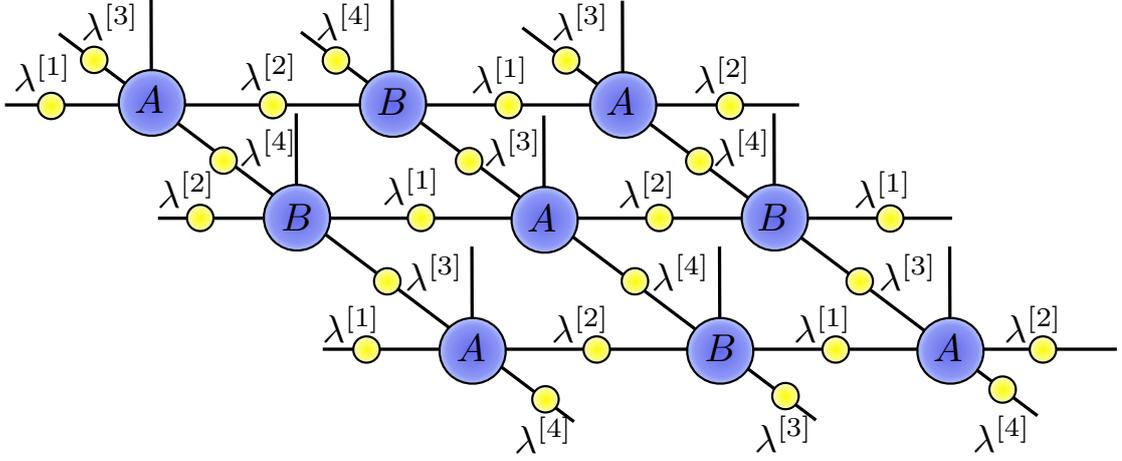


FIGURE II.32 – iPEPS utilisé pour l'algorithme *Simple Update* sur un réseau carré avec cellule élémentaire de deux sites. Il se compose de deux tenseurs de sites  $A$  et  $B$  et de matrices diagonales  $\lambda^{[n]}$ , où  $n \in [1, 4]$  correspond aux 4 liens différents du réseau.

$i_A = (s'_A, u_A, l_A, d_A)$  et  $i_B = (s'_B, u_B, r_B, d_B)$ . Nous appliquons ensuite une décomposition en valeurs singulières (SVD) de cette matrice (Fig.II.33(b)). La matrice se réécrit  $\Theta_{i_A, i_B} = \sum_{k=1}^{dD^3} U_{i_A, k} \Lambda_k V_{k, i_B}^\dagger$ ,  $U$  et  $V$  étant des matrices unitaires et  $\Lambda$  contient les valeurs singulières dans un ordre décroissant.

3. Lorsque nous effectuons une SVD, la dimension de lien entre les deux sites augmente  $D \rightarrow dD^3$ . Si nous gardons la SVD complète, la dimension de lien croît comme  $e^{e^N}$ . Il faut donc tronquer la dimension. La troncature que nous utilisons consiste à garder les  $D$  plus grandes valeurs singulières dans la nouvelle matrice  $\tilde{\lambda}^{[2]}$  et les matrices  $\tilde{U}$  et  $\tilde{V}$  correspondantes, de telle sorte que  $\Theta_{i_A, i_B} \simeq \sum_{k'=1}^D \tilde{U}_{i_A, k'} \tilde{\lambda}_{k'}^{[2]} \tilde{V}_{k', i_B}^\dagger$ . D'autres méthodes consistent à faire varier  $D$  et d'imposer une valeur de coupure pour les valeurs singulières. Cela garantit une meilleure approximation mais nécessite, dans la plupart des cas, de considérer des grandes valeurs de  $D$ . Il est également important de normaliser les valeurs singulières telles que  $\sum_k \tilde{\lambda}_k^2 = 1$ , puisque ceux-ci sont globalement multipliés par un facteur  $\alpha \neq 1$  à chaque itération.
4. La dernière étape consiste à restituer les matrices  $\lambda^{[1,3,4]}$  sur les bords en appliquant l'inverse de ces matrices sur les matrices  $\tilde{U}$  et  $\tilde{V}$  (Fig. II.33). Les nouveaux tenseurs après cette optimisation sont :

$$\tilde{A}_{l_A, r_A, u_A, d_A}^{s_A} = \tilde{U}_{(s_A, u_A, l_A, d_A), r_A} / (\lambda_{l_A}^{[1]} \lambda_{u_A}^{[3]} \lambda_{d_A}^{[4]}) \quad (\text{II.63})$$

$$\tilde{B}_{l_B, r_B, u_B, d_B}^{s_B} = \tilde{V}_{l_B, (s_B, u_B, r_B, d_B)}^\dagger / (\lambda_{r_B}^{[1]} \lambda_{d_B}^{[3]} \lambda_{u_B}^{[4]}) \quad (\text{II.64})$$

Cette optimisation doit ensuite s'effectuer sur les trois autres liens, en effectuant les substitutions adéquates. Une itération comprend quatre optimisations locales

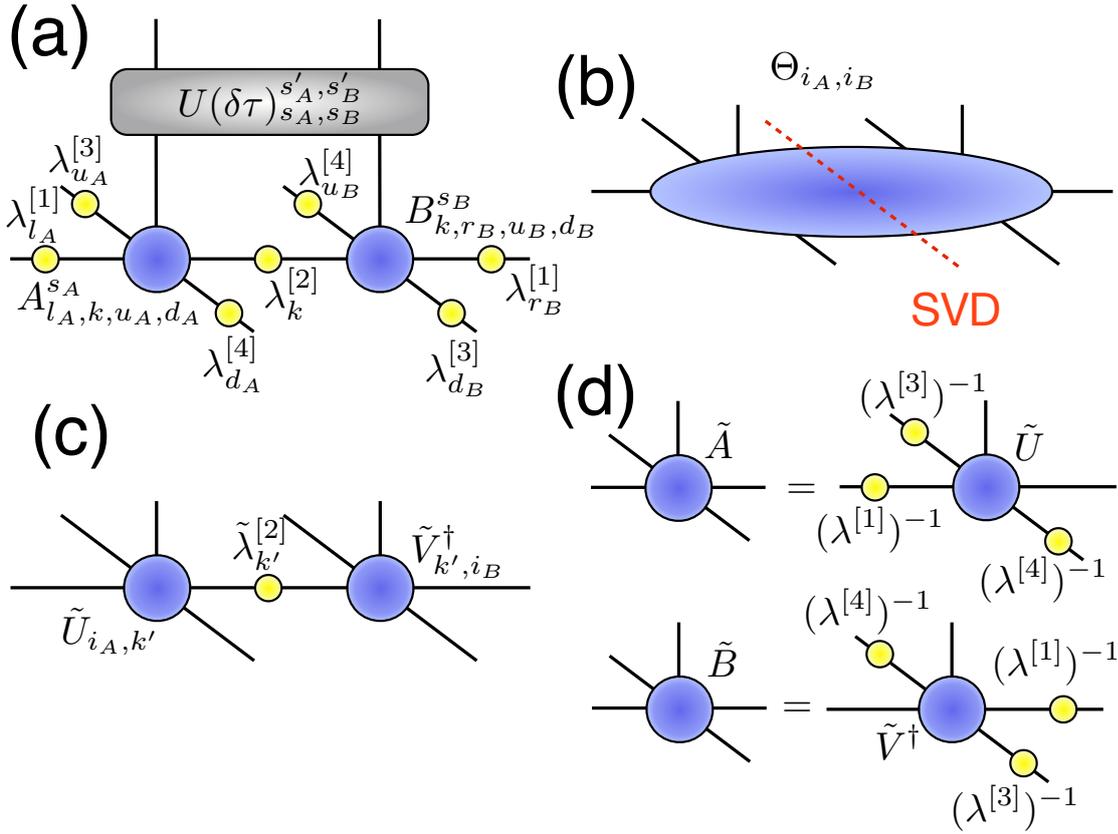


FIGURE II.33 – Diagrammes de l’algorithme *Simple Update* sur réseau carré. (a) Application de l’opérateur d’évolution  $\mathcal{U}(\delta\tau)$  sur les sites  $A$  et  $B$ . (b-c) Décomposition en valeurs singulières des deux sites. (d) Nouveaux tenseurs  $\tilde{A}$  et  $\tilde{B}$ .

sur les quatre liens. La convergence peut être testée en calculant tous les  $n$  pas l’énergie du système afin de voir si elle a convergé. Une autre méthode, que nous utilisons, est d’utiliser la normalisation des valeurs singulières à chaque pas, qui a donc un coût computationnel nul, et de la comparer à la normalisation précédente. Cela nous donne une indication de la convergence d’un état sur l’état lui-même. Le dernier point à aborder sur l’optimisation en temps imaginaire est la stratégie à utiliser pour la valeur de  $\delta\tau$ . Il peut en exister plusieurs mais la stratégie la plus couramment utilisée est de partir d’une valeur  $\delta\tau$  relativement grande puis, après chaque convergence, de réduire cette valeur jusqu’à une valeur fixée. Dans nos simulation, nous faisons successivement converger l’état pour des valeurs  $\delta\tau = 10^{-1}$ ,  $\delta\tau = 10^{-2}$ ,  $\delta\tau = 10^{-3}$ ,  $\delta\tau = 10^{-4}$  et  $\delta\tau = 10^{-5}$  et notre critère de convergence sur les valeurs singulières est de  $10^{-10}$ , c’est-à-dire lorsque la différence relative entre la normalisation d’une itération et la normalisation précédente est inférieur à  $10^{-10}$ .

ii) *Optimisation sur réseau de tenseurs simplexes : exemple sur réseau kagomé*

L’optimisation des tenseurs comprenant des tenseurs simplexes sur réseau kagomé dans le cadre du *Simple Update* est basé sur la décomposition en valeurs

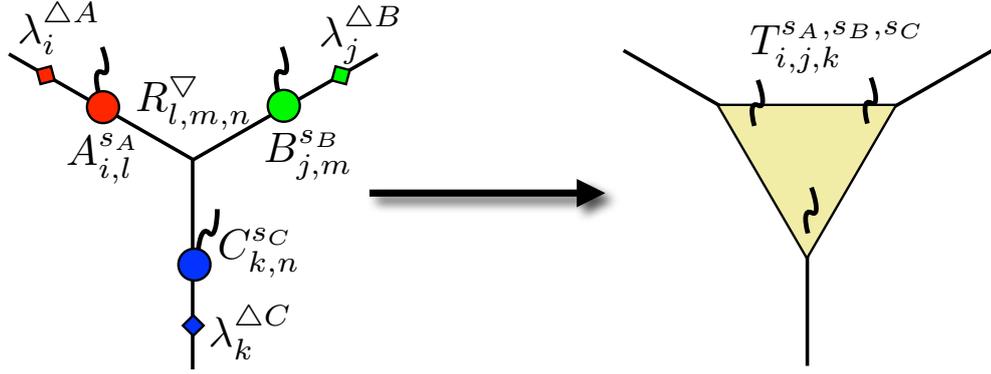


FIGURE II.34 – Contraction du tenseur  $T$ , incluant les matrices diagonales  $\lambda^{\Delta}$  sur le triangle *down*.

singulières de la contraction de plusieurs tenseurs, et ainsi sur les matrices  $\lambda$ , qui sont localisées sur les bords extérieurs des triangles. À une dimension et pour le cas PEPS vu précédemment, ces matrices  $\lambda$  contiennent les valeurs singulières de la décomposition de Schmidt de deux proches voisins, et les connectent donc l'un à l'autre. Dans le cas de tenseurs simplexes, elles sont simplement une approximation de type champ moyen du système environnant, tandis que le tenseur simplexe  $R^{\nabla(\Delta)}$ , qui connecte les trois sites à l'intérieur du triangle *down* (*up*), comprend les valeurs singulières d'un ordre supérieur.

Nous allons voir l'algorithme pour l'optimisation des tenseurs sur les triangles *down*, comme décrit dans l'article [110]. Tout d'abord, nous contractons le tenseur  $T$  suivant la figure II.34,

$$T_{i,j,k}^{S_A, S_B, S_C} = \sum_{l,m,n} A_{i,l}^{S_A} B_{j,m}^{S_B} C_{k,n}^{S_C} R_{l,m,n}^{\nabla} \lambda_i^{\Delta A} \lambda_j^{\Delta B} \lambda_k^{\Delta C} \quad (\text{II.65})$$

Ensuite nous appliquons l'opérateur d'évolution en temps imaginaire  $U = \exp(-\delta\tau H^{\nabla})$  sur  $T$  :

$$V_{i,j,k}^{\vec{S}} = \sum_{\vec{S}'} U_{\vec{S}, \vec{S}'} T_{i,j,k}^{\vec{S}'} \quad (\text{II.66})$$

où  $\vec{S}$  est un vecteur de composantes  $S_A$ ,  $S_B$  et  $S_C$ , et  $\delta\tau \ll 1$ . Nous devenons alors décomposer le tenseur  $V$  en nouveaux tenseurs  $A'$ ,  $B'$ ,  $C'$  et  $R'^{\nabla}$ . Cette étape est appelé *décomposition en valeurs singulières d'ordre supérieur*, ou *Higher-Order Singular Value Decomposition* (HOSVD). Donnons l'exemple pour le tenseur  $A'$ . Nous devons diagonaliser la matrice de dimension  $dD \times dD$   $W = U\Sigma U^\dagger$  :

$$W_{(S_A, i); (S'_A, i')} = \sum_{S_B, S_C, j, k} \left( V_{i', j, k}^{S'_A, S_B, S_C} \right)^* \cdot V_{i, j, k}^{S_A, S_B, S_C} \quad (\text{II.67})$$

Nous gardons les  $D$  plus grandes valeurs propres de la décomposition dans  $\tilde{\Sigma}^A$ , et  $\tilde{U}^A$  est la matrice correspondante, de dimension  $dD \times D$ . Les nouveaux tenseurs sont  $A'_{i,j}^{S} = \tilde{U}_{(S,i); j}^A / \lambda_i^{\Delta A}$  et  $\lambda^{\nabla A} = \sqrt{\tilde{\Sigma}^A}$  (ou  $\Sigma^A \in \mathbb{R}^+$  car  $W^\dagger = W$ ). Après le calcul

des trois nouveaux tenseurs de sites  $A'$ ,  $B'$  et  $C'$ , nous pouvons calculer le nouveau tenseur simplexe

$$R'_{i,j,k}{}^\nabla = \sum_{\{l,m,n\}} \sum_{\{S_A,S_B,S_C\}} T_{l,m,n}^{S_A,S_B,S_C} \left( \tilde{U}_{(S_A,l);i}^A \right)^* \left( \tilde{U}_{(S_B,m);j}^B \right)^* \left( \tilde{U}_{(S_C,n);k}^C \right)^* \quad (\text{II.68})$$

La renormalisation sur les triangles  $up$  est identique, en interchangeant  $\triangle \iff \nabla$ , et en prenant  $(A^{S_A})^T$ ,  $(B^{S_B})^T$  et  $(C^{S_C})^T$ .

L'inconvénient majeur du *Simple Update* dans sa première formulation est le fait qu'il ne prenne pas en compte les boucles dans le système. Cette méthode d'optimisation ne permet donc pas de capturer toute la physique du système, en particulier quand celui-ci présente des corrélations à longue portée. Toutefois, la formulation en tenseurs simplexes permet d'optimiser en même temps plusieurs sites pouvant se trouver sur une même boucle (sur un triangle du réseau kagomé dans notre cas), comblant ainsi en partie la lacune due au *Simple Update*. Nous pensons que de la majorité des cas que nous étudions, les fluctuations quantiques imposent une physique localisée en grande partie sur les triangles du réseau kagomé.

# Chapitre III

## Antiferro-aimants sur réseau kagomé sous champ magnétique : phases nématiques et super-nématiques

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Introduction</b> . . . . .	<b>74</b>
1.1	Motivations et définitions . . . . .	74
1.2	Principes d'optimisation . . . . .	75
1.3	Calcul des observables . . . . .	76
<b>2</b>	<b>Description des phases</b> . . . . .	<b>80</b>
2.1	Phases incompressibles sous champ : phases nématiques	80
2.2	Phases compressibles sous champ : phases super-nématiques	80
<b>3</b>	<b>Modèle AKLT : un modèle “jouet” pour les réseaux de tenseurs</b> . . . . .	<b>82</b>
3.1	Diagramme de phase . . . . .	82
3.2	Gap de spin AKLT et phase superfluide . . . . .	82
3.3	Phase nématique : plateau d'aimantation à $5/6$ . . . . .	84
<b>4</b>	<b>Un modèle réaliste : modèle de Heisenberg de spin 1</b> .	<b>86</b>
4.1	Diagramme de phase . . . . .	86
4.2	Phase solide simplexe . . . . .	88
4.3	Phase nématique à $1/3$ . . . . .	90
4.4	Phases super-nématiques . . . . .	91
<b>5</b>	<b>Conclusion</b> . . . . .	<b>91</b>

---

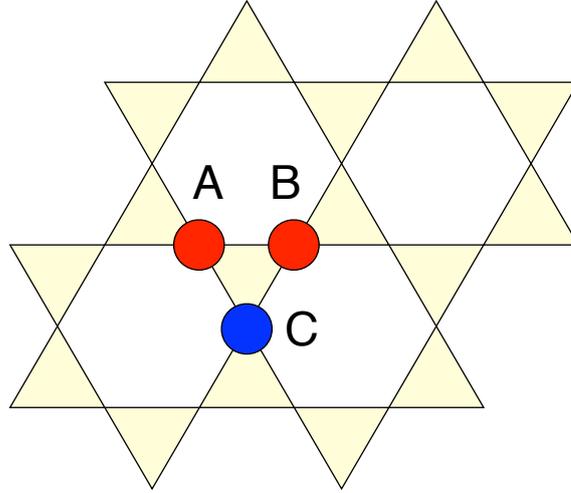


FIGURE III.1 – Cellule élémentaire de trois sites sur le réseau kagomé.

## 1 Introduction

### 1.1 Motivations et définitions

Le cas d'un réseau frustré auquel est appliqué un champ magnétique extérieur est un domaine de recherche très fertile puisque la caractérisation de tels systèmes reste un challenge au niveau théorique, tandis que les avancées dans le domaine des champs magnétiques intenses rendent possibles l'étude de ceux-ci. Nous allons voir dans ce chapitre l'étude de deux modèles de spins frustrés vus dans le chapitre II section 1.3, à savoir le modèle AKLT pour le spin 2 et le modèle de Heisenberg antiferromagnétique pour le spin 1, sur le réseau kagomé, auxquels nous appliquons un champ magnétique extérieur  $h$  via un couplage Zeeman [82].

$$\mathcal{H}_{\text{AKLT}} = \sum_{\langle i,j \rangle} P_{i,j}^A - h \sum_i S_i^z \quad (\text{III.1})$$

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - h \sum_i S_i^z \quad (\text{III.2})$$

Nous choisissons une cellule élémentaire minimale de trois sites  $A$ ,  $B$  et  $C$  (voir Fig. III.1), ce qui préserve la translation du réseau kagomé. Les couleurs choisies sur la figure (rouge pour les sites  $A$  et  $B$  et bleu pour le site  $C$ ) préfigurent les symétries des phases rencontrées, en particulier la préservation de la réflexion entre les sites  $A$  et  $B$ .

Afin de déterminer les propriétés des phases, nous analysons d'une part les aimantations locales  $\langle S_\alpha^\mu \rangle$  sur les trois sites de la cellule élémentaire  $\mu = A, B$  et  $C$ , parallèle ( $\alpha = z$ ) et perpendiculaire ( $\alpha = x, y$ ) au champ magnétique, et d'autre part la densité d'énergie de lien  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$  sur les six liens qui composent cette cellule. Par commodité, nous définissons l'aimantation *réduite* qui est l'aimantation locale normalisée par le valeur  $S$  du spin. Les valeurs moyennes calculées sont alors

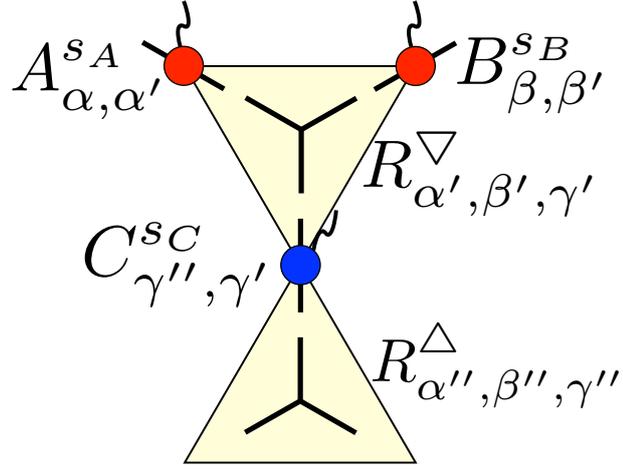


FIGURE III.2 – Représentation de la cellule élémentaire utilisée, composée de trois tenseurs de site  $A_{\alpha, \alpha'}^{sA}$ ,  $B_{\beta, \beta'}^{sB}$  et  $C_{\gamma'', \gamma'}^{sC}$  de dimension  $dD^2$  et de deux tenseurs simplexes  $R_{\alpha', \beta', \gamma'}^{\nabla}$  et  $R_{\alpha'', \beta'', \gamma''}^{\Delta}$  de dimension  $D^3$ .

$m_z^\mu = \langle S_z^\mu \rangle / S$  et  $m_\perp^\mu = \sqrt{\langle S_x^\mu \rangle^2 + \langle S_y^\mu \rangle^2} / S$ . L'aimantation totale du système est obtenue en additionnant les contributions algébriques de chaque spin local. Notons que l'aimantation totale transverse est toujours nulle,  $\sum_\mu \langle S_\alpha^\mu \rangle = 0$  pour  $\alpha = x$  et  $y$ , l'aimantation globale se ramenant à une seule composante selon l'axe  $z$ , définie par le champ magnétique extérieur, est s'écrit  $m_z = \sum_\mu \langle S_z^\mu \rangle / 3S$ .

## 1.2 Principes d'optimisation

Les deux sections suivantes présentant les détails techniques, le lecteur pourra dans un premier temps se rendre directement à la section 2.

Dans ce travail, nous avons étudié les diagrammes de phase de ces modèles sous champ magnétique en utilisant la méthode de calcul *Simple Update* présentée au chapitre II, section 2.5.2, dans le cas de représentations en réseau de tenseurs simplexes. Nous prendrons un ensemble de cinq tenseurs différents pour décrire la cellule élémentaire représentée figure III.2, à savoir  $R_{\alpha', \beta', \gamma'}^{\nabla}$ ,  $R_{\alpha'', \beta'', \gamma''}^{\Delta}$  et les trois tenseurs de sites  $A_{\alpha, \alpha'}^{sA}$ ,  $B_{\beta, \beta'}^{sB}$  et  $C_{\gamma'', \gamma'}^{sC}$ . Bien que cela autorise les brisures de symétrie du groupe ponctuel, ainsi que les brisures de symétrie de spin, cet *ansatz* préserve la symétrie de translation.

Afin d'éviter une évolution de type hystérésis, nous choisissons pour chaque point du diagramme un état de départ aléatoire. Nous verrons plus tard que cela nous permet de visiter tous les états de symétrie brisée.

## 1.3 Calcul des observables

### 1.3.1 Environnement simple : approximation de champ moyen

Comme précisé précédemment, nous avons utilisé l'algorithme *Simple Update*. Lors de ces calculs, nous décomposons les tenseurs en utilisant une *décomposition en valeurs singulières d'ordre supérieur*, qui généralise la décomposition en valeurs singulières, pour des matrices, à des tenseurs simplexes. Nous obtenons ainsi des pseudos valeurs singulières  $\lambda_i$ . Dans le cas à une dimension, nous utilisons les valeurs singulières obtenues pour simuler l'environnement. Dans sa forme canonique, les valeurs singulières d'un MPS décrivent exactement l'environnement infini d'un sous-système. Pour des dimensions plus grandes, la forme canonique n'existe pas, d'après la définition utilisée pour les MPS. Les  $\lambda_i$  ne sont alors plus qu'une approximation de champ moyen de l'environnement d'un sous-système. En effet, ceux-ci ne prennent pas en compte les boucles présentes dans un système à deux ou trois dimensions. Néanmoins, dans un premier temps, nous avons utilisé cette approximation pour calculer les valeurs moyennes afin de définir les propriétés des phases. La caractérisation des phases n'utilisant que les valeurs relatives des aimantations et des énergies, il n'est pas nécessaire dans ce cas de pousser plus loin les investigations de ces valeurs moyennes. Cependant, nous avons comparé, pour quelques phases choisies, les résultats dans le cas de l'approximation champ moyen et d'un calcul plus rigoureux, comprenant un calcul complet de l'environnement, qui nous a permis de conclure que nos calculs dans cette approximation sont déjà d'une grande précision.

### 1.3.2 Environnement complet

Lorsque nous calculons des valeurs moyennes approximées par la méthode précédente pour des réseaux de tenseurs pour une valeur de  $D$  fixée, celles-ci ne sont pas variationnelles. Il faut alors calculer un environnement, c'est-à-dire un ensemble de tenseurs qui, lorsque nous les contractons avec un sous-ensemble de tenseur décrivant le système, nous obtenons un nombre scalaire. Ces tenseurs d'environnement sont interconnectés via une dimension  $D_c$ , propre à l'environnement. Afin d'obtenir une grandeur variationnelle, nous devons prendre la grandeur extrapolée pour  $D_c \rightarrow \infty$ . Il existe plusieurs manières de calculer un environnement. Pour cette étude, nous utilisons une approximation type MPS, détaillé dans l'annexe C. Il s'agit de considérer les deux bords haut et bas comme des systèmes uni-dimensionnels. Nous utilisons les tenseurs de notre système comme des opérateurs d'évolution. La première étape consiste à faire "évoluer" ces bords à l'aide de nos "opérateurs", jusqu'à ce qu'il converge vers un point fixe. En pratique, la convergence est obtenue après un nombre d'itérations qui correspond à la distance nécessaire à notre sous-ensemble pour ne plus être sous l'influence des bords, comme cela peut être le cas sur un système fini. Nous avons ainsi une approximation de la limite thermodynamique dans une direction du système. L'extension du système dans la direction gauche-droite s'opère à la manière d'un MPS infini (voir Chap. II section 2.2.6), en calculant une matrice transfert, contraction des deux bords haut et bas et du sous-ensemble à l'étude, et en calculant les vecteurs

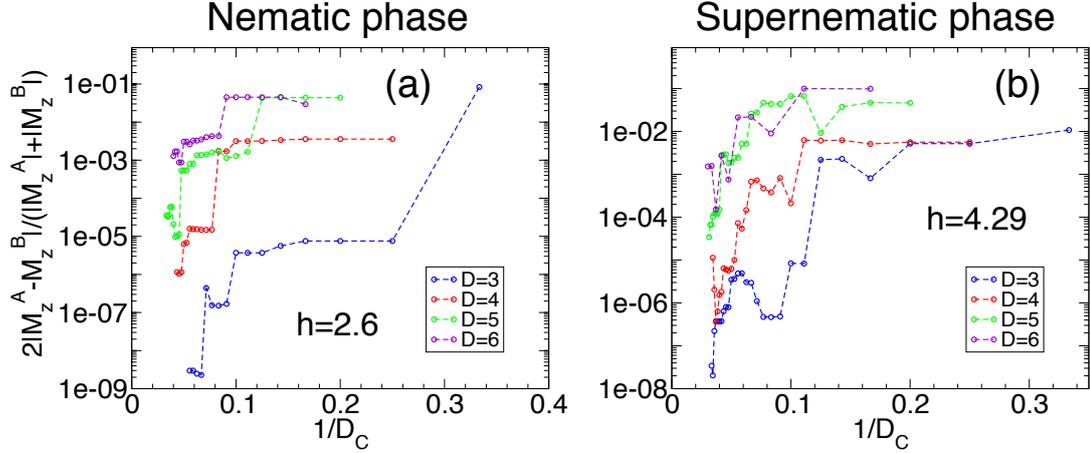


FIGURE III.3 – Différence relative d'aimantation des sites  $A$  et  $B$  :  $\Delta = 2 \frac{|m_z^A - m_z^B|}{|m_z^A| + |m_z^B|}$ . Cette différence est présentée en fonction de l'inverse de la dimension d'environnement  $1/D_c$  pour  $D = 3$ ,  $D = 4$ ,  $D = 5$  et  $D = 6$  et pour  $h = 2.6$  (a) et  $h = 4.29$  (b). Elle est une mesure de la réflexion entre les sites  $A$  et  $B$ .

gauche et droit de valeur propre la plus grande. De la même façon, il s'agit d'une simulation de bord renvoyé à l'infini.

Les figures III.3, III.4 et III.5 présentent le calcul d'observables en fonction de la dimension de l'environnement, dans le cas du modèle de Heisenberg de spin  $S = 1$ , pour des valeurs du champ magnétique  $h = 2.6$  et  $h = 4.29$ , correspondant à deux phases différentes.

La figure III.3 montre la différence d'aimantation relative  $\Delta = 2 \frac{|m_z^A - m_z^B|}{|m_z^A| + |m_z^B|}$  entre les sites  $A$  et  $B$ , pour les dimensions  $D = 3, 4, 5$  et  $6$ , en fonction de l'inverse de la dimension d'environnement  $D_c$ . Il s'agit d'une mesure de la réflexion entre ces deux sites, qui est totale dans le cas d'un environnement champ moyen ( $\Delta \simeq 10^{-14}$ ). Bien que l'extrapolation soit rendue difficile du fait du caractère non analytique des courbes, une tendance à la décroissance exponentielle se dégage et les valeurs tendent vers  $\Delta < 10^{-5}$ . De manière identique, nous présentons les énergies par site pour ces deux mêmes valeurs du champ magnétique sur les figures III.4 et III.5. Les énergies pour les plus grandes valeurs de  $D_c$  sont ensuite comparées aux valeurs de l'énergie dans le cas simple sur la figure III.6, exception faite des énergies pour  $D = 6$  qui ne semblent pas s'être stabilisées autour d'une valeur fixe. Ces deux comparatifs mettent en évidence l'efficacité de notre méthode de calcul, permettant ainsi une étude plus approfondie. En effet, le calcul systématique d'un environnement n'aurait rendu possible le calcul complet des diagrammes de phase avec des grandes valeurs de  $D$ .

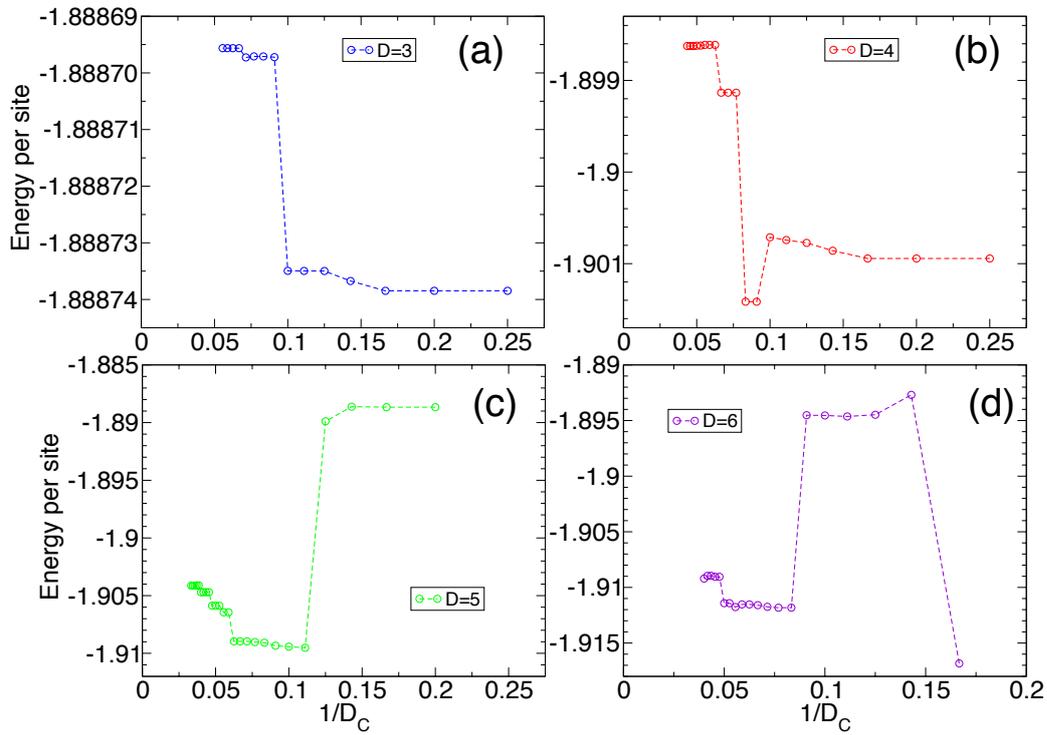


FIGURE III.4 – Énergies par site de la phase nématique ( $h = 2.6$ ) en fonction de l'inverse de la dimension d'environnement  $1/D_c$ . Les énergies pour  $D = 3$  (a),  $D = 4$  (b),  $D = 5$  (c) et  $D = 6$  (d) sont présentées.

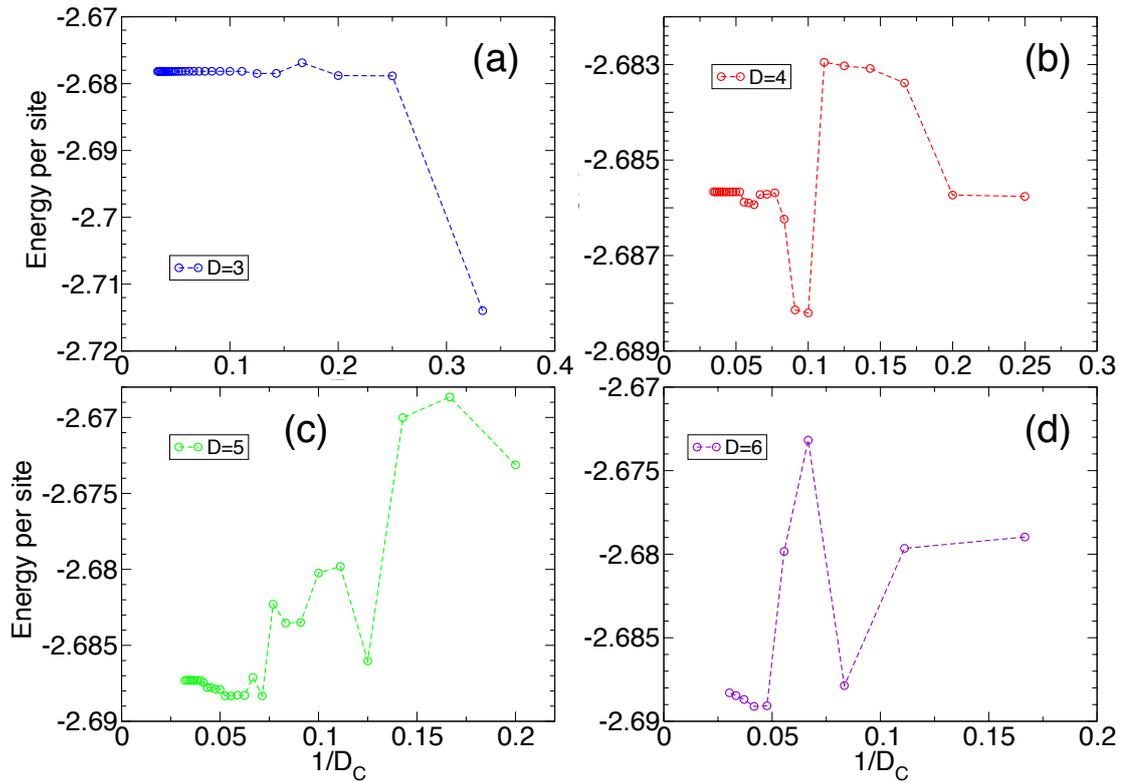


FIGURE III.5 – Énergies par site de la phase super-nématique ( $h = 4.29$ ) en fonction de l'inverse de la dimension d'environnement  $1/D_C$ . Les énergies pour  $D = 3$  (a),  $D = 4$  (b),  $D = 5$  (c) et  $D = 6$  (d) sont présentées.

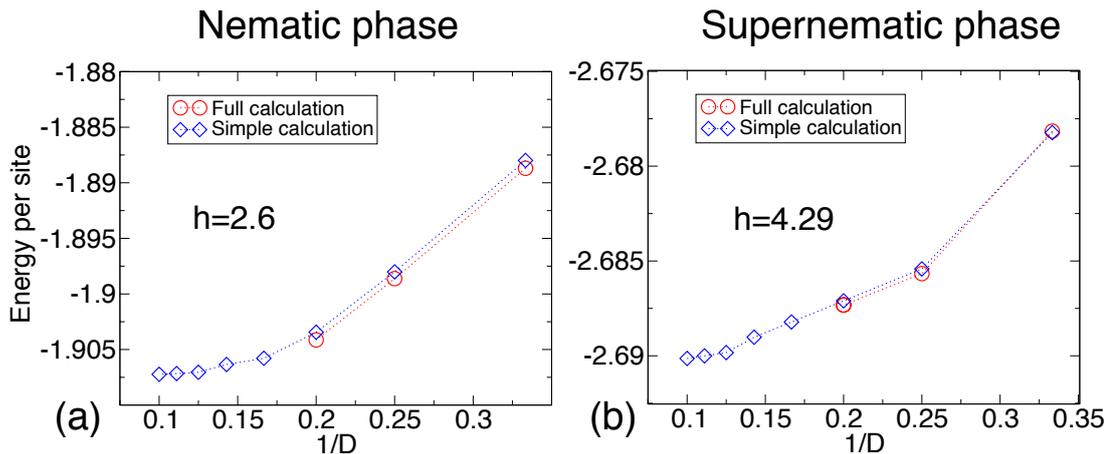


FIGURE III.6 – Comparatif des énergies calculées par la méthode type champ moyen (*simple calculation*) et en utilisant un environnement complet (*full calculation*), tirées des figures III.4 et III.5. Les deux types d'énergie sont comparées pour la phase nématique ( $h = 2.6$ ) (a) et pour la phase super-nématique ( $h = 4.29$ ) (b).

	Compressible	$U(1)$	$C_3$	$C_2$	$\mathcal{G}_T$
Liquide de Bose	✓	✓	✓	✓	✓
Solide à lien de valence (VBS)	✗	✓	✓	✓	✓
Solide simplexe (SiSo)	✗	✓	✓	✗	✓
Superfluide (SF)	✓	✗	✓	✓	✓
Solide (S)	✗	✓	-	-	✗
Nématique (N)	✗	✓	✗	✓	✓
Super-solide (SS)	✓	✗	-	-	✗
Super-nématique (SN)	✓	✗	✗	✓	✓

TABLE III.1 – Comparatif entre les différentes phases induites par le champ magnétique externe en terme de symétrie du groupe ponctuel (rotations  $C_3$  et  $C_2$ ), du groupe de translation ( $\mathcal{G}_T$ ) ou de spin ( $U(1)$ ) préservée (✓) ou brisée (✗). La compressibilité (✓) ou l’incompressibilité (✗) sont également indiquées.

## 2 Description des phases

### 2.1 Phases incompressibles sous champ : phases nématiques

Les différentes phases obtenues dans les diagrammes de phases sont récapitulées dans le tableau III.1. Nous les comparons à des phases non observées ici, telle que la phase liquide de Bose, et à des phases solide et super-solide, dont la description ne rentre pas dans le cadre de ce chapitre (voir Chap. IV). La particularité de l’état AKLT, qui possède une représentation exacte pour  $D = 3$ , montre son intérêt puisque l’ensemble du diagramme de phase converge très rapidement, la convergence étant atteinte pour  $D = 7$ . La brisure spontanée de symétrie de rotation de  $2\pi/3$ , également appelée symétrie  $C_3$ , est révélée par une différence dans l’aimantation longitudinale sur au moins l’un des sites, caractérisant la phase nématique (et super-nématique). Il est à noter que dans nos diagrammes, les phases brisant cette symétrie préserve par ailleurs une symétrie miroir sur les triangles. Ce fait se remarque par une aimantation locale différente sur un site, tandis que les deux autres sites portent la même aimantation. Par convention, nous choisirons  $m_z^A = m_z^B \neq m_z^C$  (Fig. III.7). En pratique, lors des simulations, le site inéquivalent change aléatoirement entre les trois sites, du fait des conditions initiales aléatoires. Cela nous garantit que notre algorithme ne privilégie aucun site et nous permet donc de “visiter” les trois états dégénérés du système.

### 2.2 Phases compressibles sous champ : phases super-nématiques

Un autre type de phase reliée à la phase nématique apparaît, manifestant la même brisure de symétrie  $C_3$ , et également des propriétés de superfluidité, c’est-à-dire la brisure de  $U(1)$ , identifiées par une aimantation transverse locale non nulle. Notons cependant que contrairement à la phase nématique, il existe deux types de phases super-nématiques, caractérisées par des aimantations transverses

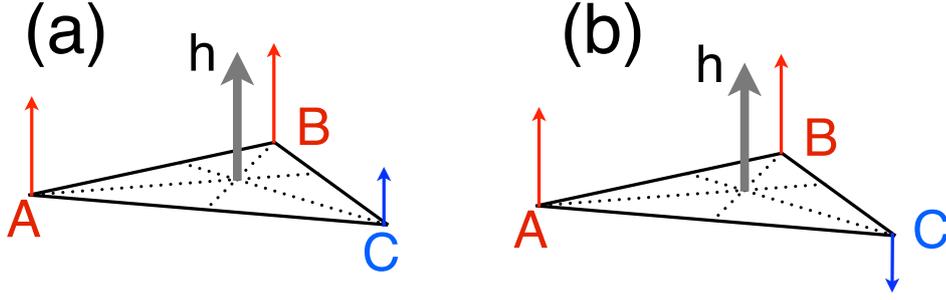


FIGURE III.7 – Représentation de l'aimantation des phases nématiques sur la cellule élémentaire. Les aimantations locales sont alignées avec le champ magnétique  $h$ . L'aimantation sur le site  $C$  est différente des aimantations des deux autres sites  $A$  et  $B$ , égales entre elles. L'aimantation sur  $C$  peut être dans le même sens que celles sur  $A$  et  $B$  (a) ou dans le sens opposé (b).

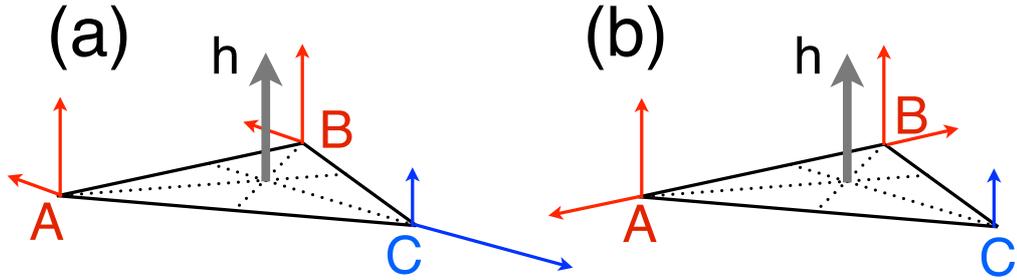


FIGURE III.8 – Représentation de l'aimantation des phases super-nématiques sur la cellule élémentaire. Les aimantations le long du champ magnétique  $h$  sont décrites de la même manière que pour les phases nématiques. En revanche, il existe deux phases super-nématiques distinctes par leur aimantation transverse :  $\langle S_C^{(x,y)} \rangle = -2\langle S_{A,B}^{(x,y)} \rangle$  (a) et  $\langle S_C^{(x,y)} \rangle = 0$  et  $\langle S_A^{(x,y)} \rangle = -\langle S_B^{(x,y)} \rangle$  (b)

différentes. Pour la première phase super-nématique, l'aimantation de  $C$  est non nulle et les aimantations en  $A$  et  $B$  sont égales, colinéaires et opposées à  $C$  :  $\langle S_C^{(x,y)} \rangle = -2\langle S_{A,B}^{(x,y)} \rangle$  (figure III.8 (a)). Pour la deuxième phase, l'aimantation transverse pour le site  $C$  est nulle. Afin de garantir une aimantation transverse totale nulle, les deux autres aimantations sont alors égales et de sens opposés :  $\langle S_A^{(x,y)} \rangle = -\langle S_B^{(x,y)} \rangle$  (figure III.8 (b)). L'identification de cette transition est permise grâce à un saut dans les aimantations locales le long du champ magnétique. Les aimantations  $m_z^{A,B}$ , négatives dans un premier temps, tendent vers 0 puis sautent à la transition à une valeurs  $m_z^{A,B} \simeq 0.48$ , tandis que l'aimantation  $m_z^C$  saute d'une valeur positive à une valeur négative, avec un saut  $\Delta m_z^C \simeq 0.96$ .

Une nouvelle fois, la direction pour les aimantations transverses est parfaitement aléatoire dans nos calculs puisqu'il s'agit d'une brisure de symétrie continue.

## 3 Modèle AKLT : un modèle “jouet” pour les réseaux de tenseurs

### 3.1 Diagramme de phase

Intéressons nous maintenant au diagramme de phase du modèle AKLT de spin  $S = 2$  sur réseau kagomé (voir figure III.9) Le diagramme possède un plateau d’aimantation à  $m_z = 0$ , phase également appelé Valence Bond Solid (VBS), et pour laquelle aucune symétrie, de spin ou d’espace, n’est brisée. Notons que bien que la perturbation (le couplage avec le champ magnétique externe) apportée au système ait une symétrie  $U(1)$ , grâce au gap dans le spectre du modèle AKLT, l’état possède toujours la symétrie  $SU(2)$  du modèle sans champ, ce qui signifie que la phase est plus symétrique que le modèle lui même. Pour une intensité de champ plus grande, le système présente une phase incompressible, que l’on appelle plateau d’aimantation nématique, pour une aimantation  $m_z = 5/6$ . Une phase superfluide connecte la phase VBS à cette phase nématique. Enfin, avant d’atteindre la saturation, qui se caractérise par la polarisation totale de chaque spin le long du champ, et intervenant pour  $h_{\text{sat}} = 3$ , le diagramme présente deux phases super-nématiques, dont la première est issue du plateau d’aimantation à  $5/6$ , et brisant la symétrie  $U(1)$ .

### 3.2 Gap de spin AKLT et phase superfluide

Comme présenté dans la référence [29], nous savons que le modèle AKLT, pour la chaîne de spin 1 et les réseaux hexagonal de spin  $3/2$  et carré de spin 2, possède un gap de spin qui correspond à l’énergie minimum nécessaire à l’excitation d’un singulet de spins virtuels  $\frac{1}{2}$  en un triplet (voir Chapitre II, section 1.4). La question reste toutefois ouverte pour le réseau kagomé. En appliquant un champ magnétique, nous observons un plateau d’aimantation nulle, dont la largeur, c’est à dire le champ magnétique critique  $h_{c1}$  à la transition de phase, est relié au gap de spin via le moment cinétique de cet état excité  $m_z$ , tel que  $\Delta_S = m_z h_{c1}$ . Nous avons vu que le continuum d’état excité correspond à une densité d’excitations triplets, ou triplons, la densité minimal étant le cas à un triplon  $m_z = 1$ . En utilisant l’optimisation *Simple Update*, nous obtenons  $\Delta_S \simeq 0.245$ . À la valeur de champ critique  $h_{c1} \simeq 0.245$ , la symétrie  $U(1)$  est brisée et conduit le système dans une phase superfluide. Celle-ci possède une aimantation transverse portée par chaque site, de norme égale. L’angle relatif de chaque aimantation entre elles est  $120^\circ$ . En revanche, une nouvelle fois, l’angle absolu des aimantations est aléatoire. Nous analysons la transition VBS  $\rightarrow$  superfluide sur la figure III.11. La figure montre le carré de l’aimantation transverse locale en fonction de l’aimantation longitudinale. Dans l’approche semi-classique appliqué aux spins  $1/2$ , l’aimantation transverse est la quantité de condensat de triplons. Elle reste néanmoins une bonne indication de cette quantité pour des spins plus grands. Dans notre cas, nous voyons que  $m_\perp \propto \sqrt{m_z}$ , qui est caractéristique d’un condensat de Bose-Einstein des excitations. Ces excitations, pour des petites valeurs d’aimantation longitudinale, sont les triplets

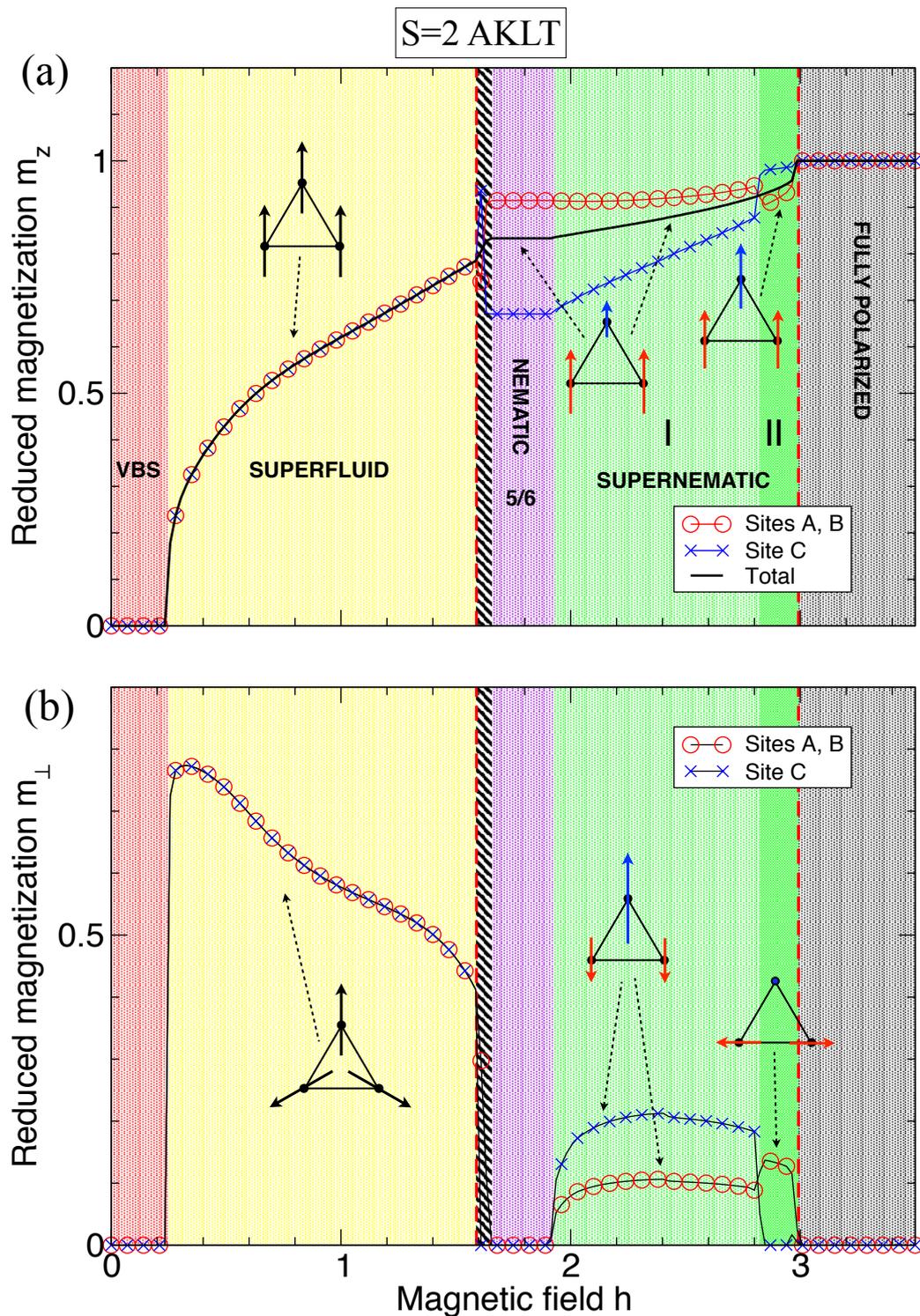


FIGURE III.9 – Diagramme de phase du modèle AKLT sur réseau kagomé en fonction du champ magnétique obtenu en analysant les aimantations longitudinales et transverse. Les aimantations réduites le long du champ (a) et parallèles au champ (b) sont présentées. L’aimantation totale (réduite) est représentée sur la figure (a) par une ligne noire continue. Des dessins schématiques de l’aimantation (le long et parallèle au champ) sont fournis pour chaque phase. Les plateaux d’aimantation à  $m_z = 0$  et  $5/6$  sont caractérisés par  $m_{\perp} = 0$ , contrairement aux phases superfluide et super-nématiques.

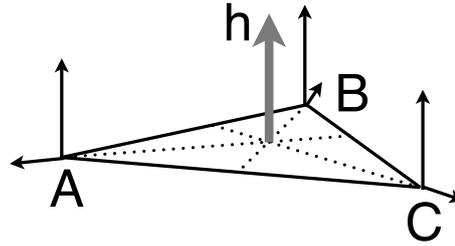


FIGURE III.10 – Phase superfluide. Les aimantations, longitudinales et transverses, ont la même amplitude. Les aimantations longitudinales pointent dans le même sens tandis que les aimantations transverses forment un angle de  $120^\circ$  les unes avec les autres.

remplaçant les singulets de l'état AKLT, formant ainsi un superfluide corrélé.

### 3.3 Phase nématique : plateau d'aimantation à $5/6$

Rappelons que le système ne brise pas la symétrie de translation. De plus, et nous allons voir pourquoi, cette phase présente l'intérêt de ne pas avoir de représentation semi-classique, comme cela a souvent été révélé, mais bien une représentation purement quantique, dans l'esprit de la représentation de l'état AKLT. Pour décrire l'état (Fig. III.12), nous reprenons la représentation des spins physiques  $S = 2$  en spins virtuels  $S = \frac{1}{2}$ , au nombre de 12 par cellule élémentaire. En partant de l'état AKLT où tous sont liés en singulet de spins avec son plus proche voisin, supposons que l'aimantation  $m_z$  soit simplement la proportion de triplons dans la cellule. Pour une aimantation à  $5/6$ , il y a alors cinq triplons et un singulet. Cependant, il faut prendre en compte le système, bien que brisant  $C_3$ , préserve la symétrie  $C_2$  ainsi que la symétrie miroir passant par les deux triangles. Cela nous mène à la conclusion que le singulet restant est résonant autour du site  $C$  dans la cellule élémentaire, mais confiné dans celle-ci. Ce plateau est suivi d'une transition vers une phase super-nématique où toutes les aimantations transverses sont non nulles (Fig. III.8(a)). Cette phase étant compressible, l'aimantation totale augmente avec le champ magnétique  $h$  jusqu'à la saturation à  $h_{\text{sat}} = 3$ . Juste avant la saturation, une transition du premier ordre vers l'autre type de phase super-nématique (Fig III.8 (b)) se produit. Cette transition peut être la trace d'une phase brisant la symétrie de translation, non visible dans notre cas.

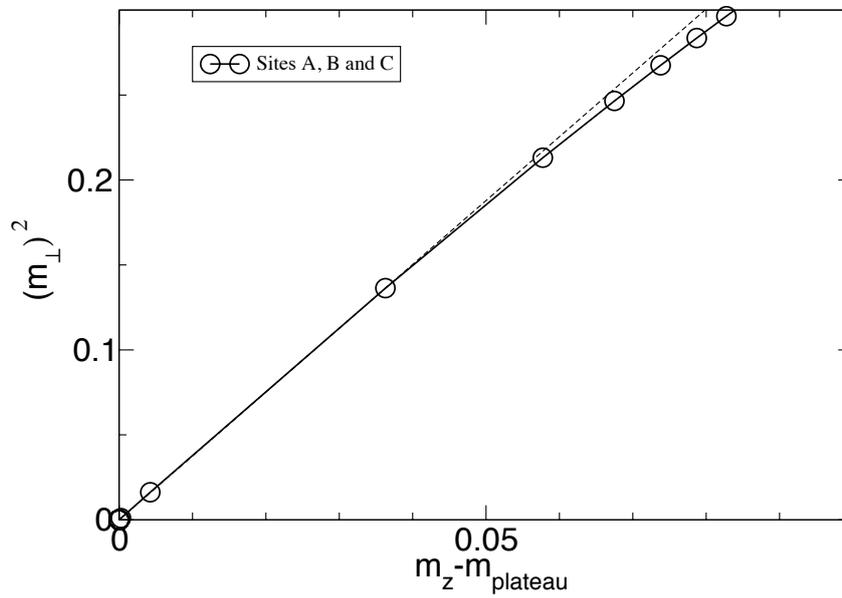


FIGURE III.11 – Aimantation transverse au carré en fonction de l’aimantation longitudinale à la transition VBS  $\rightarrow$  superfluide du modèle AKLT. Le comportement  $m_{\perp}^2 \propto m_z$  est caractéristique d’un condensat de Bose-Einstein des excitations.

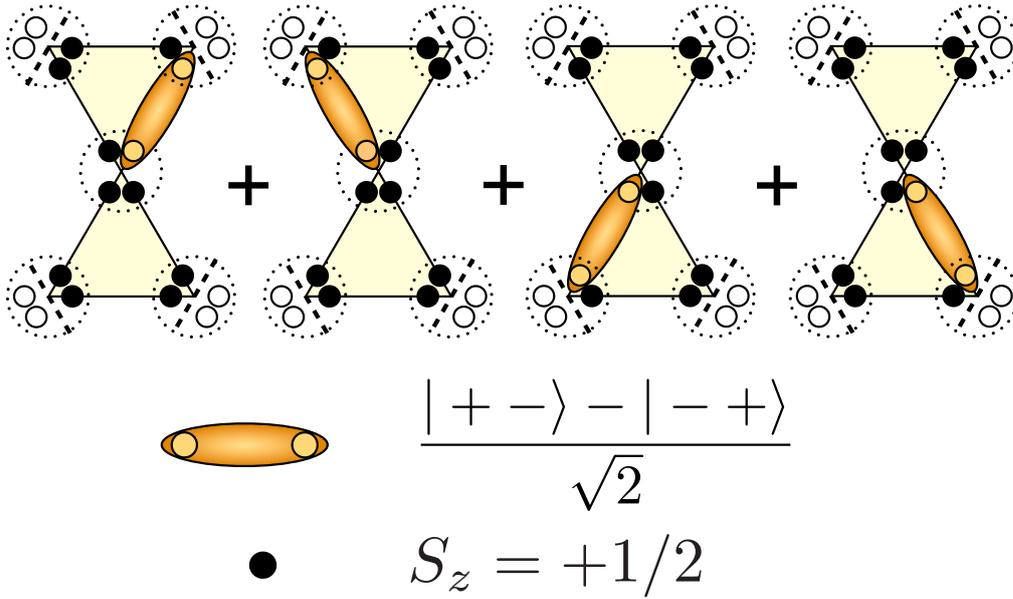


FIGURE III.12 – Image schématique de la phase nématique dans le modèle AKLT à  $\langle m_z \rangle = \frac{5}{6}$ . Les petits cercles remplis (vides) représentent les spins  $1/2$  virtuels à l’intérieur (à l’extérieur) de la cellule élémentaire. Les cercles noirs correspondent à des spins polarisé  $S_z = +1/2$  et le lien orange représente un singulet. Les grands cercles pointillés représentent la projection des quatres spins virtuels sur le spin  $2$ .

## 4 Un modèle réaliste : modèle de Heisenberg de spin 1

### 4.1 Diagramme de phase

Nous nous intéressons maintenant à la description du diagramme de phase du modèle de Heisenberg sur réseau kagomé, pour un système de spin  $S = 1$ , avec interactions antiferromagnétiques aux plus proches voisins (voir figure III.13). À l’instar du modèle AKLT, nous trouvons un plateau d’aimantation pour  $m_z = 0$ , caractéristique d’un gap de spin. Cependant, cette phase, nommé *Simplex Solid*, présente une brisure de symétrie  $C_2$ , c’est-à-dire brise la symétrie entre les triangles *up* et *down*. À la transition  $h_{c1}$ , qu’il reste à identifier, cette symétrie brisée est remplacé par une brisure de  $C_3$ , ainsi qu’une brisure de la symétrie  $U(1)$ . Nous avons alors, comme présenté dans le tableau IV.1, une phase super-nématique, puis une seconde phase super-nématique. À l’aimantation  $m_z = 1/3$ , nous avons une phase incompressible, appelé nématique, brisant  $C_3$ , et restaurant  $U(1)$ . Cette phase est ensuite suivie d’une succession de deux phases super-nématiques menant à la saturation pour  $h_{\text{sat}} = 6$ . Le diagramme présenté a été calculé en utilisant une dimension de lien  $D = 10$ . La phase simplexe solide a nécessité une dimension de lien  $D = 15$ .

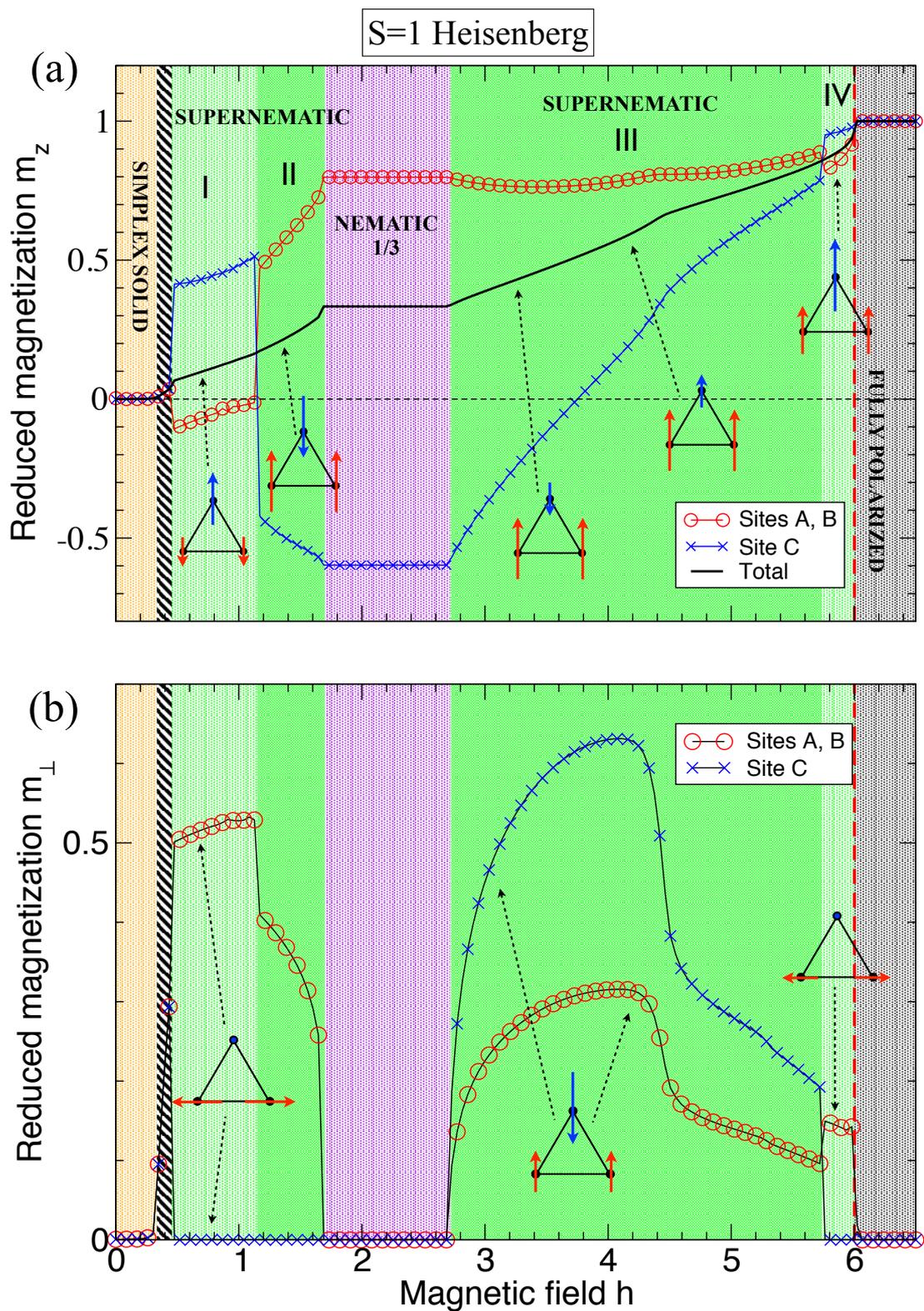


FIGURE III.13 – Même description que pour la figure III.9 mais pour le modèle de Heisenberg sur réseau kagomé de spin 1. Des plateaux d'aimantation apparaissent à  $m_z = 0$  et  $1/3$ , correspondant aux phases solide simplexe et nématique, respectivement. Quatre types de phases super-nématiques incompressibles (avec ordre superfluide) existent au voisinage de la phase nématique parent.

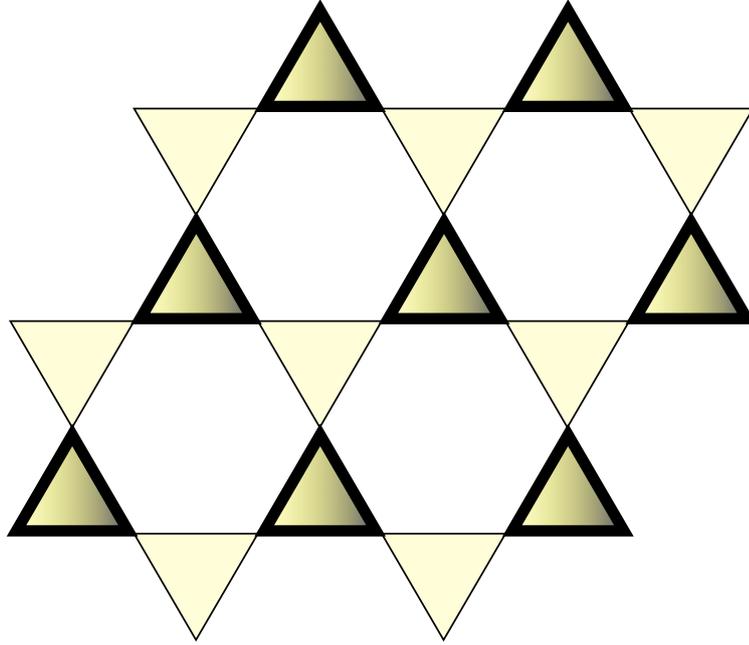


FIGURE III.14 – Phase *solide simplexe*. La largeur de liens donnent une représentation schématique (les proportions ne sont pas gardées) des énergies par lien. Cette phase est invariante par symétrie  $SU(2)$  ainsi que par rotation  $C_3$  des triangles. La différence relative d'énergie  $\delta = 2 \left| \frac{E_{\Delta} - E_{\nabla}}{E_{\Delta} + E_{\nabla}} \right| \simeq 21\%$  brise la symétrie d'inversion entre les deux types de triangle.

## 4.2 Phase solide simplexe

Nous avons identifié un gap de spin pour l'antiferro-aimant de spin  $S = 1$  sur réseau kagomé. En accord avec deux articles [57] [12] concomitants à notre première publication, cette phase brise la symétrie d'inversion  $C_2$ , ce qui est caractéristique d'un *Simplex Solid* (Fig.III.14). Bien que cette phase fut plus tard délaissée en faveur d'une phase *Hexagonal Singlet Solid* (HSS) [68], elle fut à nouveau confirmée [55] comme ayant une énergie plus basse que la phase HSS, et par conséquent, l'état fondamental du modèle présenté ici, sans champ. En analysant des aimantations locales, nous voyons que cette phase préserve la symétrie  $SU(2)$  (voir figure III.13). Cependant, l'analyse de la densité d'énergie par lien met à jour une brisure de la densité d'énergie puisque la différence relative entre l'énergie des triangles *up* et celle des triangles *down* est non nulle (figure III.15 a). L'expression de cette différence est  $\delta = 2 \left| \frac{E_{\Delta} - E_{\nabla}}{E_{\Delta} + E_{\nabla}} \right|$  (figure III.15 b). Elle s'annule à la transition vers la phase super-nématique 1. La phase grisée entre la phase simplexe solide et la phase super-nématique correspond à une phase où  $m_z \neq 0$  mais brise toujours la symétrie  $C_2$ ,  $\delta \neq 0$ . Il pourrait s'agir d'une phase où ces deux propriétés coexistent, mais la dimension de lien  $D = 15$  n'a pas permis de converger dans ce cas, l'aimantation semblerait tendre vers 0.

Un fait intéressant est apparu dans nos simulations. Nos calculs ayant débuté pour  $D = 3$ , aucune trace de la phase simplexe n'apparaissait, l'aimantation aug-

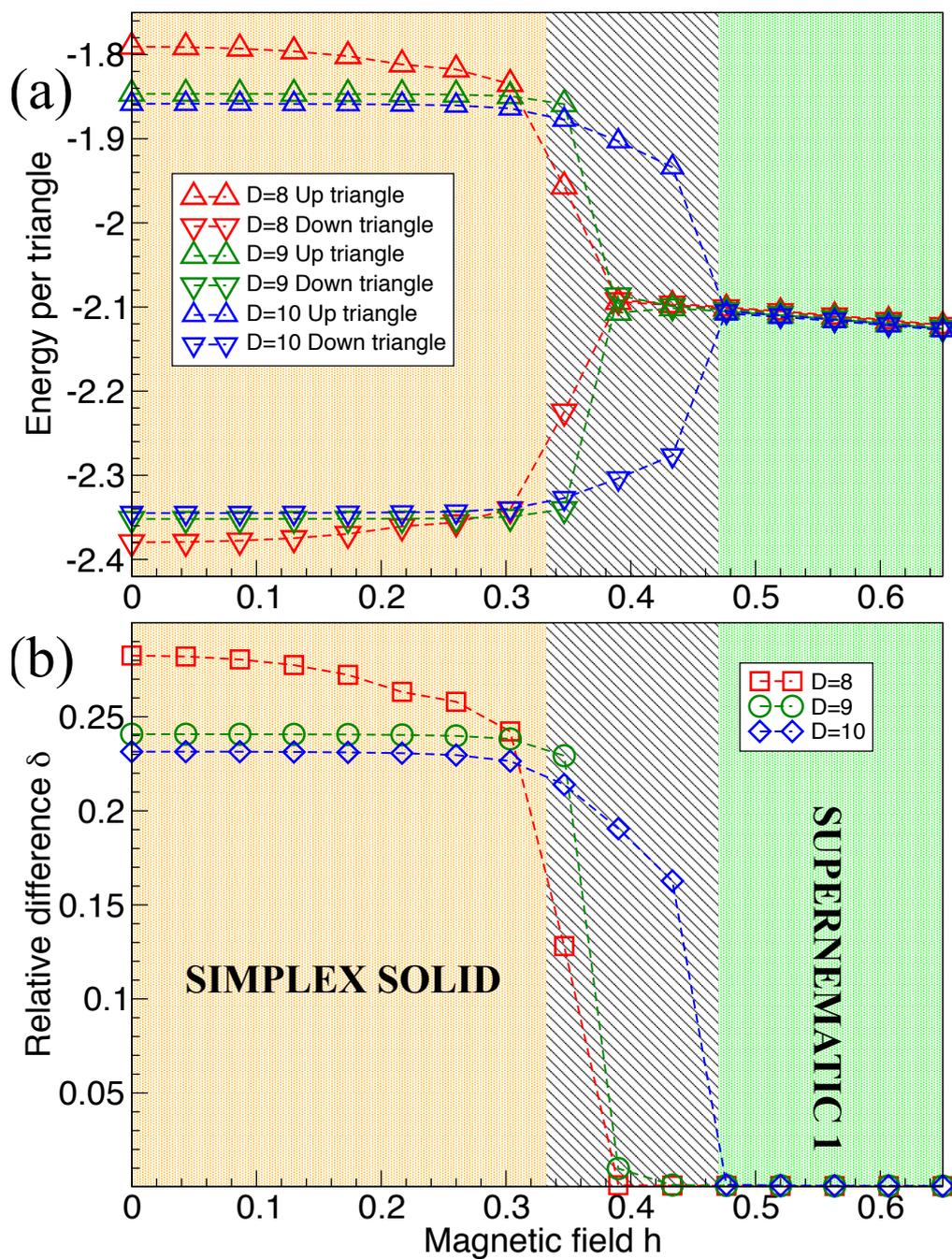


FIGURE III.15 – Différence d'énergie entre les deux types de triangles dans la phase solide simplexe. L'énergie par triangle est présentée (a) ainsi que leur différence relative  $\delta = 2 \left| \frac{E_{\Delta} - E_{\nabla}}{E_{\Delta} + E_{\nabla}} \right|$  (b).

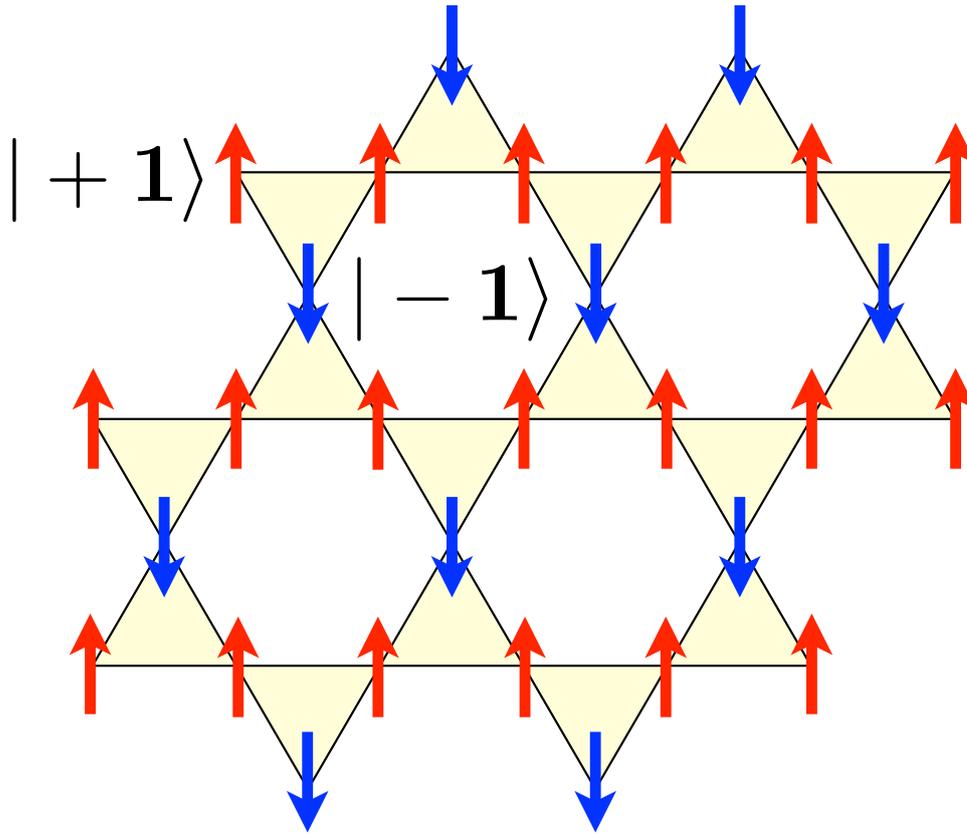


FIGURE III.16 – Description semi-classique de la phase nématique du modèle de Heisenberg de spin 1 à  $m_z = 1/3$ . Cette phase brise  $C_3$  mais préserve la symétrie de translation.

mentant alors linéairement avec le champ magnétique. Ce n'est que lorsque  $D \geq 8$  que la brisure de symétrie  $C_2$  apparaît.

### 4.3 Phase nématique à $1/3$

D'après notre hypothèse de départ, le système ne brise pas la symétrie de translation. La phase solide étant exclue, une phase incompressible apparaît entre les valeurs de champ  $h_{c_2} = 1.686$  et  $h_{c_3} = 2.695$ . Elle brise la symétrie  $C_3$  tout en préservant une des trois réflexions du groupe ponctuel. En analysant les paramètres locaux, il apparaît clair qu'il s'agit d'une phase semi-classique, présenté sur la figure III.16. Le système est alors constitué d'une chaîne de spins ferromagnétiques dans une direction, et de chaînes de Néel dans les deux autres directions. Cet état est trois fois dégénérés, ce qui est validé par les simulations numériques qui convergent vers les trois états, pour des conditions initiales aléatoires différentes. Une étude plus approfondie de ce plateau, pour des valeurs de spin  $S = 1/2$ ,  $S = 1$ ,  $S = 3/2$  et  $S = 2$  est présentée dans le chapitre suivant.

#### 4.4 Phases super-nématiques

Comme pour le modèle AKLT, le modèle de Heisenberg de spin 1 présente une succession de phases incompressibles brisant la symétrie de rotation  $C_3$  sur les triangles, autrement appelées phases super-nématiques. En revanche, ils existent quatre phases distinctes, deux de part et d'autre du plateau d'aimantation à  $1/3$ . Entre ce plateau et la saturation, les deux phases se suivent de la même façon que pour le modèle AKLT, correspondant aux deux types de phases super-nématiques (différenciées par l'ordre d'aimantation transverse). En revanche, les deux phases avant le plateau d'aimantation présentent les mêmes caractéristiques ( $\langle S_C^{x,y} \rangle = 0$  et  $\langle S_A^{x,y} \rangle = -\langle S_B^{x,y} \rangle$ ). La transition de phase du premier ordre est visible grâce à un saut dans les aimantations locales. En particulier, pour la phase super-nématique 1,  $m_z^A = m_z^B < 0$  et s'annule à la transition  $m_z^A = m_z^B = 0$  pour finalement "sauter" à une valeur finie positive, de l'ordre de  $1/2$ , dans la phase super-nématique 2.

## 5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les très riches diagrammes de phase sous champ magnétique de deux antiferro-aimants quantiques sur réseau kagomé décrits par les modèles AKLT ( $S = 2$ ) et de Heisenberg ( $S = 1$ ). Outre les phases connues, telles que les phases superfluide, solide de liens de valence ou entièrement polarisé, nous avons établi l'existence de nouvelles phases remarquables induites par champ, à savoir les phases *nématiques* qui brisent la rotation  $2\pi/3$  et préservent toutes les autres symétries, et les phases *super-nématiques* qui brisent, en plus, la symétrie de spin  $U(1)$ . Les phases nématiques sont incompressibles et, par conséquent, donnent lieu à des plateaux d'aimantation à  $m_z = 5/6$  et  $m_z = 1/3$  pour  $S = 2$  et  $S = 1$ , respectivement. Nous constatons également que l'état fondamental de l'antiferro-aimant  $S = 1$  en champ nul (en utilisant un *ansatz* invariant par translation) possède un gap de spin et est trimérisé (brisure de symétrie de la rotation  $\pi/2$ ), une nouvelle forme d'état incompressible nommé *solide simplexe*.



# Chapitre IV

## Antiferro-aimants sur réseau kagomé sous champ magnétique : rôle du spin $S$ et superstructure $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Diagrammes des phases . . . . .</b>	<b>94</b>
1.1	Description générale de phases . . . . .	94
1.2	Diagrammes de phases . . . . .	100
<b>2</b>	<b>Plateau d'aimantation à 1/3 . . . . .</b>	<b>105</b>
2.1	Description . . . . .	105
2.2	Interprétation semi-classique . . . . .	105
<b>3</b>	<b>Phase à 1 magnon exact et saut à la saturation . . . .</b>	<b>106</b>
<b>4</b>	<b>Plateaux d'aimantation spécifiques . . . . .</b>	<b>109</b>
4.1	Gap de spin . . . . .	109
4.2	Phase à "2 magnons" . . . . .	110
4.3	Phase à 1/9 pour le spin $S = 1/2$ . . . . .	110
<b>5</b>	<b>Conclusion . . . . .</b>	<b>111</b>

---

Ce travail [83] fait suite directement au chapitre précédent puisqu'ici nous généralisons (i) à une cellule élémentaire de 9 sites, permettant ainsi une brisure spontanée de la symétrie de translation vers une phase  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  et (ii) à des spins  $S$  allant de  $S = 1/2$  à  $S = 2$ . Nous pouvons alors identifier des phases d'aimantation sur le réseau kagomé communs à tous les spins, permettant ainsi de s'approcher de la limite classique, ainsi que des phases spécifiques pour certains spins, induits par leur aspect quantique.

## 1 Diagrammes des phases

Nous allons voir que l'optimisation de tenseurs suivant l'algorithme *Simple Update* est stable dans le cas de phases à haute intensité du champ magnétique, et d'autant plus pour les spins plus élevés. Cependant, l'analyse des systèmes dans le cas de champ magnétique très faible n'est pas toujours accessible à ce type de calculs et nécessitent une investigation plus approfondie à l'aide de méthodes *Full Update*, ou pour des valeurs de dimension  $D$  bien plus grandes, inaccessibles numériquement, du fait du temps de calcul nécessaire, ou encore de la taille mémoire restreinte. Malgré ces contraintes, nous sommes capables d'identifier des phases importantes dans les diagrammes.

Les systèmes mis à l'étude sont des réseaux kagomé de spins  $S$  avec interactions de Heisenberg anti-ferromagnétiques sous champ magnétique  $h$

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + h \sum_i S_i^z \quad (\text{IV.1})$$

La valeur du champ critique à la saturation est  $h_{sat} = 6S$ . Nous avons utilisé un algorithme *Simple Update* pour effectuer nos calculs et une cellule élémentaire de neuf sites (Fig. IV.1), composée de 9 tenseurs de sites de dimension  $dD^2$  et 6 tenseurs simplexes de dimension  $D^3$ .

### 1.1 Description générale de phases

Nous avons révélé un grand nombre de phases que nous pouvons classifier à l'aide des symétries de translation, du groupe ponctuel  $C_{6v}$  et de spin, brisées ou préservées. Nous allons tout d'abord identifier deux sous-groupes de phases, l'un préservant la symétrie de translation (Fig. IV.2(a)), l'autre brisant cette symétrie (Fig. IV.2(b)). Cette brisure de symétrie mène notre système dans une phase pour laquelle la cellule élémentaire comporte neuf sites, également appelé phase  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , car la translation acquiert un facteur  $\sqrt{3}$ . Pour ces deux phases, il est ensuite possible de briser les symétries du groupe ponctuel, en particulier la symétrie de rotation d'ordre 6, également appelée  $C_6$ , dont l'axe de symétrie est situé au centre de la cellule élémentaire, ainsi que les réflexions appelées  $\sigma_u$  et  $\sigma_v$ . Nous voyons sur la figure IV.2 les deux plans de symétrie en jaune et en vert, l'axe de symétrie se situant à l'intersection de ceux-ci.

Afin d'illustrer les différentes phases rencontrées lors de cette étude, la figure IV.3 présente les configurations de spin et de densité d'énergie pour les phases

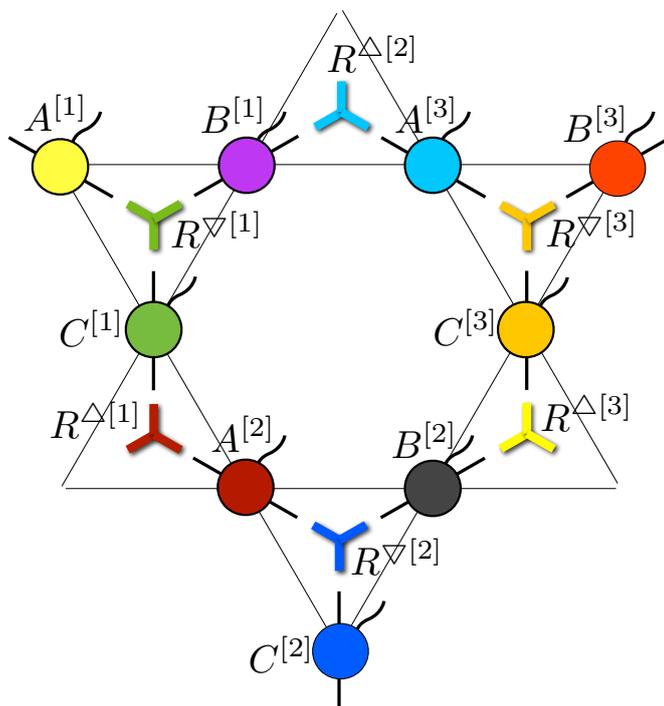


FIGURE IV.1 – Réseau de tenseurs à 9 sites, comprenant 9 tenseurs de sites de dimensions  $dD^2$  et 6 tenseurs simples, situés sur les triangles, de dimension  $D^3$ .

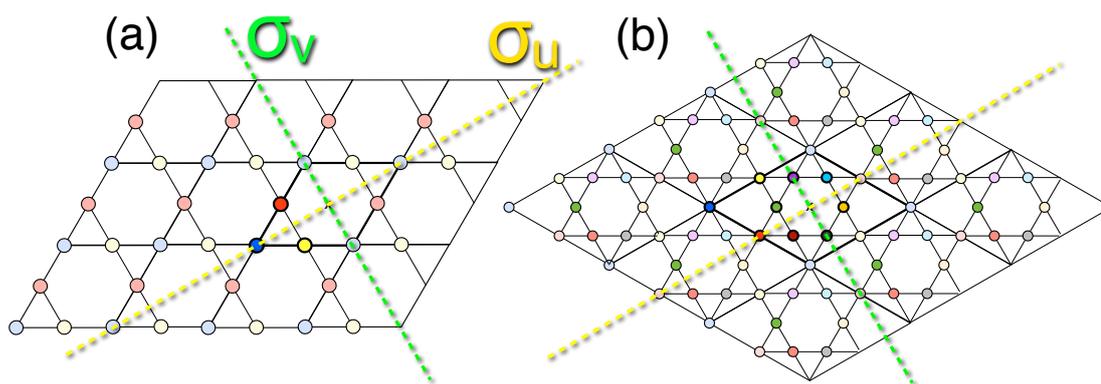


FIGURE IV.2 – Cellule élémentaire de 3 sites (a) et de 9 sites (b). Les symétries de réflexion  $\sigma_v$  et  $\sigma_u$  sont représentées en vert et en jaune, respectivement. L'axe de symétrie principal  $C_6$ , rotation de  $2\pi/6$ , se situe à l'intersection des deux plans de réflexion.

	$U(1)$	$\mathcal{G}_T$	$C_6$	$\sigma_u$	$\sigma_v$	$d$
Liquide de spin (SL)	✓	✓	✓	✓	✓	1
Solide simplexe (SiSo)	✓	✓	$C_3$	✓	✗	2
Superfluide (SF)	✗	✓	✓	✓	✓	1
Solide 1 (S1)	✓	$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$	✓	✓	✓	3
Solide 2 (S2)	✓	$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$	$C_2$	✓	✓	9
Cristal à liens de valence-solide (VBCS)	✓	$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$	✗	✓	✗	18
Nématique (N)	✓	✓	$C_2$	✓	✓	3
Super-solide 1 (SS1)	✗	$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$	✓	✓	✓	3
Super-solide 2 (SS2)	✗	$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$	$C_2$	✓	✓	9
Super VBCS (SVBCS)	✗	$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$	✗	✓	✗	18
Super-nématique (SN)	✗	✓	$C_2$	✓	✓	3

TABLE IV.1 – Comparaison de différentes phases induites par champ magnétique. Elles sont caractérisées par la conservation (✓) ou la brisure (✗) de symétrie du groupe ponctuel  $C_6$ , du groupe de translation  $\mathcal{G}_T$ , de spin  $U(1)$  et par réflexion  $\sigma_u$  et  $\sigma_v$ . Pour la brisure de la symétrie  $\mathcal{G}_T$ , la phase est décrite par une cellule élémentaire de 9 sites, appelé phase  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ . La symétrie de rotation  $C_6$  peut être réduite à une symétrie de rotation plus basse  $C_3$  ou  $C_2$ , ou complètement brisée (✗). Le paramètre  $d$  est la dégénérescence de l'état fondamental, en accord avec les brisures de symétrie discrète. Lorsque la symétrie continue  $U(1)$  est brisée, un mode d'énergie zero (mode de Goldstone) est attendu.

nématiques, solide 1 et 2 et la phase cristal de liens de valence-solide dans le cas particulier du spin  $1/2$ . Les cercles en rouge et en bleu représentent des aimantations locales  $\langle m_z \rangle$  positives et négatives, respectivement, et les tailles sont proportionnelles à la norme de celles-ci. La même convention est utilisé sur les liens pour représenter la densité d'énergie  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle$ .

Nous allons voir les différentes propriétés qui caractérisent ces phases, résumées dans le tableau IV.1.

*i) Phase nématique et solide 1*

Comme dans le chapitre III, la phase nématique (Fig. IV.3(a)) préserve la symétrie de translation et brise la symétrie  $C_6$  pour ne préserver que le symétrie d'inversion, ce qui mène à un état fondamental 3 fois dégénéré. Lorsque le système présente une taille de cellule élémentaire plus grande, il existe une phase concurrente à la phase nématique (Fig. IV.3(b)), appelé solide 1, présentant la même dégénérescence ainsi que la même énergie. Il s'agit d'une phase  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  préservant la symétrie  $C_6$ . Notons que l'axe de symétrie  $C_6$  est défini différemment pour ces deux phases. En effet, dans le premier cas, il existe un axe centré sur chaque hexagone tandis qu'il n'y a qu'un hexagone sur trois présentant cette symétrie dans le deuxième cas. Cette compétition est due à l'approche de type

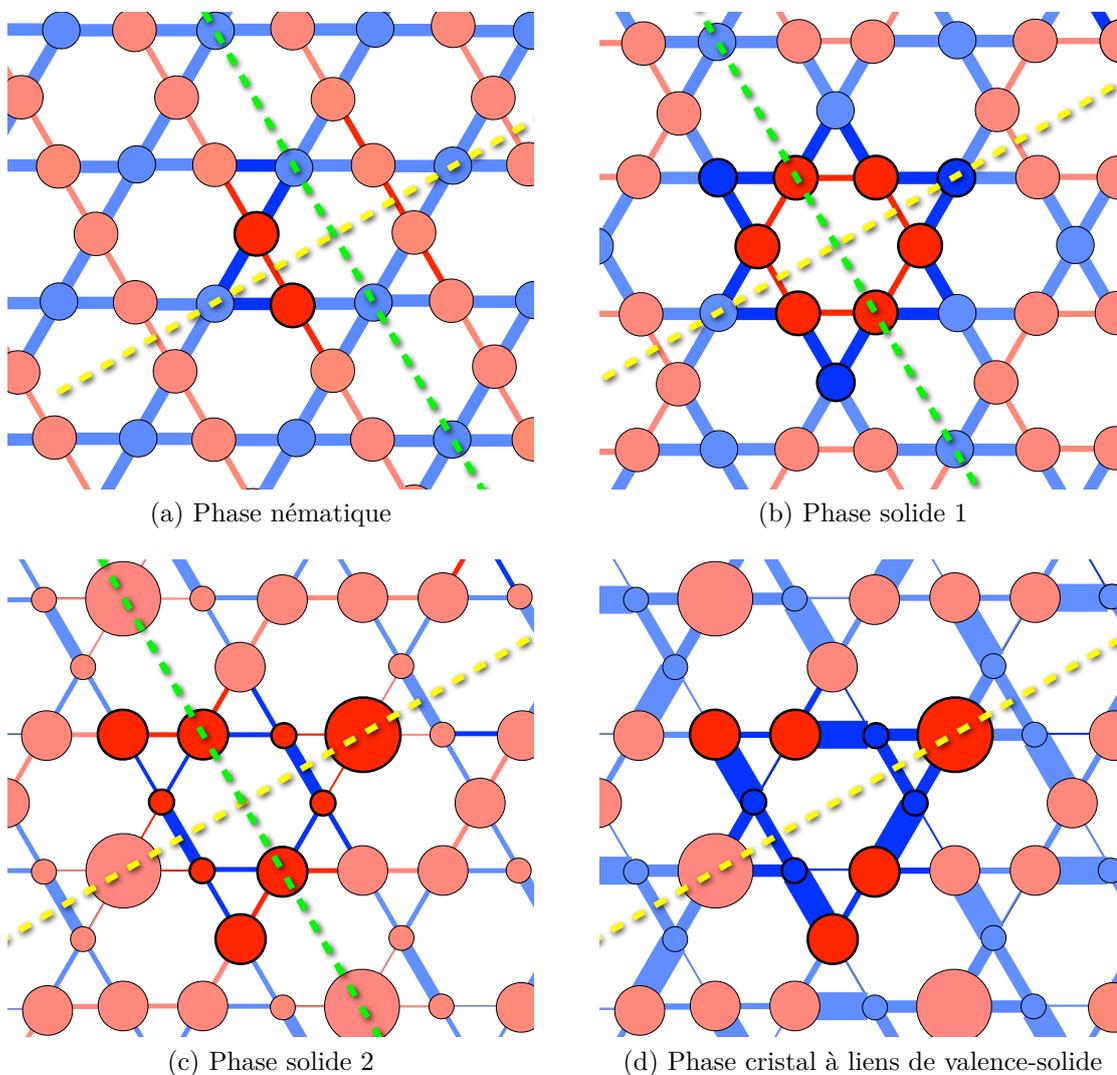


FIGURE IV.3 – Illustration des phases nématique et solides apparaissant dans le tableau IV.1 dans le cas des phases présentes dans le diagramme de phase du spin  $1/2$ . Les cercles correspondent aux aimantations locales le long du champ magnétique et les liens aux densités d'énergie  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$ . Les couleurs rouge et bleu symbolisent une valeur positive et négative, respectivement. Le taille des cercles et des liens est proportionnelle à la norme. Les lignes pointillés jaunes et vertes correspondent aux symétries de réflexion  $\sigma_u$  et  $\sigma_v$ , respectivement.

champ moyen pour le calcul des valeurs moyennes, menant à une énergie parfaitement dégénérée. Toutefois, cette dégénérescence peut être levée en considérant un environnement complet. Nous pensons que cette différence d'énergie resterait toutefois très faible, et qu'une quasi-dégénérescence est à l'origine de cette égalité dans notre cas.

Il existe un lien simple entre la phase nématique et la phase solide 1, représenté sur la figure IV.4. Sur chaque triangle *down* (pointant vers le bas), il y a deux sites équivalents (points rouges) et un site différent (point bleu), donnant ainsi une direction aux triangles. Pour la phase nématique, la direction est la même pour tous les triangles du fait de l'invariance par translation. À partir de cette phase, nous pouvons appliquer une rotation de  $2\pi/3$  à un tiers des triangles, une rotation de  $-2\pi/3$  à un autre tiers et laisser le dernier tiers invariant, suivant un motif bien particulier (voir la figure IV.4). La rotation dans un sens mène à une phase solide 1 tandis que la rotation dans le sens inverse mène vers une phase plus haute en énergie. Alors que pour les phases nématique et solide 1, chaque triangle (*up* et *down*) est composé de deux points rouges (aimantation positive) et d'un point bleu (aimantation négative), cette troisième phase est composée de triangles *up* constitués de trois aimantations positives, ou trois aimantations négatives, ce qui augmente l'énergie puisque les interactions antiferromagnétiques tendent à alterner les aimantations. Toutefois, il existe une autre phase solide 1 à des valeurs du champ magnétique plus grande non connectée à une phase nématique.

*ii) Phase solide 2*

La phase solide 2 (Fig. IV.3(c)), tout comme la phase solide 1, brise la symétrie par translation. À la différence de cette dernière, la phase solide 2 ne possède jamais de lien avec une phase ne brisant pas la translation. Cela provient des symétries de la phase, en particulier sa dégénérescence est  $deg = 9$  tandis que la dégénérescence de la phase nématique est  $deg = 3$ . En plus de la brisure de translation, elle brise la symétrie de rotation  $C_6$ , se ramenant une inversion selon ce même axe. Nous précisons les aimantations locales de cette phase lorsque nous aborderons le plateau d'aimantation qu'elle décrit.

*iii) Phase cristal de liens de valence-solide*

La phase cristal de liens de valence-solide (Fig. IV.3(d)), ou Valence Bond Crystal-Solid (VBCS), a la particularité de présenter un ordre de "charge" et un ordre de densité de liens. L'analyse de l'aimantation locale (ordre de "charge") mène à la description d'une phase solide 2. Cependant, elle ne permet pas de rendre compte de l'ensemble des symétries brisées. En effet, l'ordre de liens brise une symétrie supplémentaire, la réflexion  $\sigma_v$ , caractéristique d'un cristal de liens de valence [16]. Cette dimérisation le long des parois séparant les spins polarisés, si elle devient résonante, peut mener à une phase solide 2.

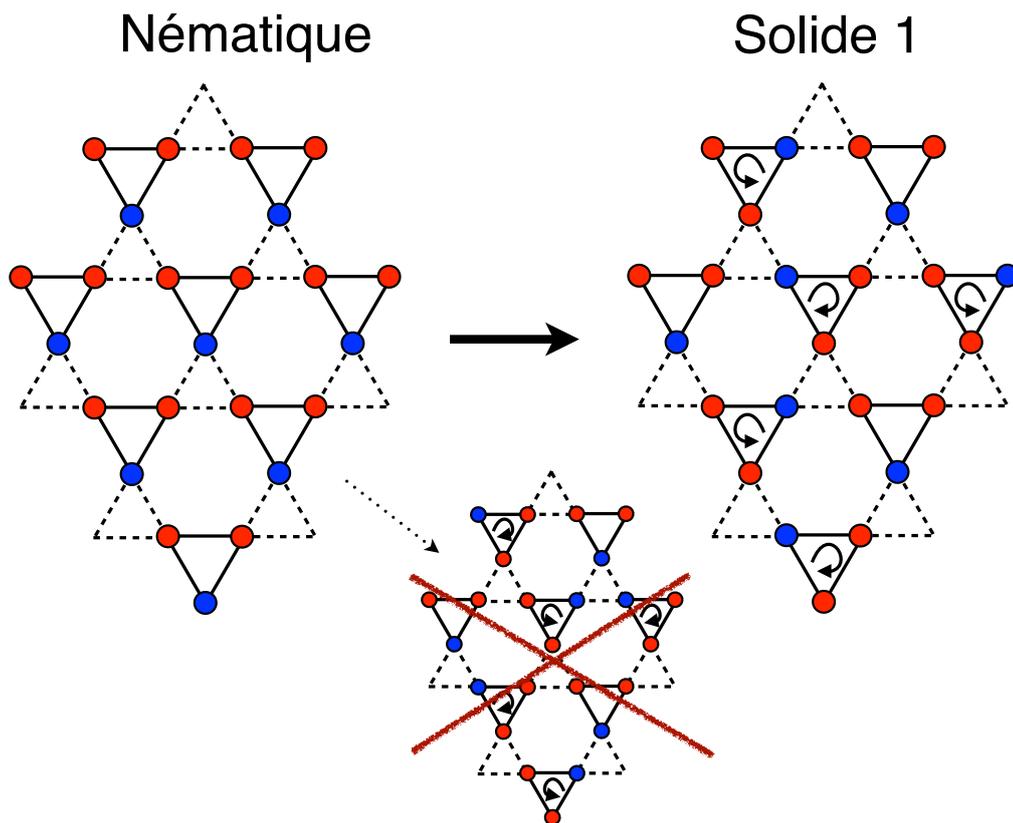


FIGURE IV.4 – Correspondance entre la phase nématique et la phase solide 1. La phase solide 1 résulte d'une rotation de  $\frac{2\pi}{3}$  d'un tiers des triangles *down* (ou *up*), et d'une rotation de  $-\frac{2\pi}{3}$  d'un autre tiers de la phase nématique, suivant un motif particulier. Les rotations dans le sens opposé mènent à un état d'énergie plus grande puisque que le nombre de liens d'énergie négative (entre un spin rouge et un site bleu) passe de 12 (pour les phases nématique et solide 1) à 6.

*iv) Superfluidité*

Chaque phase présentée précédemment correspond à un plateau d'aimantation du système sous champ magnétique. Elles sont connectées entre elles par des phases compressibles, caractérisée par une aimantation croissante avec le champ magnétique, soit  $\frac{\partial \langle m_z \rangle}{\partial h} > 0$ . En termes de symétrie, ces phases se caractérisent par une brisure spontanée de la symétrie  $U(1)$  de spin, dans quel cas une aimantation transverse locale apparaît sur les sites. Comme pour les phases incompressibles, les phases compressibles présentent des brisures spontanées de symétrie ponctuels. En particulier, les quatre phases décrites précédemment donnent toutes naissance à une phase possédant un caractère superfluide.

Dans le chapitre précédent, nous avons déjà vu le cas de la phase super-nématique, issue de la phase nématique, à laquelle nous pouvons ajouter les phases super-solide 1, super-solide 2 et super-VBCS (voir la table IV.1).

## 1.2 Diagrammes de phases

De la même façon que pour l'étude précédente (vu au chapitre III), nous analysons les valeurs moyennes d'observables locales. Pour rappel, celles-ci sont les aimantations locales  $\langle S_\alpha^\mu \rangle$ , cette fois pour les neuf sites de la cellule élémentaire,  $\mu \in [1, 9]$ , parallèles ( $\alpha = z$ ) et perpendiculaires ( $\alpha = x, y$ ) au champ magnétique. Nous analysons également la densité d'énergie de lien  $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$  sur les dix-huit liens qui composent cette cellule. Par commodité, nous définissons l'aimantation *réduite* qui est l'aimantation locale normalisée par le valeur  $S$  du spin. Les valeurs moyennes calculés sont alors  $m_z^\mu = \langle S_z^\mu \rangle / S$  et  $m_\perp^\mu = \sqrt{\langle S_x^\mu \rangle^2 + \langle S_y^\mu \rangle^2} / S$ . L'aimantation totale du système est obtenue en additionnant les contributions algébriques de chaque spin local. Notons que l'aimantation totale transverse est toujours nulle  $\sum_\mu \langle S_\alpha^\mu \rangle = 0$  pour  $\alpha = x$  et  $y$ , l'aimantation globale se ramenant à une seule composante selon l'axe  $z$ , défini par le champ magnétique extérieur, est s'écrit  $m_z = \sum_\mu \langle S_z^\mu \rangle / 9S$ .

Les aimantations longitudinales globales, le long du champ magnétique, sont présentées pour les spins  $S = \frac{1}{2}$  (Fig. IV.5(a)),  $S = 1$  (Fig. IV.6(a)),  $S = \frac{3}{2}$  (Fig. IV.7(a)) et  $S = 2$  (Fig. IV.8(a)). Nous présentons également les aimantations transverses locales  $m_\perp^\mu$ ,  $\mu \in [1, 9]$  (Fig. IV.5(b), Fig. IV.6(b), Fig. IV.7(b) et Fig. IV.8(b)). Les aimantations locales nous permettent de rendre compte que dans certaines phases (en gris sur les figures), bien que l'aimantation globale ait un comportement régulier, les composantes locales ont un comportement complètement aléatoire, nous empêchant d'identifier le type de phase. Certaines de ces phases ont déjà été étudiées, en particulier la courbe d'aimantation du spin 1/2 par des calculs de diagonalisation exacte [11] et par méthode DMRG [69].

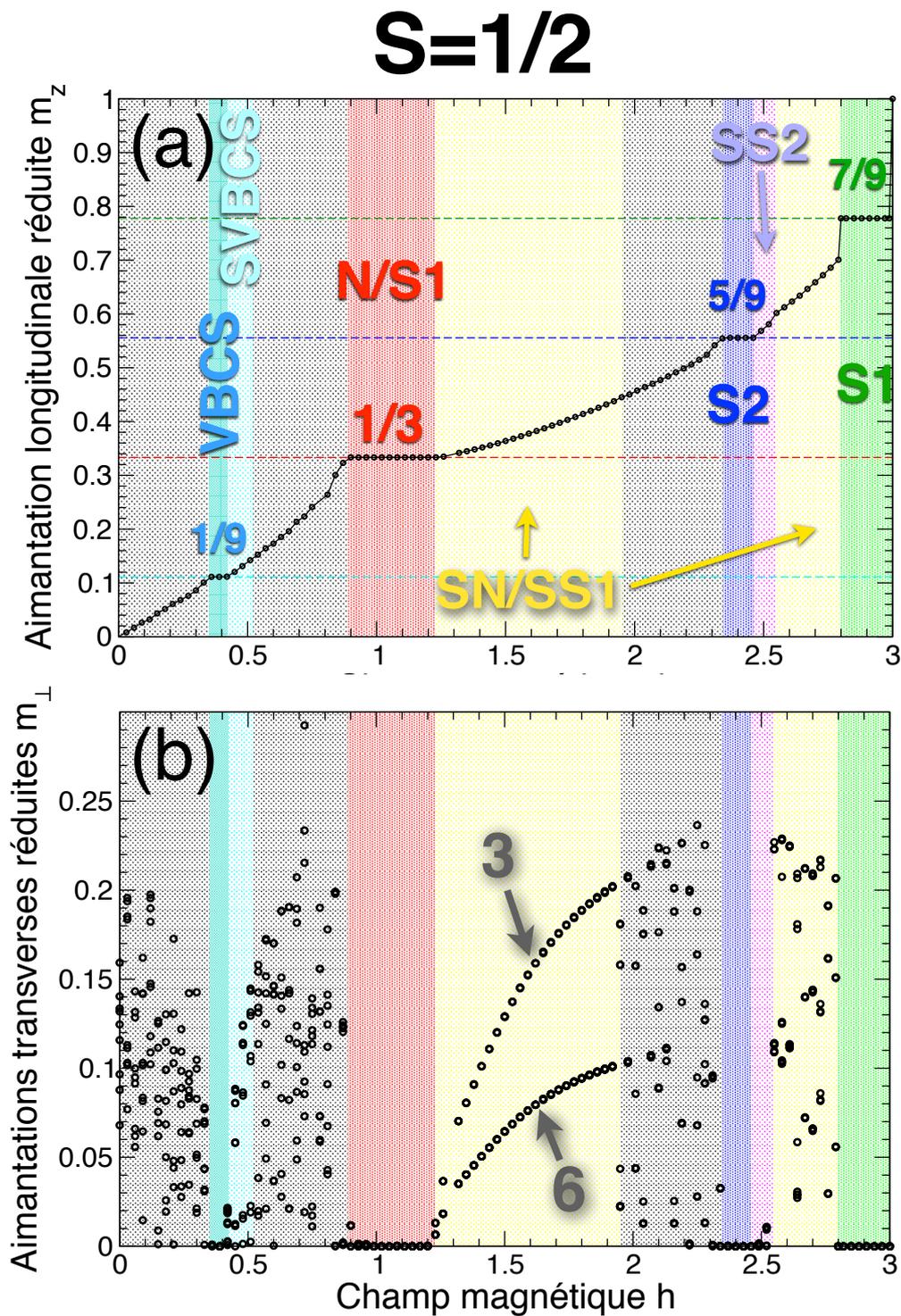


FIGURE IV.5 – Diagramme de phase du modèle de Heisenberg de spin 1/2 sur réseau kagomé en fonction du champ magnétique obtenu en analysant les aimantations longitudinales et transverses. L’aimantation moyenne réduite le long du champ (a) et les neuf aimantations transverses (normes) (b) sont présentées. La multiplicité des aimantations transverses est indiquée sur (b). Les trois aimantations correspondent aux sites bleus et les six autres correspondent aux sites rouges de la figure IV.4. Les plateaux d’aimantation à  $m_z = 1/9, 1/3, 5/9$  et  $7/9$  sont caractérisés par  $m_{\perp} = 0$ , contrairement aux phases super-nématiques et super-solides.

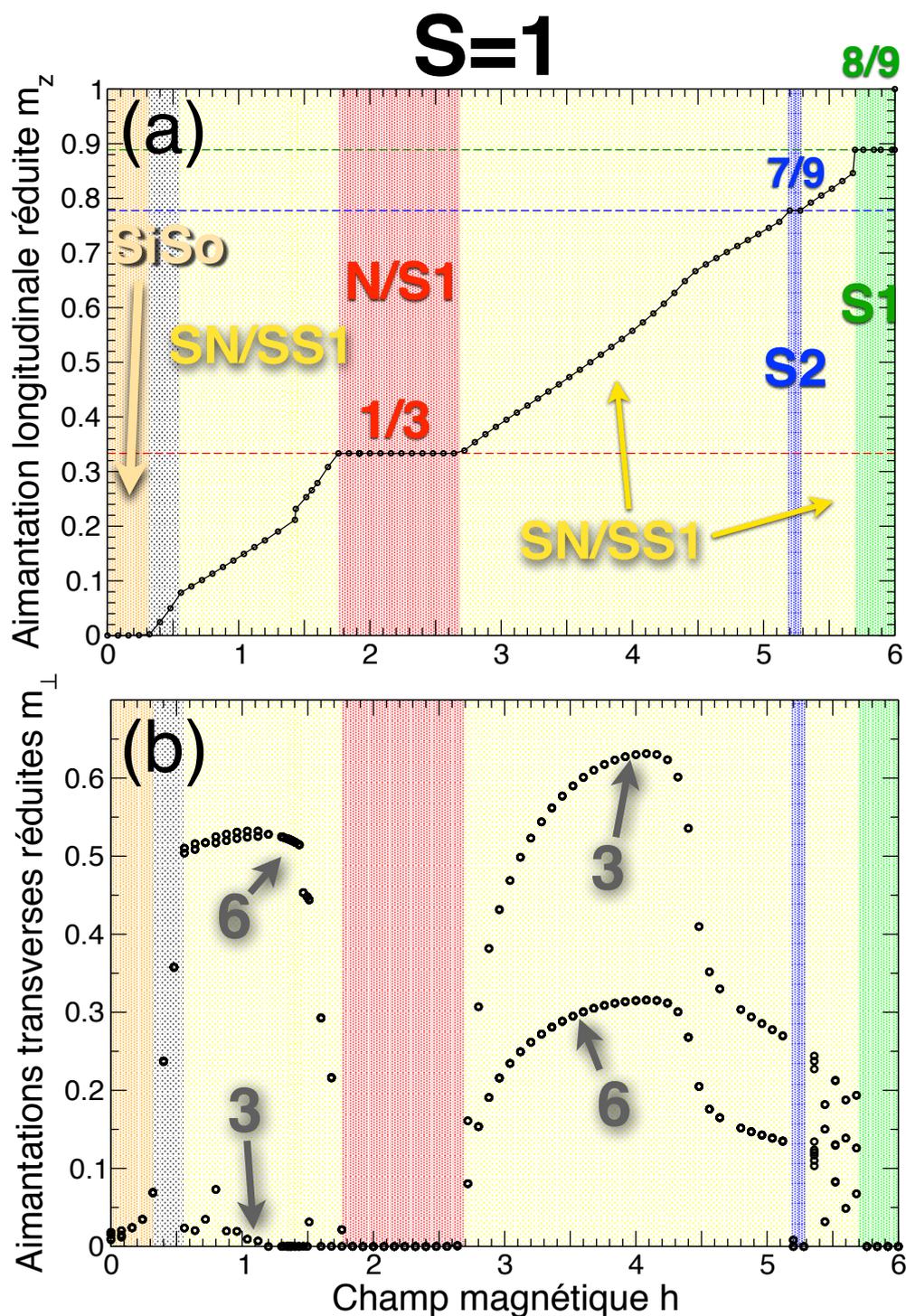


FIGURE IV.6 – Diagramme de phase du modèle de Heisenberg de spin 1 sur réseau kagomé en fonction du champ magnétique obtenu en analysant les aimantations longitudinales et transverses. L'aimantation moyenne réduite le long du champ (a) et les neuf aimantations transverses (normes) (b) sont présentées. La multiplicité des aimantations transverses est indiquée sur (b). Les trois aimantations correspondent aux sites bleus et les six autres correspondent aux sites rouges de la figure IV.4. Les plateaux d'aimantation à  $m_z = 0, 1/3, 7/9$  et  $8/9$  sont caractérisés par  $m_{\perp} = 0$ , contrairement aux phases super-nématiques et super-solides.

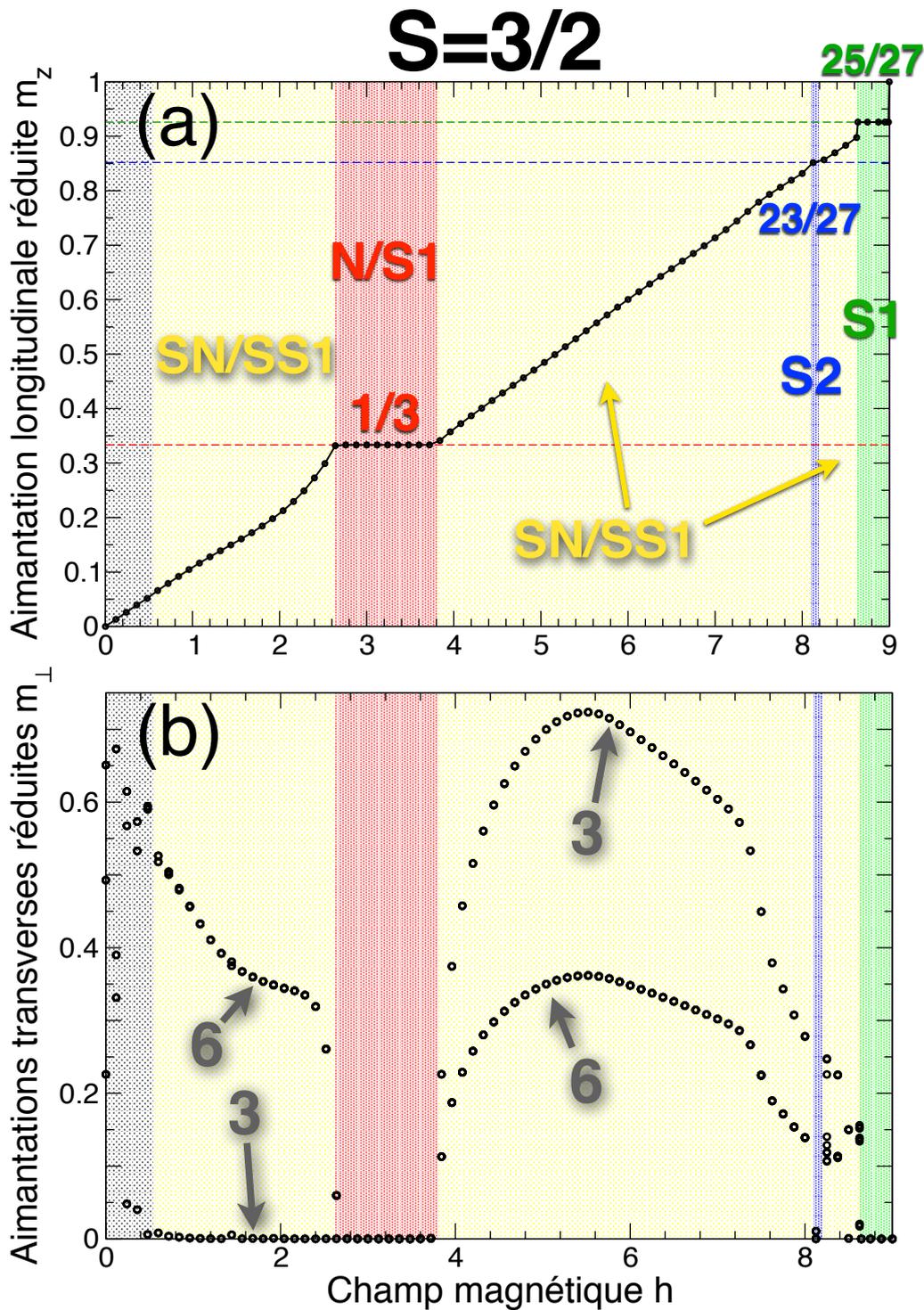


FIGURE IV.7 – Diagramme de phase du modèle de Heisenberg de spin 3/2 sur réseau kagomé en fonction du champ magnétique obtenu en analysant les aimantations longitudinales et transverses. L’aimantation moyenne réduite le long du champ (a) et les neuf aimantations transverses (normes) (b) sont présentées. La multiplicité des aimantations transverses est indiquée sur (b). Les trois aimantations correspondent aux sites bleus et les six autres correspondent aux sites rouges de la figure IV.4. Les plateaux d’aimantation à  $m_z = 1/3$ ,  $23/27$  et  $25/27$  sont caractérisés par  $m_{\perp} = 0$ , contrairement aux phases super-nématiques et super-solides.

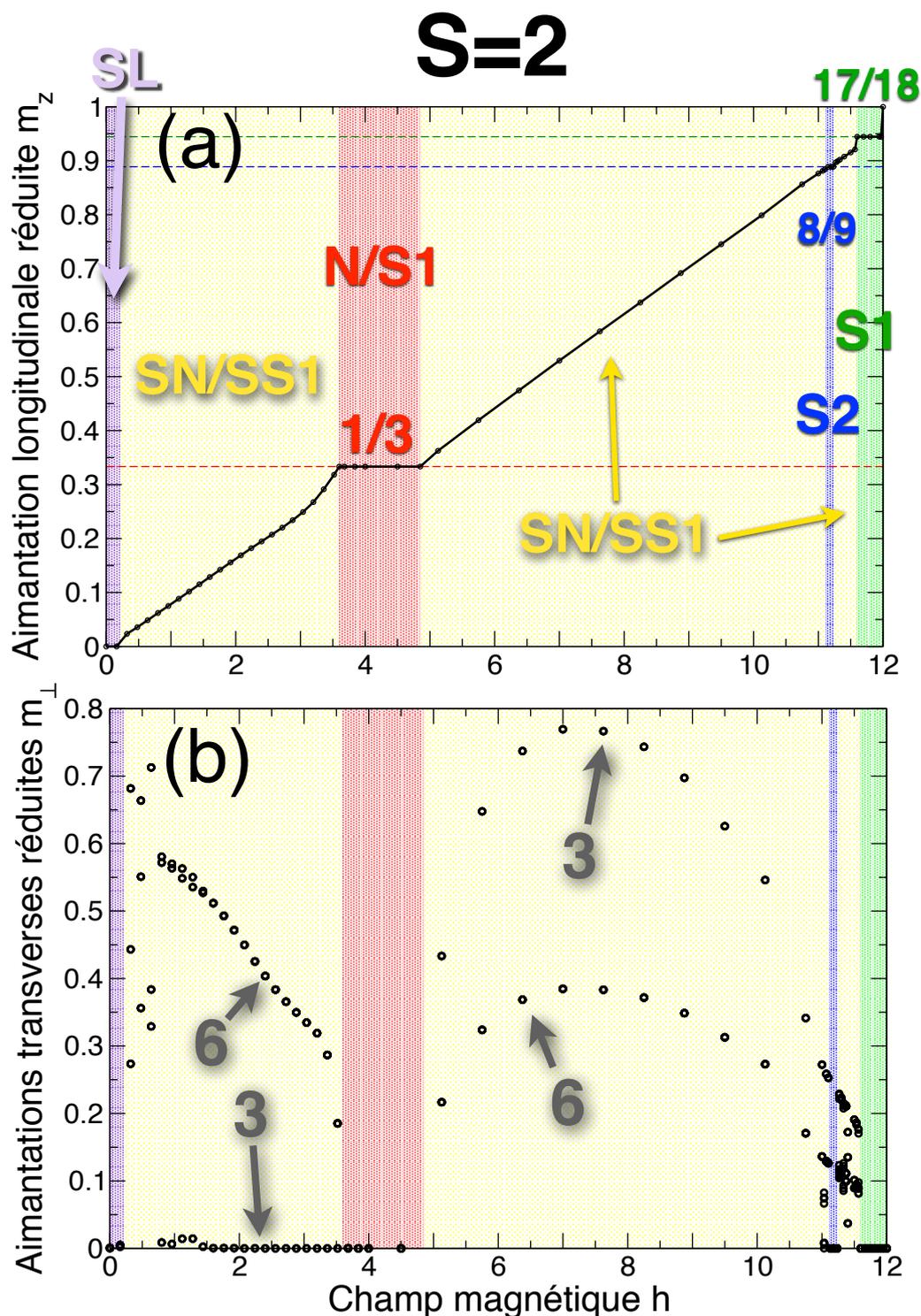


FIGURE IV.8 – Diagramme de phase du modèle de Heisenberg de spin 2 sur réseau kagomé en fonction du champ magnétique obtenu en analysant les aimantations longitudinales et transverses. L'aimantation moyenne réduite le long du champ (a) et les neuf aimantations transverses (normes) (b) sont présentées. La multiplicité des aimantations transverses est indiquée sur (b). Les trois aimantations correspondent aux sites bleus et les six autres correspondent aux sites rouges de la figure IV.4. Les plateaux d'aimantation à  $m_z = 0, 1/3, 8/9$  et  $17/18$  sont caractérisés par  $m_{\perp} = 0$ , contrairement aux phases super-nématiques et super-solides.

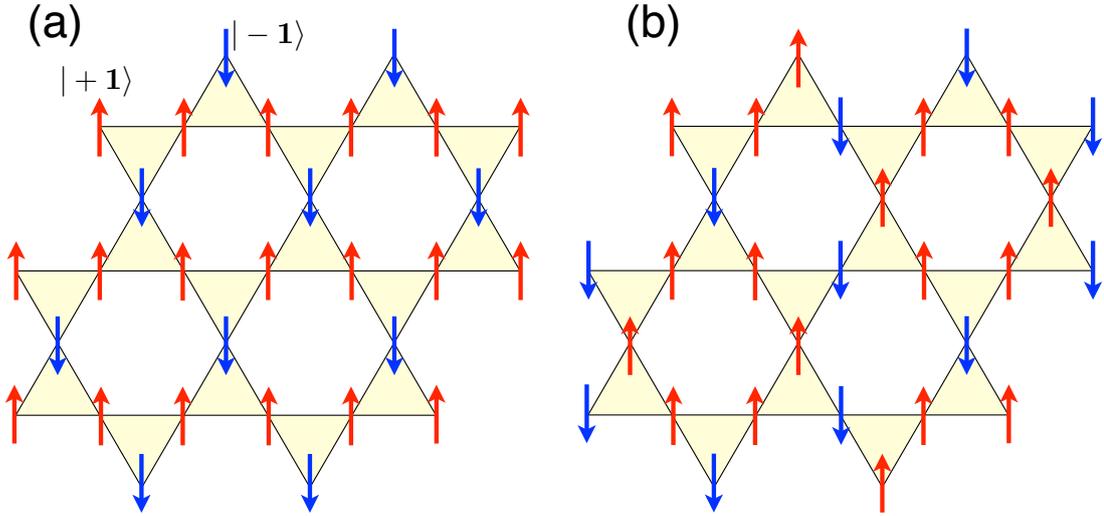


FIGURE IV.9 – Représentation semi-classique du plateau à  $1/3$  dans une phase nématique (a) et une phase solide 1 (b).

## 2 Plateau d'aimantation à $1/3$

### 2.1 Description

Nous retrouvons le plateau à  $\langle m_z \rangle = 1/3$  déjà rencontré dans l'étude du modèle de Heisenberg de spin 1 ne brisant pas la symétrie de translation. Nous voyons ici qu'il existe pour les valeurs de spin  $S = 1/2$ ,  $S = 1$ ,  $S = 3/2$  et  $S = 2$  que nous pouvons extrapoler à toute valeur de spin  $S$ . Il s'agit d'un plateau semi-classique de  $2/3$  de spins totalement polarisé dans le sens du champ magnétique et  $1/3$  dans le sens opposé afin d'obtenir une aimantation totale réduite de  $1/3$ , les fluctuations dues à la nature quantique des spins tendant à réduire cette polarisation locale. Néanmoins, deux phases stabilisent ce plateau et sont en compétition lors de nos simulations : la phase nématique (Fig. IV.9(a)) et la phase solide 1 (Fig. IV.9(b)). Cette compétition et le lien entre ces phases ont déjà été discutés dans la section 1.1 de ce chapitre.

### 2.2 Interprétation semi-classique

Les grandes valeurs de spin  $S$  ont tendance à supprimer rapidement les fluctuations quantiques dans le système. Pour étudier cet effet, nous avons analysé la vitesse à laquelle le plateau d'aimantation  $1/3$  disparaît quand  $S$  devient grand. Nos résultats sont donnés pour la dimension de lien jusqu'à  $D = 10$  et les spins jusqu'à  $S = 2$ , et ceux-ci sont présentés dans la figure IV.10. Nous traçons les deux points critiques  $H_{c_1}$  et  $H_{c_2}$  sur la figure IV.10 (a). Pour être complet, nous montrons également les résultats d'une diagonalisation exacte de petits systèmes [67] et d'étude perturbative de spins classiques [115]. Pour  $S = \infty$ , c'est-à-dire le cas de spins classiques, nous nous attendons à ce que la courbe d'aimantation soit

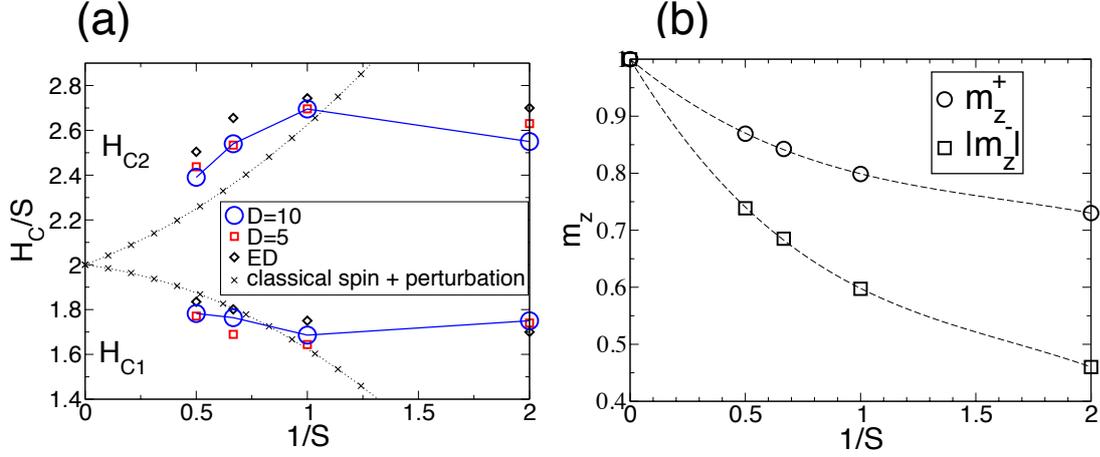


FIGURE IV.10 – (a) Valeurs du champ magnétique critiques normalisées  $H_{C1}$  (cercles) et  $H_{C2}$  (carrés) du plateau à  $1/3$  en fonction de l’inverse du spin. Les valeurs pour les dimensions de liens  $D = 10$  (bleu) et  $D = 5$  (rouge) sont présentées, ainsi que les résultats de diagonalisation exacte [67] et de théorie des perturbations pour des spins classiques [115]. (b) Aimantations longitudinales locales pour les deux aimantations différentes du plateau (calculées avec  $D = 10$ ).

monotone, et donc les deux points critiques tendent vers la même valeur classique  $H_{c1}/S = H_{c2}/S = 2$ . En effet, une fois que nous nous éloignons de  $S = \frac{1}{2}$ , la taille normalisée du plateau rétrécit rapidement en fonction de  $\frac{1}{S}$ . Nous traçons aussi les aimantations locales pour le plateau  $1/3$  par rapport à  $\frac{1}{S}$ , pour  $D = 10$ . Comme le montre la figure IV.2 (b), il y a deux aimantations non équivalentes sur site,  $m_z^+ > 0$  (dans la direction du champ) et  $m_z^- < 0$  (opposée à la direction du champ), de telle sorte que  $\frac{2}{3}m_z^+ + \frac{1}{3}m_z^- = \frac{1}{3}$ . Dans la limite classique, les fluctuations quantiques disparaissent et  $m_z^+ = -m_z^- = 1$ .

### 3 Phase à 1 magnon exact et saut à la saturation

Un autre plateau d’aimantation, présent pour chaque valeur de spin  $S$ , possède le symétrie de la phase solide 1. Cette phase incompressible apparaît pour une aimantation  $\langle m_z \rangle = 1 - 1/(9S)$ . À la différence du plateau à  $1/3$ , celui-ci ne présente pas de compétition avec une phase nématique. En effet, il s’agit d’une phase à 1 magnon par cellule élémentaire de 9 sites qui brise nécessairement la symétrie de translation.

L’état à un magnon est un état analytique [93] défini à partir de la phase complètement polarisé  $|0\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow\rangle$ , également appelé “vide de magnon”. L’état à un magnon s’écrit alors

$$|1\rangle = \frac{1}{c} \sum_i^N a_i \hat{S}_i^- |0\rangle \quad (\text{IV.2})$$

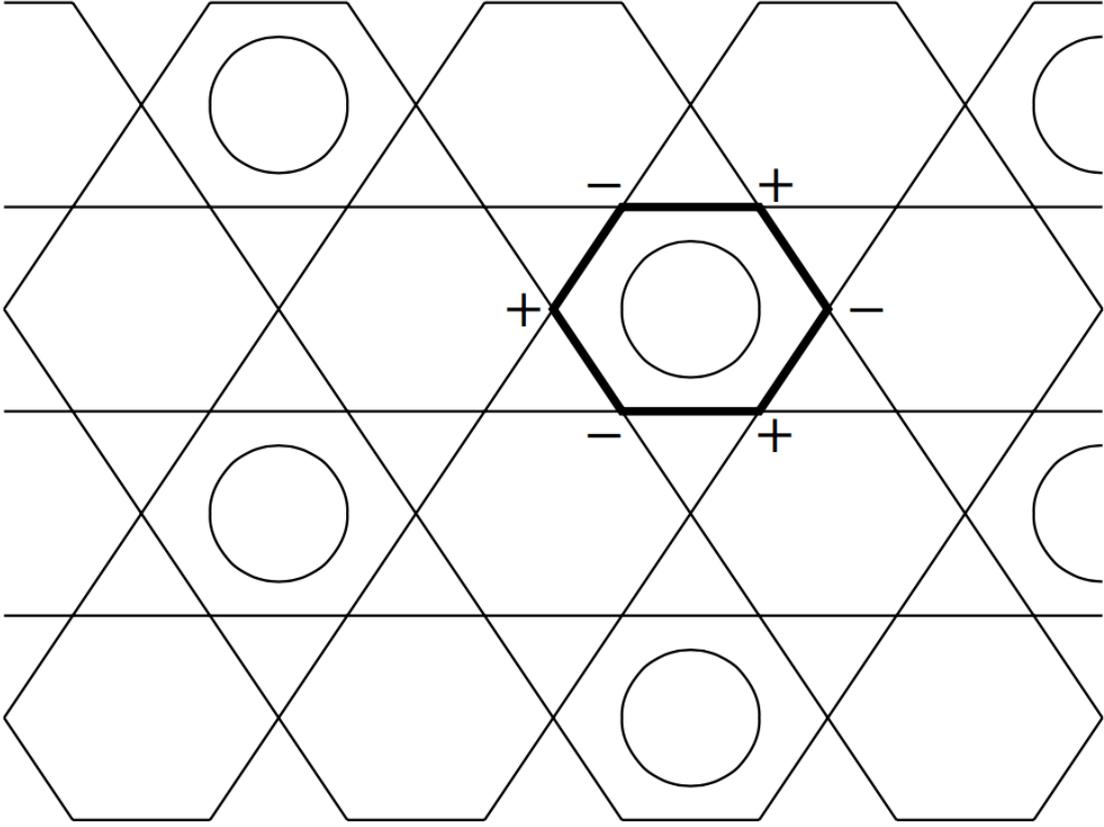


FIGURE IV.11 – État à un magnon par cellule élémentaire de neuf sites. Les magnons (cercles) se localisent sur un tiers des hexagones et n’interagissent pas. [figure tirée de la référence [93]]

où la somme court sur tous les sites du système. Lorsque le système est décrit par une cellule élémentaire de  $n_S$  sites, il existe  $n_S$  bandes de dispersion  $w_i(\vec{k})$ , et il est possible d’avoir une bande complètement plate  $w_0(\vec{k})$ . Dans le cas  $n_S = 9$ , cette bande devient  $w_0 = h - 6s$  et le magnon est alors localisé sur l’hexagone central de la cellule élémentaire (Fig. IV.11). Cette phase, lorsque l’on augmente le champ magnétique, montre un saut macroscopique dans l’aimantation à la saturation, pour  $h_{\text{sat}} = 6S$ . Grâce à une représentation exacte en terme de tenseurs, nous sommes en mesure de voir ce saut en comparant à nos simulations.

Nous pouvons écrire un PEPS exact pour cet état, de dimension  $D = 6$ , dépendant du nombre de sites sur lesquels le magnon est localisé. Cette description se décompose en un état complètement polarisé sur lequel nous appliquons un opérateur de création pour le magnon sur l’hexagone. L’état complètement polarisé est décrit par des tenseurs de dimension  $D = 1$ , identique sur tous ces sites  $B^m = 0 \forall m \neq +S$  et  $B^{m=+S} = 1$ , que nous localiserons entre les hexagones contenant un magnon. Sur ces hexagones particuliers, nous écrivons six tenseurs différents  $A_{i,j}^{[n],m}$ , où  $n \in [1, 6]$  est l’indice de site,  $m \in [-S, +S]$  est l’indice physique et  $i, j \in [1, 6]$  sont les indices de lien. Ces tenseurs s’écrivent

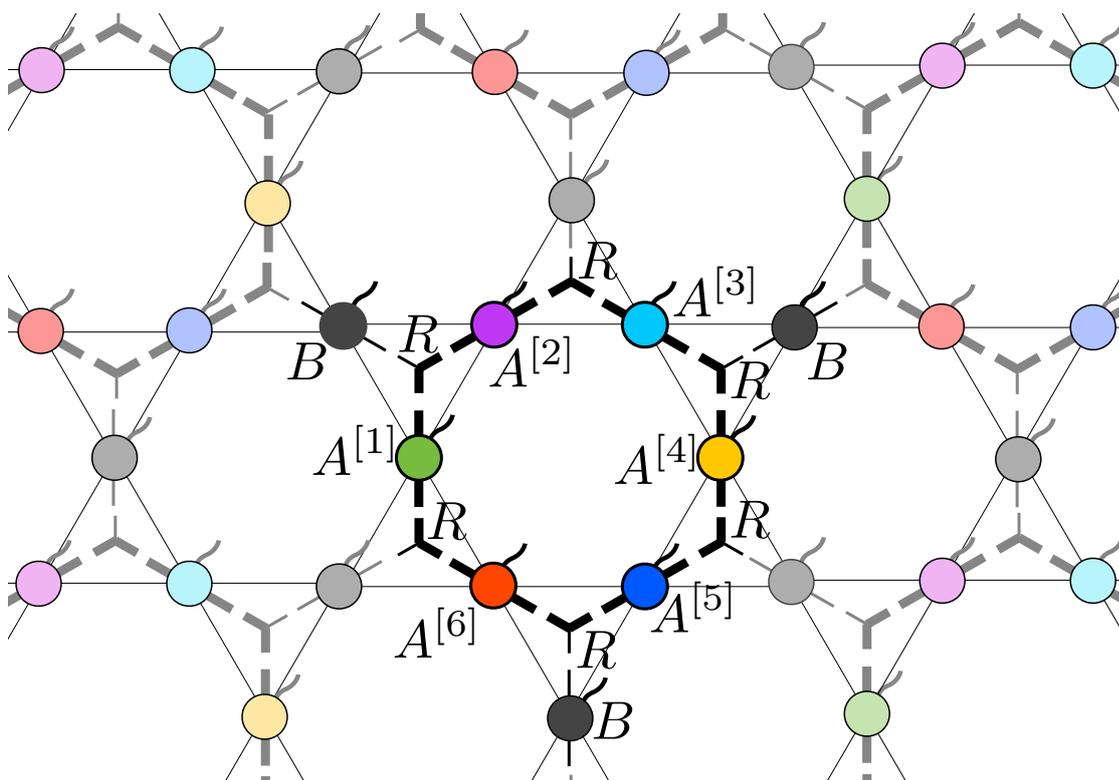


FIGURE IV.12 – Tenseurs de la représentation de l'état à un magnon. Les six tenseurs  $A^{[n]}$  qui portent le magnon sont de dimension  $dD^2$ , où  $D = 6$  et  $d = 2S + 1$ . Les tenseurs  $B$  représentent les spins polarisés et non intriqués au reste du système.

$$A_{i,j}^{[n],m} = \begin{cases} (-1)^n 2\delta_{i,j}\delta_{(S-1),m} & \text{pour } i = n \\ \delta_{i,j}\delta_{S,m} & \text{pour } i \neq n \end{cases} \quad (\text{IV.3})$$

où  $\delta_{i,j}$  est le symbole de Kronecker ( $\delta_{i,j} = 1$  si  $i = j$ ,  $\delta_{i,j} = 0$  sinon). Le préfacteur  $(-1)^n$  correspond à une phase, présenté figure IV.11. Les tenseurs simplexes connectant ces sites s'écrivent  $R_{i,j}$ , l'indice manquant correspond à une dimension  $D = 1$  et connecte le spin polarisé extérieur à l'hexagone du magnon. Ce tenseur est simplement  $R_{i,j} = \delta_{i,j}$ . La configuration de ces tenseurs est représentée sur la figure IV.12.

Lors de nos simulations, ce plateau n'a pas été explicitement identifié mais un saut macroscopique apparessé à la saturation. À l'aide de cette représentation exacte, nous avons été en mesure de comparer l'énergie de nos tenseurs optimisés à celle de la représentation exacte. Cette analyse a permis de confirmer la présence de ce plateau d'aimantation, l'énergie de l'état à un magnon par cellule élémentaire étant plus basse que l'énergie calculée lors de nos simulations. Cette lacune de nos simulations peut venir du fait qu'elles ne capturent pas parfaitement la physique des hexagones. Toutefois, un effort peut être fourni dans ce sens pour améliorer l'algorithme *Simple Update*, sans avoir recours à l'algorithme *Full Update*. Une idée pourrait être de considérer des tenseurs simplexes plus grands, connectant plus de sites à la fois [110].

## 4 Plateaux d'aimantation spécifiques

### 4.1 Gap de spin

Bien que pour les spins demi-entiers, nous ne sommes pas en mesure de décrire la physique à faible champ magnétique, pour les valeurs de spin entier  $S = 1$  et  $S = 2$ , nous identifions une phase à gap de spin à champ magnétique suffisamment faible. Toutefois, ces deux phases sont très différentes. Nous ne pouvons donc pas extrapoler un comportement pour les spins entiers à champ faible sur la base de ces deux exemples.

#### 4.1.1 Solide simplexe

Cette phase, présente dans notre première étude, est spécifique au spin  $S = 1$ . Elle correspond exactement à la phase décrite dans le chapitre précédent. Rappelons que nous avons levé la contrainte de l'invariance par translation. Cela nous indique que bien que le système possède cette liberté supplémentaire, la phase solide simplexe reste la phase qui stabilise le plateau d'aimantation à  $\langle m_z \rangle = 0$  du modèle de Heisenberg sous champ pour le spin  $S = 1$ .

#### 4.1.2 Liquide de spin trivial

Nous avons également identifié un gap de spin pour le spin  $S = 2$ . À la différence de la phase simplexe solide, la phase incompressible à aimantation nulle ( $\langle m_z \rangle = 0$ ) est un liquide de spin, au sens où elle ne brise aucune symétrie. Bien

sûr, bien que les symétries considérées soient préservées, la caractérisation précise de ce liquide de spin reste un point à éclaircir. Toutefois, et comme l'autorise le théorème Lieb-Schultz-Mattis à plus grande dimension [80], nous pensons qu'il s'agit d'un liquide de spin topologiquement trivial, c'est-à-dire avec un gap et non dégénéré. De ce fait, il pourrait exister un lien direct entre l'état fondamental du modèle de Heisenberg antiferromagnétique et l'état AKLT. À une dimension, nous savons que pour une chaîne de spin 1, ces deux états sont dans la même phase [88], appelée phase de Haldane [33]. Cependant, il n'existe pas encore de preuve d'une phase commune entre ces deux modèles dans des systèmes à deux dimensions. Nous avons le sentiment que le réseau kagomé pourrait présenter ce type de comportement. Autrement dit, nous pensons que le liquide de spin du modèle de Heisenberg peut être adiabatiquement connecté à l'état AKLT. Une autre conclusion, dans la littérature, utilisant une méthode Coupled-Cluster, suggère que l'état fondamental du modèle de Heisenberg sur réseau kagomé sans champ est ordonné pour  $S \geq 3/2$  [31, 32].

## 4.2 Phase à “2 magnons”

De la même façon que pour la phase à un magnon par cellule élémentaire, il existe une phase à deux magnons par cellule élémentaire. Elle stabilise un plateau d'aimantation à  $\langle m_z \rangle = 1 - 2/(9S)$ . Une description PEPS exacte pourrait être donné pour une dimension de lien  $D = 12$ , que nous n'avons pas utilisé ici car nous avons effectué nos calculs jusqu'à des valeurs de  $D = 10$ . L'optimisation de nos tenseurs ont permis de voir ce plateau d'aimantation. En revanche, alors que la phase à deux magnons est de type solide 1, nous trouvons une phase solide 2. Dans notre cas, nous avons trois aimantations dans notre cellule élémentaire de neuf sites. Un des sites est fortement polarisé, entouré de quatre spins faiblement polarisés. Les quatre autres spins, d'une polarisation intermédiaire, jouent le rôle de “séparateurs de domaine” dans une direction privilégié par le système (voir figure IV.3(c)).

## 4.3 Phase à $1/9$ pour le spin $S = 1/2$

Seul plateau d'aimantation non nulle se situant avant le plateau à  $1/3$ , le plateau à  $\langle m_z \rangle = 1/9$  n'apparaît que pour le spin  $1/2$ . En plus de ces particularités, c'est également la seule phase incompressible à avoir les symétries de la phase VBC-solide. Cette phase est intrinsèquement quantique, puisque bien que les valeurs d'aimantations locales décrivent une phase solide 2, le calcul de la densité d'énergie sur le lien présente une brisure de symétrie supplémentaire (la réflexion  $\sigma_v$ , ou, de façon équivalente, l'inversion de la phase solide 2). Cet ordre dans la densité de lien est typique d'un cristal de liens de valence [16]. Dans la littérature, ce plateau a déjà été observé [69] mais possède des propriétés bien différentes. En effet, en utilisant une méthode DMRG grand canonique, ce plateau pourrait être une phase liquide de spin topologique  $Z_3$ .

## 5 Conclusion

Dans ce travail, nous avons étudié les différents plateaux d'aimantation du modèle de Heisenberg antiferromagnétique sur réseau kagomé en présence d'un champ magnétique extérieur pour des valeurs de spin jusqu'à  $S = 2$ . Pour cela, nous avons utilisé des méthodes Tensor Network, en particulier des algorithmes iPEPS. Nous avons ainsi obtenu et caractérisé un certain nombre de phases quantiques à température nulle, qui ont tendance à disparaître dans la limite de spin classique ( $S \rightarrow \infty$ ). Nos résultats améliorent et ouvrent des portes à la compréhension des résultats précédents sur ce modèle, présents dans la littérature, pour différentes valeurs de spin. Nous nous attendons à ce que nos conclusions soient utiles dans la compréhension théorique de nouvelles phases de la matière quantique dans les matériaux quantiques fortement corrélés.



# Chapitre V

## Conclusion and perspectives

Nous avons présenté les diagrammes de phases pour des modèles antiferromagnétiques, sur réseau kagomé, sous champ magnétique extérieur. Pour les déterminer, nous avons utilisé des algorithmes iPEPS, en particulier l’algorithme d’optimisation *Simple Update* dans le cas d’une représentation en réseau de tenseurs comprenant des tenseurs simplexes. Nous avons été en mesure de calculer les diagrammes de phase pour le modèle AKLT (de spin 2) et le modèle de Heisenberg pour les spins  $S = 1/2$ ,  $S = 1$ ,  $S = 3/2$  et  $S = 2$ . En particulier, nous avons utilisé une cellule élémentaire de trois sites, préservant la symétrie de translation, pour le modèle AKLT et de neuf sites, pouvant présenter une superstructure  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ , pour les modèles de Heisenberg  $S = 1/2$ ,  $S = 3/2$  et  $S = 2$ . Le modèle de Heisenberg pour  $S = 1$  a été étudié dans ces deux cas, nous permettant d’identifier les phases pouvant être stabilisées lorsque la symétrie de translation est préservée.

Nous avons observé une multitude de phases, compressibles, dans le cas de phases brisant la symétrie de spin  $U(1)$ , et incompressibles, dans le cas de plateaux d’aimantation. La plupart de ces phases présentent les symétries de phases solides (solide 1, solide 2), avec lesquelles peut coexister une brisure de symétrie sur les liens du système, menant à une phase quantique *Valence Bond Crystal*. Cependant, nous avons mis en évidence deux types de phases *nématiques*, stabilisant des plateaux d’aimantations tout en préservant la symétrie de translation. Pour le plateau d’aimantation à  $1/3$ , cette phase possède une limite semi-classique que nous avons analysé en fonction de la valeur du spin  $S$ . Toutefois, une phase solide, la phase solide 1, est toujours en compétition avec la phase *nématique* à l’issue de nos simulations. D’autres simulations, avec une cellule élémentaire plus grande ou en utilisant l’algorithme *Full Update* devrait permettre de “lever cette dégénérescence”. L’autre phase nématique est le plateau d’aimantation à  $5/6$  pour le modèle AKLT. Cette fois, la description de cet état est purement quantique est utilise l’image AKLT comme base, où cinq des six singulets sur les liens de la cellule élémentaire sont polarisés. Certains de ces plateaux ont été identifiés dans d’autres études, comme le plateau à  $1/3$  du modèle de Heisenberg et la phase à 1 magnon suivie du saut macroscopique, ou encore la phase solide simplexe pour le spin 1, menant aux mêmes conclusions. D’autres plateaux en revanche, bien que présentant la même valeur de l’aimantation, présentent des propriétés différentes, comme le plateau à  $1/9$  du spin  $1/2$  et la phase à “2 magnons” du modèle de Heisenberg.

Finalement, nous avons été en mesure de caractériser les phases compressibles à l'aide de l'analyse des observables locales. Ces phases, peu étudiées dans la littérature, apportent une information importante sur les connexions entre les plateaux d'aimantation. En particulier, des transitions de phases exotiques peuvent exister entre deux phases incompressibles, enrichissant ainsi le diagramme de phase.

Ce travail a également permis de démontrer l'efficacité de la méthode numérique utilisée, en particulier pour les phases communes à d'autres études utilisant d'autres méthodes numériques. Cependant, il a aussi permis d'en apercevoir certaines limites, comme pour la phase à 1 magnon qui n'a pas été identifiée clairement avec la méthode d'optimisation. Ceci étant, d'autres alternatives peuvent maintenant être envisagées, en particulier l'utilisation de tenseurs simplexes pouvant connecter tous les sites d'un hexagone du réseau kagomé en même temps.

# Annexes



# Annexe A

## Optimisation : algorithme *Full Update* sur réseau carré

Cette méthode d'optimisation, tout comme la version *Simple Update*, est basée sur l'évolution en temps imaginaire d'un système infini. Rappelons que cela consiste à faire évoluer un état initial aléatoire  $|\Psi(\tau = 0)\rangle$  vers l'état fondamental  $|\phi_0\rangle$  via un opérateur d'évolution en temps imaginaire

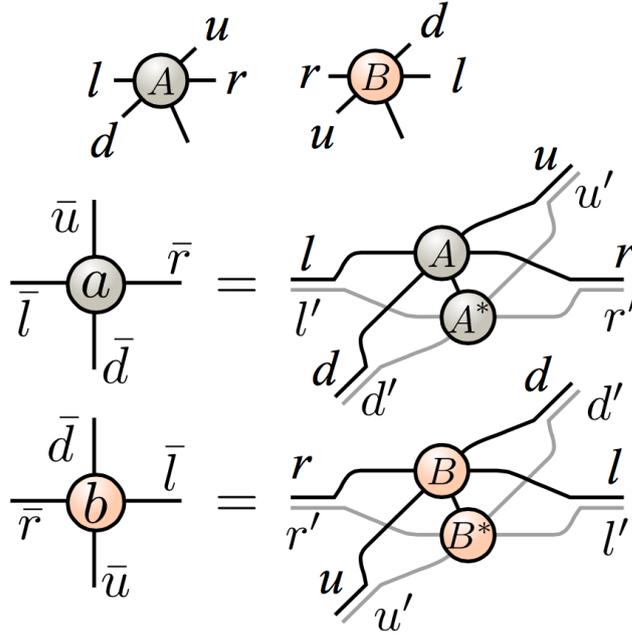
$$|\phi_0\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{e^{-\tau\mathcal{H}}|\Psi(\tau = 0)\rangle}{\|e^{-\tau\mathcal{H}}|\Psi(\tau = 0)\rangle\|} \quad (\text{A.1})$$

Cependant, la méthode d'optimisation *Full Update* est plus précise que la méthode *Simple Update* mais également plus coûteuse en termes de temps de calcul et d'espace mémoire. En effet, la différence majeure entre ces deux méthodes est le fait que le calcul de l'environnement est au cœur des calculs pour la méthode *Full Update*, qui est à l'origine de ses avantages mais également de ses inconvénients. Par conséquent, la décomposition en valeurs singulières n'étant plus possible, le principe d'optimisation se ramène à une succession de minimisations locales sur chaque tenseur, chacune d'entre elles correspondant à la résolution d'un système d'équations linéaires  $RX = S$ , où  $R$  est une matrice connue,  $S$  un vecteur connu et  $X$  le vecteur inconnu.

Dans cette annexe, nous n'aborderons pas les algorithmes permettant de calculer l'environnement. Les annexes B et C présentent deux algorithmes que nous pouvons utiliser dans ce cas.

Afin de clarifier les instructions de l'algorithme, nous prendrons l'exemple du réseau carré composé d'une cellule élémentaire de deux tenseurs  $A_{l,r,u,d}^m$  et  $B_{l,r,u,d}^m$  sur lequel agit un hamiltonien invariant par translation. L'environnement est composé d'un ensemble de tenseurs qui simulent l'environnement infini entourant un ensemble de tenseurs considérés (souvent la cellule élémentaire). Nous avons vu dans le chapitre II section 2.2, lorsque nous contractons les matrices décrivant un état selon leur indice physique avec leur conjugué complexe, nous obtenons la matrice de transfert de cet état. L'environnement correspond alors aux vecteurs dominants gauche et droit. Dans le cas des PEPS, la matrice de transfert n'existe plus, et l'environnement revêt une forme plus compliquée.

Tout d'abord, nous définissons les tenseurs réduits  $a$  et  $b$  de dimension  $D^8$  (voir


 FIGURE A.1 – Définition des tenseurs réduits  $a$  et  $b$ . [figure tirée de la référence [81]]

la figure A.1)

$$a_{\bar{l}, \bar{r}, \bar{u}, \bar{d}} = \sum_{m=1}^d A_{l,r,u,d}^m (A_{l',r',u',d'}^m)^* \quad (\text{A.2})$$

$$b_{\bar{l}, \bar{r}, \bar{u}, \bar{d}} = \sum_{m=1}^d B_{l,r,u,d}^m (B_{l',r',u',d'}^m)^* \quad (\text{A.3})$$

avec  $\bar{l} = (l, l')$ ,  $\bar{r} = (r, r')$ ,  $\bar{u} = (u, u')$  et  $\bar{d} = (d, d')$

Pour les MPS, c'est la matrice de transfert qui doit être propagé dans la direction du système. Pour les PEPS, ce sont les tenseurs réduits qui doivent être propagés dans les deux directions de l'espace (voir figure A.2 (a)). Quelque soit la technique utilisée, nous pouvons nous ramener à un ensemble de tenseurs  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$  et  $E_6$  interconnectés via un espace auxiliaire propre à l'environnement de dimension  $D_c$  (voir figure A.2 (b)).

Rappelons que dans le cas que nous considérons, le hamiltonien est une somme de termes locaux

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} h_{i,j} \quad (\text{A.4})$$

et peut s'écrire sous la forme

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_l + \mathcal{H}_r + \mathcal{H}_u + \mathcal{H}_d \quad (\text{A.5})$$

où  $l, r, u$  et  $d$  labellisent les quatre liens différents par lesquels peuvent être connectés les tenseurs  $A$  et  $B$  et chaque terme  $\mathcal{H}_\alpha = \sum_{\langle i,j \rangle \in \alpha} h_{i,j}$ ,  $\alpha \in (l, r, u, d)$ , est une somme de termes qui commutent entre eux. Comme pour le *Simple Update*, l'opé-

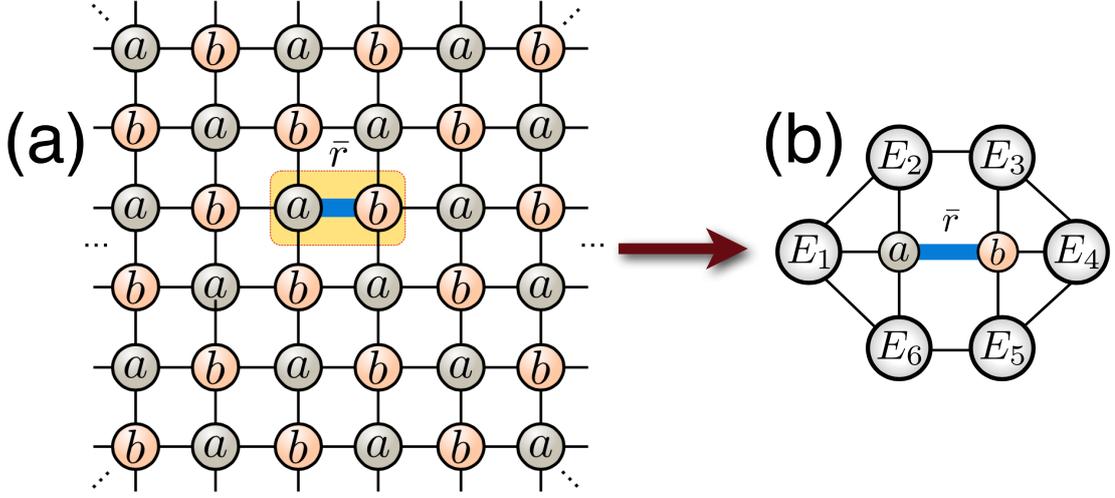


FIGURE A.2 – Environnement infini d’un PEPS de cellule élémentaire  $A$  et  $B$ . L’environnement du lien  $\bar{r}$  (a) est simulé par un ensemble de tenseurs interconnectés  $E_1, E_2, E_3, E_4, E_5$  et  $E_6$  de dimension  $D_c$  (b). [figure tirée de la référence [81]]

rateur d’évolution  $e^{-\tau\mathcal{H}}$  peut se réécrire

$$\begin{aligned} e^{-\tau\mathcal{H}} &= (e^{-\delta\tau\mathcal{H}})^N \\ &\simeq (e^{-\delta\tau\mathcal{H}_l} e^{-\delta\tau\mathcal{H}_r} e^{-\delta\tau\mathcal{H}_u} e^{-\delta\tau\mathcal{H}_d})^N \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

avec  $N \in \mathbb{N}$  est le nombre de pas de taille  $\delta\tau = \tau/N$  nécessaire à la convergence de l’état. Nous pouvons maintenant définir l’opérateur d’évolution  $\mathcal{U}(\delta\tau)$  que nous allons utiliser pour optimiser les tenseurs.

$$e^{-\tau\mathcal{H}} \simeq \prod_{\langle i,j \rangle \in l} (e^{-\delta\tau h_{i,j}})^N \prod_{\langle i,j \rangle \in r} (e^{-\delta\tau h_{i,j}})^N \prod_{\langle i,j \rangle \in u} (e^{-\delta\tau h_{i,j}})^N \prod_{\langle i,j \rangle \in d} (e^{-\delta\tau h_{i,j}})^N \quad (\text{A.7})$$

L’opérateur  $\mathcal{U}$  agissant sur les sites  $i$  et  $j$  est alors défini comme  $\mathcal{U}(\delta\tau) = e^{-\delta\tau h_{i,j}}$ .

Le principe de la méthode *Full Update* consiste à appliquer  $N$  fois l’opérateur  $\mathcal{U}$  sur chaque lien d’un état de départ  $A$  et  $B$ , jusqu’à convergence de l’état, où pour chaque pas  $\delta\tau$ , nous minimisons la distance au carré  $\mathcal{D}(\tilde{A}, \tilde{B}) = \|\Psi_{\tilde{A}, \tilde{B}} - \mathcal{U}(\delta\tau)|\Psi_{A,B}\rangle\|^2$  où  $\tilde{A}$  et  $\tilde{B}$  sont les nouveaux tenseurs. Par la suite, nous nous focaliserons sur l’optimisation selon le lien  $\bar{r}$  et nous poserons  $|\Psi_{A',B'}\rangle = \mathcal{U}(\delta\tau)|\Psi_{A,B}\rangle$ , où  $A'$  et  $B'$  sont de nouveaux tenseurs pour lesquels la dimension les connectant selon les liens  $\bar{r}$  est  $dD^3$  et desquels nous voulons nous rapprocher par les tenseurs  $\tilde{A}$  et  $\tilde{B}$ . La distance au carré s’écrit alors

$$\mathcal{D}(\tilde{A}, \tilde{B}) = \langle \Psi_{A',B'} | \Psi_{A',B'} \rangle + \langle \Psi_{\tilde{A}, \tilde{B}} | \Psi_{\tilde{A}, \tilde{B}} \rangle - \langle \Psi_{\tilde{A}, \tilde{B}} | \Psi_{A',B'} \rangle - \langle \Psi_{A',B'} | \Psi_{\tilde{A}, \tilde{B}} \rangle \quad (\text{A.8})$$

Afin de minimiser cette distance, nous optimisons successivement le tenseur  $\tilde{A}$ , puis le tenseur  $\tilde{B}$  et réitérons cette procédure jusqu’à ce que les deux tenseurs

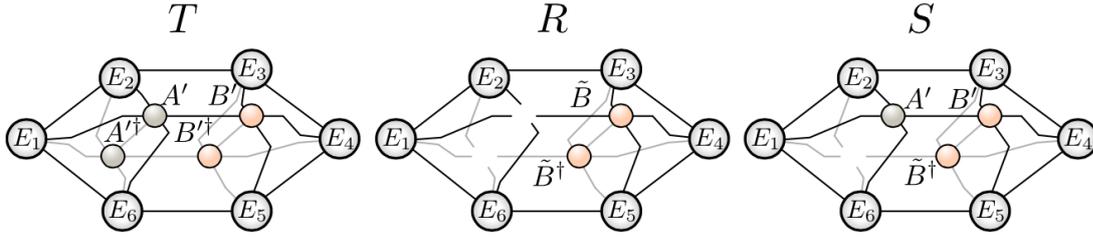


FIGURE A.3 – Termes  $R$ ,  $S$  et  $T$  utilisés pour l'optimisation *Full Update*. [figure tirée de la référence [81]]

convergent. Cependant, ceci n'est qu'une étape et ne constitue pas une itération entière. Avant de définir ce qu'est une itération, voyons la méthode pour optimiser un tenseur, le tenseur  $\tilde{A}$  dans notre exemple :

1. Choisir un tenseur initial  $\tilde{B}$  et le garder constant. Afin de trouver  $\tilde{A}$ , nous réécrivons l'équation (A.8) sous une forme quadratique en  $A$

$$\mathcal{D}(\tilde{A}, \tilde{A}^\dagger) = \tilde{A}^\dagger R \tilde{A} - \tilde{A}^\dagger S - S^\dagger \tilde{A} + T \quad (\text{A.9})$$

Dans cette équation, le tenseur  $\tilde{A}$  est restructuré en vecteur de dimension  $dD^4$ ,  $R$  est une matrice,  $S$  un vecteur et  $T$  un scalaire écrits à partir de l'environnement et des tenseurs  $A'$  et  $B'$  comme indiqué sur la figure A.5.

2. Nous trouvons le minimum de  $\mathcal{D}(\tilde{A}, \tilde{A}^\dagger)$  de l'équation (A.9), en fonction de  $\tilde{A}^\dagger$ , qui est donné par  $\tilde{A} = R^{-1}S$ .
3. L'étape suivante consiste à fixer  $\tilde{A}$  et à répéter les étapes 1 et 2 pour le tenseur  $\tilde{B}$ .

Une fois que nous avons répété les trois étapes décrites et que la distance  $\mathcal{D}(\tilde{A}, \tilde{B})$  a été minimisée (nous pouvons calculer la distance  $\mathcal{D}(\tilde{A}, \tilde{B})$  à chaque itération afin de vérifier la convergence), nous effectuons la même optimisation sur les trois autres liens  $\bar{l}$ ,  $\bar{u}$  et  $\bar{d}$ . Tout ceci constitue alors une itération complète. Afin de converger vers un point fixe proche de l'état fondamental, nous devons répéter cette itération  $N$  fois.

Les étapes décrites plus haut sont basées sur la résolution d'un système de  $dD^4$  équations linéaires. Cependant, il existe une manière simple de ramener ces étapes à la résolution d'un système de  $\chi dD$  équations linéaires où  $\chi = \min(D^3, dD)$ . Si  $\chi = D^3$ , il n'y a pas de gain par rapport à la version précédente. En revanche, et c'est le cas dans la quasi-totalité des systèmes étudiés,  $\chi = dD$ , ce qui réduit le nombre d'équations par un facteur  $d/D^2$ . Pour cela, nous décomposons les tenseurs  $A$  et  $B$  à l'aide d'une décomposition en valeurs singulières en réécrivant  $A$  et  $B$  comme des matrices  $A_{(u,l,d),(m,r)} = A_{l,r,u,d}^m$  et  $B_{(m,l),(u,r,d)} = B_{l,r,u,d}^m$  :

$$A_{l,r,u,d}^m = \sum_{k=1}^{\chi} U_{(u,l,d),k}^A \lambda_k^A V_{k,(m,r)}^{A^\dagger} \quad (\text{A.10})$$

$$B_{l,r,u,d}^m = \sum_{k=1}^{\chi} U_{(m,l),k}^B \lambda_k^B V_{k,(u,r,d)}^{B^\dagger} \quad (\text{A.11})$$

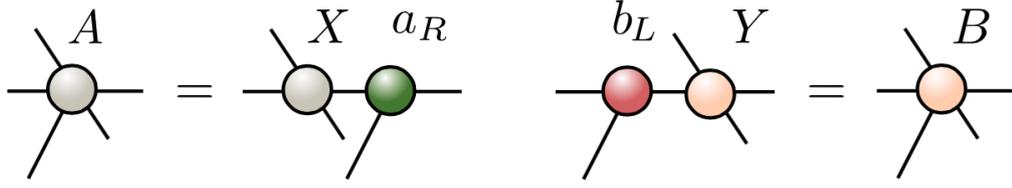


FIGURE A.4 – Décomposition des tenseurs  $A$  et  $B$  pour l'optimisation *Full Update* amélioré. [figure tirée de la référence [81]]

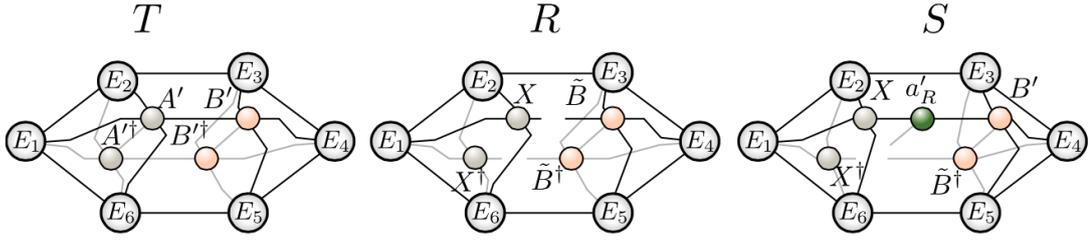


FIGURE A.5 – Termes  $R$ ,  $S$  et  $T$  utilisés pour l'optimisation *Full Update*, utilisant la décomposition des tenseurs  $A$  et  $B$ . [figure tirée de la référence [81]]

où  $U^{(A,B)}$  et  $V^{(A,B)}$  sont des matrices unitaires rectangulaires de dimension  $D^3 \times \chi$  pour  $U^A$  et  $V^B$  et  $dD \times \chi$  pour  $V^A$  et  $U^B$ , et  $\lambda^{(A,B)}$  sont des matrices diagonales contenant les valeurs singulières. Nous définissons les tenseurs  $X$  et  $Y$  de dimension  $D^3 \chi$  et les tenseurs  $a_R$  et  $b_L$  de dimension  $dD \chi$  (voir figure A.4) tels que

$$X_{l,r,u,d} = U_{(u,l,d),r}^A \quad (\text{A.12})$$

$$(a_R)_{l,r}^m = \sum_{k=1}^{\chi} \lambda_k^A V_{l,(m,r)}^{A\dagger} \quad (\text{A.13})$$

$$Y_{l,r,u,d} = V_{l,(u,r,d)}^{B\dagger} \quad (\text{A.14})$$

$$(b_L)_{l,r}^m = \sum_{k=1}^{\chi} U_{(m,l),r}^B \lambda_k^B \quad (\text{A.15})$$

Le nouvel algorithme suit alors les mêmes étapes que précédemment et la distance au carré à minimiser lorsque l'on fixe  $\tilde{b}_L$  devient

$$\mathcal{D}(\tilde{a}_R, \tilde{a}_R^\dagger) = \tilde{a}_R^\dagger R \tilde{a}_R - \tilde{a}_R^\dagger S - S^\dagger \tilde{a}_R + T \quad (\text{A.16})$$

pour laquelle la nouvelle matrice  $R$  et le nouveau vecteur  $S$  sont présentés sur la figure A.5.

Tout ceci constitue la méthode *Full Update* comme elle a été développée. Le lecteur intéressé par une lecture approfondie pourra se référer aux articles proposant des méthodes efficaces afin de diminuer le temps de calcul comme le recyclage de l'environnement [81], ou encore des méthodes permettant de fixer la jauge des tenseurs, d'abord développées pour des PEPS finis [59], puis dans le cas des iPEPS [81].



# Annexe B

## Calcul de l'environnement : méthode *Corner Transfer Matrix Renormalization Group* sur réseau carré

La méthode *Corner Transfer Matrix Renormalization Group* (CTMRG) pour les systèmes quantiques [79] est basée sur les matrices de transfert d'angle, *Corner Transfer Matrix* (CTM), développé par Baxter [6, 7] puis adapté par Nishino et Okunishi pour la méthode CTMRG [70, 71]. Nous allons voir dans cette annexe l'algorithme CTMRG pour le cas d'un réseau carré homogène infini. Chaque site sera labellisé par deux nombres entiers  $\vec{r} = (x, y)$  et représenté par un espace vectoriel  $\mathbb{V}$  de dimension  $d$ . Le PEPS infini (iPEPS) est alors caractérisé par un seul tenseur  $A_{l,r,u,d}^s$  (fig.B.1 (a)) répété sur l'ensemble du réseau, où  $s \in [1, d]$  et les indices de liens  $l, r, u$  et  $d$  ont pour dimension la dimension de lien  $D$ . Tout d'abord, nous définissons le tenseur réduit  $a$  (voir figure B.1 (b))

$$a_{\bar{l},\bar{r},\bar{u},\bar{d}} = \sum_s A_{l,r,u,d}^s \cdot (A_{l',r',u',d'}^s)^* \quad (\text{B.1})$$

où  $\bar{\alpha} = (\alpha, \alpha')$  et  $\alpha = l, r, u, d$ . Le produit scalaire  $\langle \Psi | \Psi \rangle$  est alors un réseau  $\mathcal{E}$  qui est construit à partir d'une infinité de copies de  $a$  (figure B.1 (c)). L'environnement du site  $\vec{r}$ ,  $\mathcal{E}^{[\vec{r}]} = \partial \mathcal{E} / \partial a^{[\vec{r}]}$ , est obtenu en enlevant le tenseur  $a$  du site  $\vec{r}$  (voir figure B.1 (d)). Le but de l'algorithme CTMRG est de trouver une approximation  $\mathcal{G}^{[\vec{r}]}$  de  $\mathcal{E}^{[\vec{r}]}$  en trouvant le point fixe des quatre CTM. Cet environnement effectif est donné par un petit réseau de tenseurs  $\mathcal{G}^{[\vec{r}]} = \{C_1, T_1, C_2, T_2, C_3, T_3, C_4, T_4\}$  où les tenseurs  $C_1, C_2, C_3$  et  $C_4$  sont les CTM, les tenseurs  $T_1$  et  $T_3$  sont les tenseurs de demi-ligne et les tenseurs  $T_2$  et  $T_4$  sont les tenseurs de demi-colonne de dimension de lien  $D_c$  (figure B.1 (e)).

Dans l'algorithme CTMRG que nous allons présenter, les huit tenseurs de  $\mathcal{G}^{[\vec{r}]}$  sont optimisés par un succession de quatre extensions, suivant les quatres directions de l'espace, à savoir gauche, droite, haut et bas. Pour une extension vers la gauche, l'optimisation se définit par trois étapes, présentées sur la figure B.2 :

1. *Insertion* : Insérer une nouvelle colonne construite à partir des tenseurs  $T_1$ ,

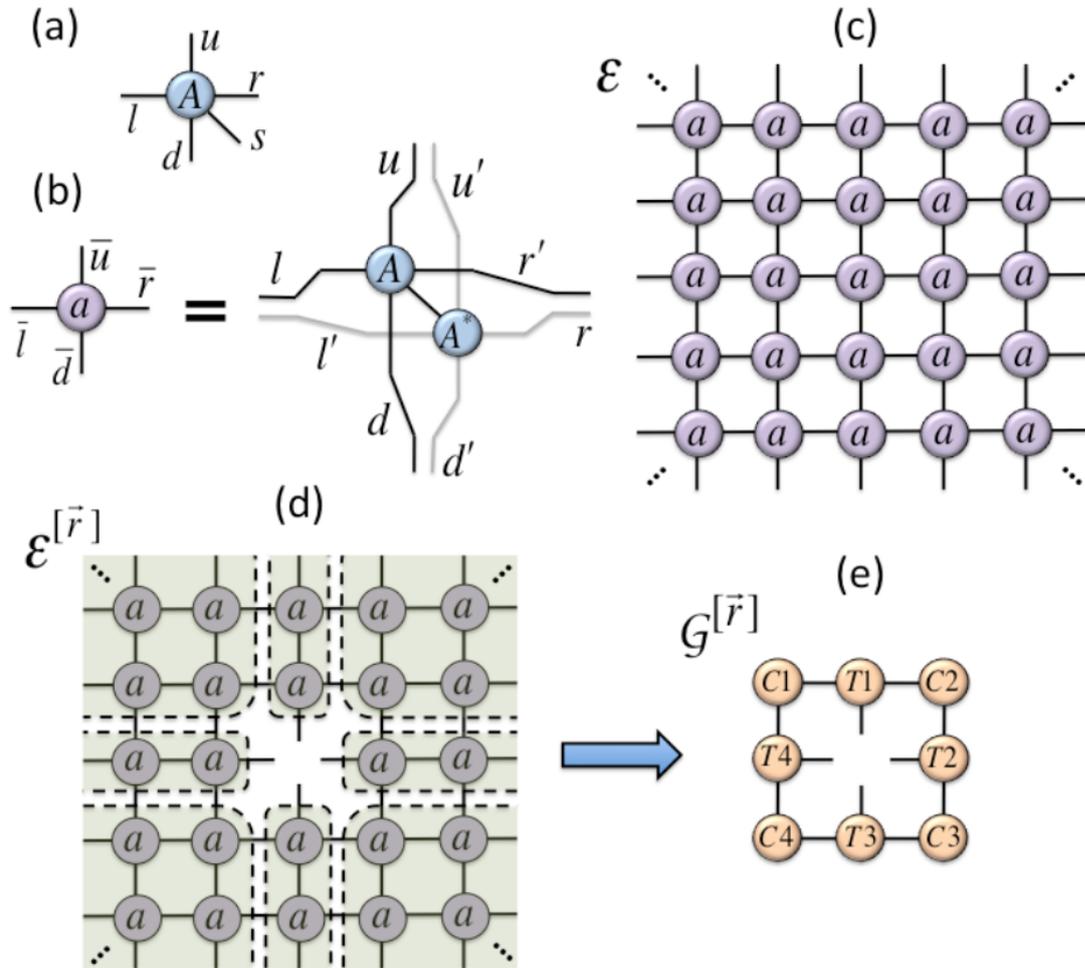


FIGURE B.1 – Tenseur  $A$  caractérisant un iPEPS homogène (a). Tenseur réduit  $a$  calculé à partir de la contraction du tenseur  $A$  avec son complexe conjugué  $A^*$  (b). Le produit scalaire  $\langle \Psi | \Psi \rangle$  est un réseau  $\mathcal{E}$  construit à partir d'une infinité de copies de  $a$  (c). L'environnement du site  $\bar{r}$ ,  $\mathcal{E}^{[\bar{r}]}$  (d) peut être décrit par un environnement effectif  $\mathcal{G}^{[\bar{r}]}$  (e). [figure tirée de la référence [79]]

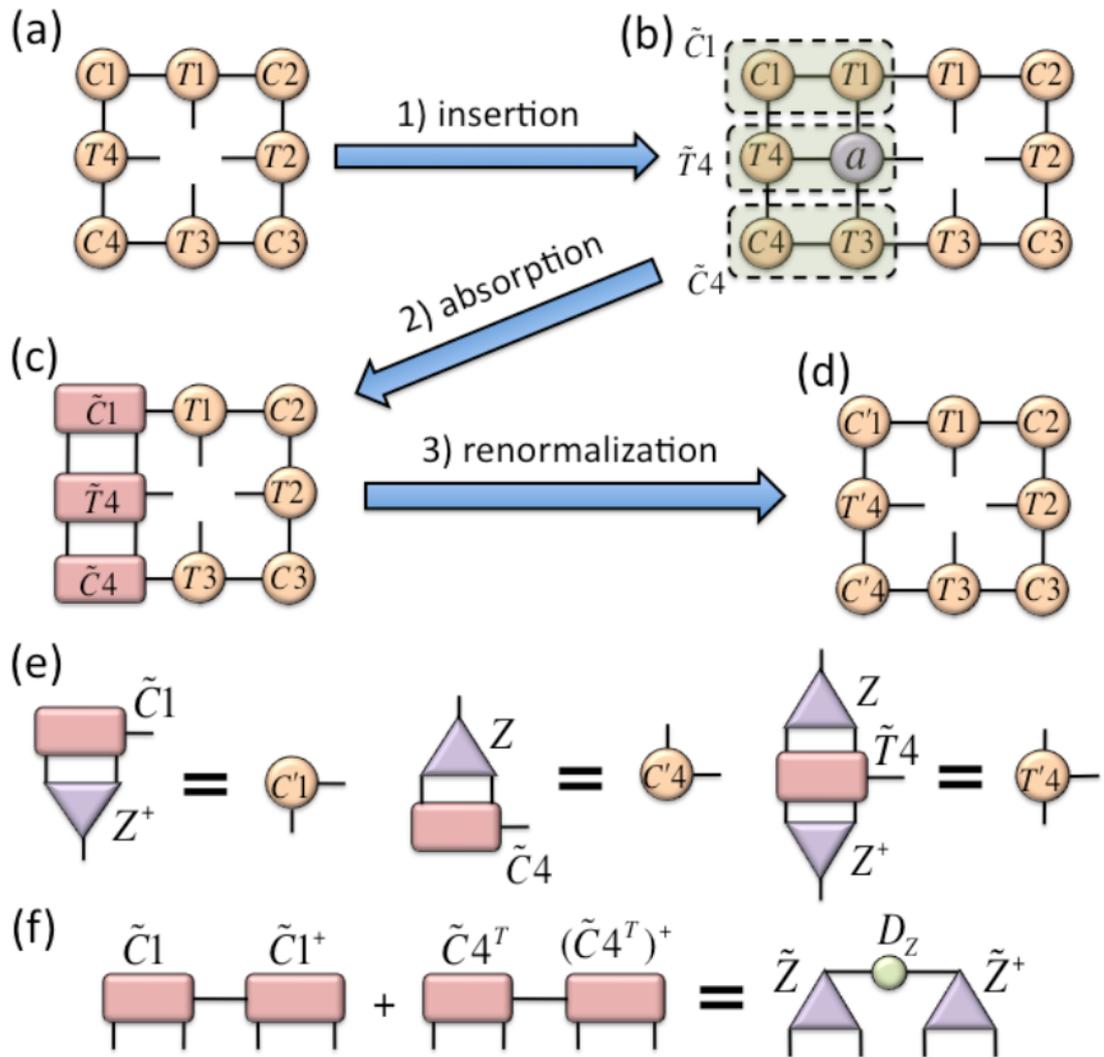


FIGURE B.2 – Calcul CTMRG pour un réseau homogène de tenseur  $a$ . [figure tirée de la référence [79]]

$a$  et  $T_3$  (figure B.2 (b)).

2. *Absorption* : Contracter les tenseurs  $C_1$  et  $T_1$ , les tenseurs  $C_4$  et  $T_3$  et les tenseurs  $T_4$  et  $a$  pour former les nouveaux tenseurs  $\tilde{C}_1$ ,  $\tilde{C}_4$  et  $\tilde{T}_4$  (figure B.2 (c)).
3. *Renormalisation* : Tronquer l'indice vertical des tenseurs  $\tilde{C}_1$ ,  $\tilde{C}_4$  et  $\tilde{T}_4$  en insérant une isométrie  $Z$ ,  $Z^\dagger Z = \mathbb{I}$ . Cela produit de nouveaux CTM  $C'_1 = Z^\dagger \tilde{C}_1$ ,  $C'_4 = \tilde{C}_4 Z$  et le nouveau tenseur de demi-colonne  $T'_4$ , comme présentés sur les figures B.2 (d) et B.2 (e).

Un choix approprié d'isométrie  $Z$  lors de l'étape de renormalisation est très important. Une possibilité est de prendre la décomposition en valeurs propres du produit des quatre matrices  $\tilde{C}_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$  et  $\tilde{C}_4$ . Une autre possibilité est d'utiliser la décomposition en valeurs propres de  $\tilde{C}_1 \tilde{C}_1^\dagger + \tilde{C}_4^\dagger \tilde{C}_4 = \tilde{Z} D_Z \tilde{Z}^\dagger$  (figure B.2 (f)) et d'utiliser l'isométrie  $Z$  correspondant aux  $D_c$  plus grandes valeurs propres. Après cette extension, le nouvel environnement du site  $\vec{r}$  devient  $\{C'_1, T_1, C_2, T_2, C_3, T_3, C'_4, T'_4\}$ . Il suffit d'opérer la même extension dans les trois autres directions de l'espace pour effectuer une itération de la méthode CTMRG. Nous pouvons utiliser le calcul d'une observable quelconque  $\langle \hat{O} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$  afin de vérifier la convergence de l'environnement.

Il est à noter que l'énergie que l'on calcule n'est pas variationnelle tant que l'environnement n'a pas convergé vers un point fixe . Le lecteur intéressé par une lecture plus détaillé pourra se reporter aux références [79] et [77].

# Annexe C

## Calcul de l'environnement : approche MPS

Nous allons présenter la méthode de calcul de l'environnement utilisant une approche MPS pour le cas du réseau carré homogène, caractérisé par un tenseur  $A_{l,r,u,d}^s$  (figure C.1 (a)) et son tenseur réduit  $a_{\bar{l},\bar{r},\bar{u},\bar{d}}$  (figure C.1 (b)). Le produit scalaire  $\langle \Psi | \Psi \rangle$  du PEPS infini est obtenu en répétant le tenseur réduit  $a$  à l'infini sur tout le réseau carré. Afin de réduire le coût des calculs, nous prendrons le réseau carré incliné de  $45^\circ$  (figure C.2 (a)). L'approche MPS consiste à considérer deux bords opposés du système infini (haut et bas ici) comme des MPS infini (iMPS) de dimension physique effective  $D^2$  et de dimension de lien  $D_c$  et le tenseur réduit  $a$  comme un opérateur d'évolution de dimension  $D^4 \times D^4$ . Une fois les bords haut et bas convergés vers un point fixe, nous pouvons calculer une matrice de transfert effectif de ce système unidimensionnel et calculer les vecteurs propres dominants gauche et droit de cette matrice afin de déterminer les derniers tenseurs de l'environnement effectif.

Pour comprendre comment trouver les points fixes des iMPS effectifs, voyons l'algorithme permettant de faire évoluer un iMPS défini par des tenseurs  $\Gamma^A$  et  $\lambda^A$  sur les sites pairs et  $\Gamma^B$  et  $\lambda^B$  sur les sites impairs. L'opérateur d'évolution est alors le tenseur réduit  $a$ . L'algorithme est le suivant :

1. Calculer le tenseur  $\Theta_1$  comme indiqué sur la figure C.3 (i), de dimension de lien  $D_c$ .
2. Trouver la matrice  $V_R$  qui est le vecteur propre dominant, à gauche, de  $R$  avec pour valeur propre dominante  $\eta \in \mathbb{C}$  (supposée unique), où  $R$  est obtenue en contractant  $\Theta_1$  avec son conjugué complexe  $\Theta_1^*$  (figure C.3 (ii)). Ensuite, décomposer la matrice  $V_R$  (qui est hermitienne et définie positive) comme le carré  $V_R = XX^\dagger$ . Par exemple, si  $V_R = WDW^\dagger$  est la décomposition en valeurs propres de  $V_R$ , alors  $X = W\sqrt{D}$ .
3. Calculer le tenseur  $\Theta_2$  comme indiqué sur la figure C.3 (iii), de dimension de lien  $D_c$ .
4. Trouver la matrice  $V_L$  qui est le vecteur propre dominant, à droite, de  $L$  avec pour valeur propre dominante  $\tau \in \mathbb{C}$  (supposée unique), où  $L$  est obtenue en contractant  $\Theta_2$  avec son conjugué complexe  $\Theta_2^*$  (figure C.3 (iv)). Ensuite,

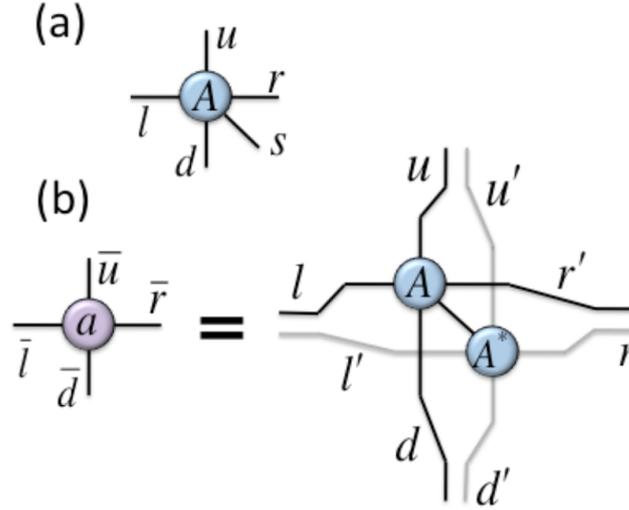


FIGURE C.1 – Tenseur  $A$  caractérisant un iPEPS homogène (a). Tenseur réduit  $a$  calculé à partir de la contraction du tenseur  $A$  avec son complexe conjugué  $A^*$  (b). [figure tirée de la référence [79]]

décomposer la matrice  $V_L$  (qui est hermitienne et définie positive) comme le carré  $V_L = Y^\dagger Y$ , de la même façon que pour la matrice  $V_R$ .

5. Calculer le tenseur  $\Theta$  comme indiqué sur la figure C.3 (v), de dimension de lien  $D_c$ .
6. Introduire deux identités  $\mathbb{I} = (Y^T)^{-1} Y^T$  et  $\mathbb{I} = X X^{-1}$  sur les indices de lien du tenseur  $\Theta$  comme indiqué sur la figure C.3 (vi). Ensuite, calculer la décomposition en valeurs singulières  $Y^T \lambda^B X = U \lambda^{B'} V$ , menant à de nouveaux coefficients de Schmidt  $\lambda^{B'}$ . Normaliser les valeurs singulières de telle façon que  $\sum_i (\lambda_i^{B'})^2 = 1$ .
7. Calculer le tenseur  $\Sigma$  comme indiqué sur la figure C.3 (vii).
8. Grouper les indices de  $\Sigma$  afin de former un indice unique à gauche et un indice unique à droite et calculer la décomposition en valeurs singulières de la matrice ainsi formée (figure C.3 (iix)). Cette décomposition amène deux nouveaux tenseurs  $P$  et  $Q$  et de nouveaux coefficients de Schmidt  $\lambda^{A'}$ . Tronquer ces nouveaux coefficients en gardant les  $D_c$  (noté  $\chi$  sur la figure) plus grandes valeurs et les normaliser de telle façon que  $\sum_i (\lambda_i^{A'})^2 = 1$  (figure C.3 (iix)).
9. Les nouvelles matrices  $\Gamma^{A'}$  et  $\Gamma^{B'}$  sont obtenues comme indiqué sur la figure C.3 (ix).

Nous répétons cette procédure pour l'optimisation du lien entre les matrices  $\Gamma^B$  et  $\Gamma^A$ , ce qui correspond à une itération. Nous répétons autant d'itérations que nécessaires pour trouver les points fixes de ces matrices.

Nous pouvons utiliser cet algorithme afin de calculer les tenseurs de bords haut et bas, qui s'écrivent :

$$(E_1^{[U,D]})_{i,j}^s = \sqrt{\lambda_i^B} (\Gamma^A)_{i,j}^s \sqrt{\lambda_j^A} \quad (\text{C.1})$$

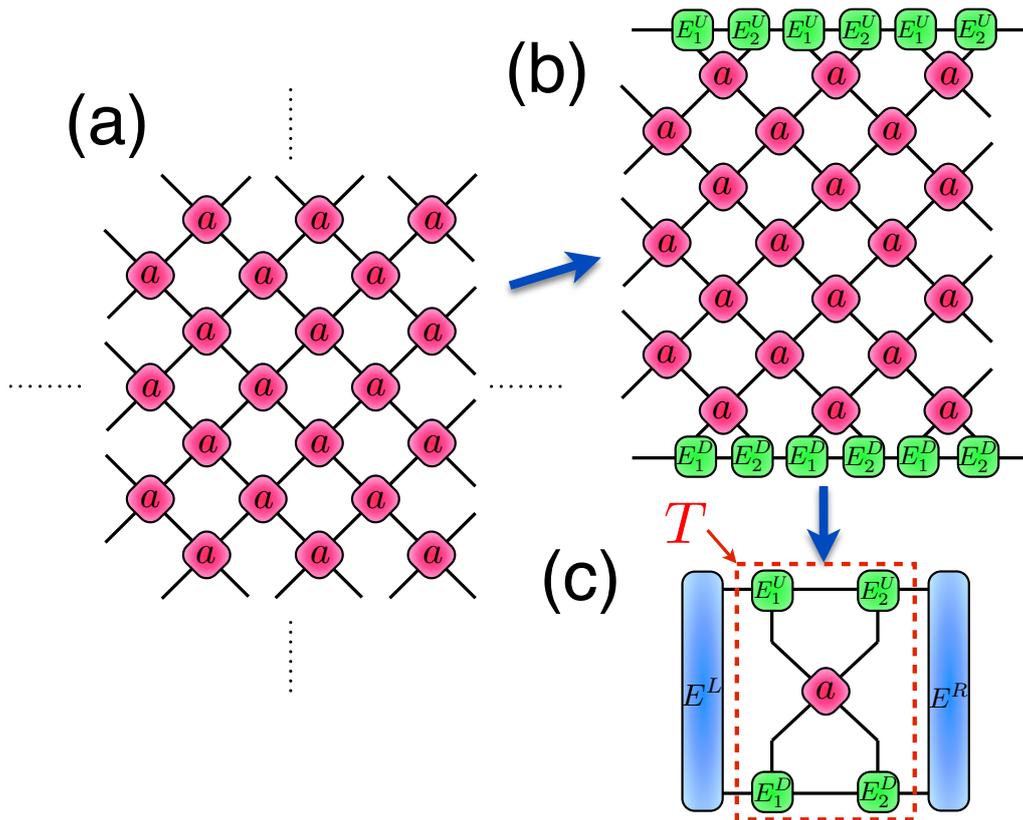


FIGURE C.2 – Calcul de l’environnement pour un PEPS infini (a) dans l’approche MPS. Les bords du haut  $E_1^U$  et  $E_2^U$  et du bas  $E_1^D$  et  $E_2^D$  sont considérés comme des iMPS tandis que le tenseur réduit  $a$  est considéré comme un opérateur s’appliquant sur deux sites du MPS effectif (b). Une fois que les MPS effectifs haut et bas ont évolué vers un point fixe, les vecteurs gauche  $E^L$  et droit  $E^R$  sont calculés afin de compléter l’environnement du tenseur réduit  $a$  (c).

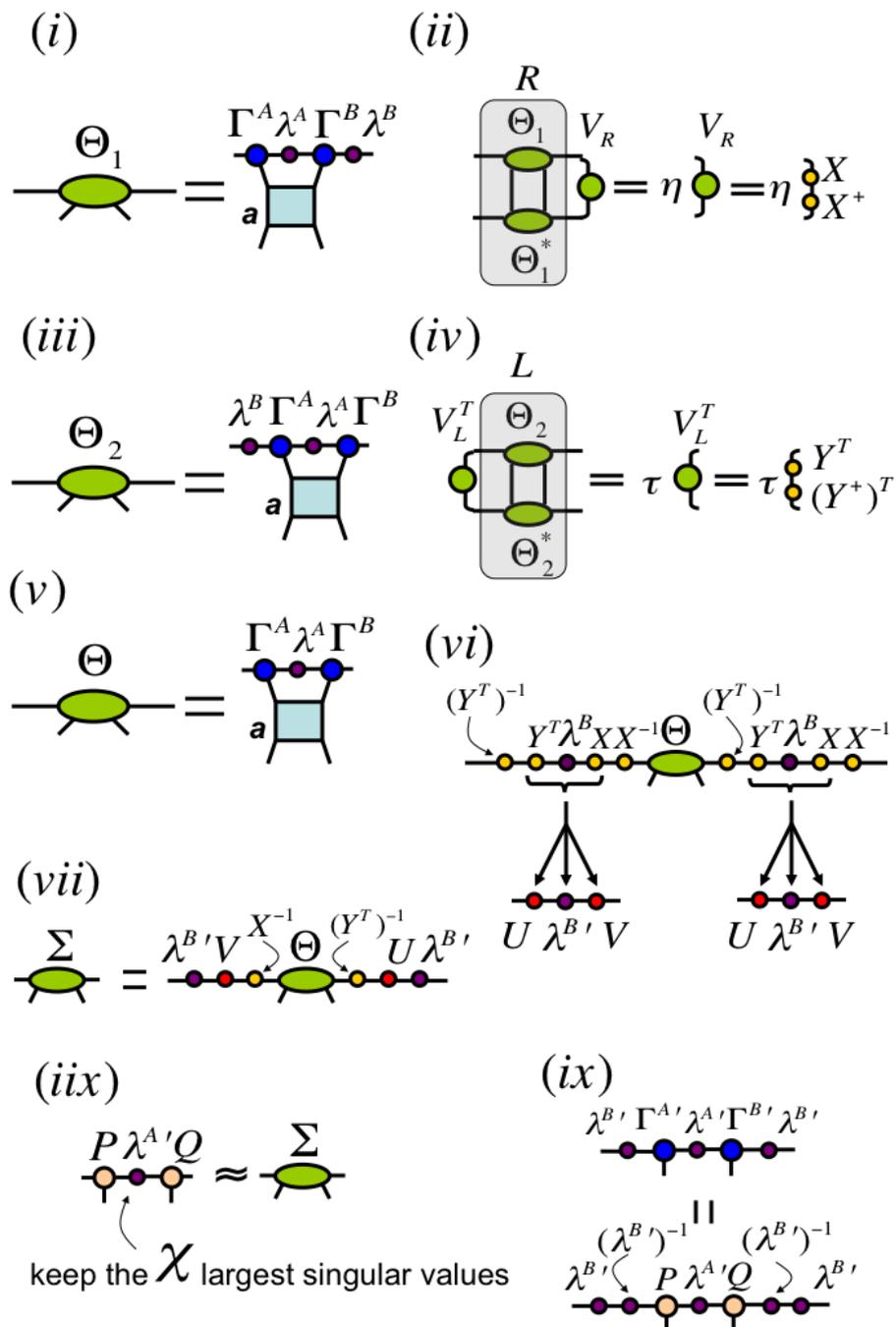


FIGURE C.3 – Algorithme iTEBD pour un MPS. Nous l'utilisons ici afin de déterminer les bords haut et bas de notre environnement

$$(E_2^{[U,D]})_{i,j}^s = \sqrt{\lambda^A_i} (\Gamma^B)_{i,j}^s \sqrt{\lambda^B_j} \quad (\text{C.2})$$

où les matrices  $\lambda^A$ ,  $\lambda^B$ ,  $\Gamma^A$  et  $\Gamma^B$  seront calculées d'une part pour le bord du haut, et d'autre part pour le bord du bas.

Une fois les tenseurs  $E_1^D$ ,  $E_2^D$ ,  $E_1^U$  et  $E_2^U$  calculés, nous pouvons calculer la matrice de transfert  $T$  à partir de ceux ci et du tenseur réduit  $a$  (figure C.2 (c)). Comme pour les iMPS (voir chapitre II section 2.2.6), les vecteurs  $E_L$  et  $E_R$  sont les vecteurs propres dominants de la matrice de transfert  $T$  à gauche et à droite, respectivement. Les six tenseurs  $E$  forment alors l'environnement de dimension interne  $D_c$ . Nous pouvons l'utiliser pour calculer la valeur moyenne d'une observable sur site. Encore une fois, nous pouvons calculer une énergie  $E(D_c)$  où seule l'énergie  $E(D_c \rightarrow \infty)$  est variationnelle.



# Bibliographie

- [1] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 59 :799–802, Aug 1987. (page 29)
- [2] P. Anderson. Resonating valence bonds : A new kind of insulator ? . *Materials Research Bulletin*, 8(2) :153 – 160, 1973. (page 55)
- [3] K. Awaga, T. Inabe, Y. Maruyama, T. Nakamura, and M. Matsumoto. Ferromagnetic and antiferromagnetic intermolecular interactions in the two-dimensional triangular lattice of the *m*-N-methylpyridinium nitronyl nitroxide cation radical. *Chemical Physics Letters*, 195(1) :21 – 24, 1992. (page 14)
- [4] K. Awaga, T. Okuno, A. Yamaguchi, M. Hasegawa, T. Inabe, Y. Maruyama, and N. Wada. Variable magnetic interactions in an organic radical system of (*m*-N-methylpyridinium  $\alpha$ -nitronyl nitroxide) $\cdot X^-$  : A possible *kagomé* antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 49 :3975–3981, Feb 1994. (page 14)
- [5] L. Balents. Spin liquids in frustrated magnets. *Nature*, 464(7286) :199–208, 03 2010. (page 8)
- [6] R. Baxter. Variational approximations for square lattice models in statistical mechanics. *Journal of Statistical Physics*, 19(5) :461–478, 1978. (page 123)
- [7] R. J. Baxter. Dimers on a Rectangular Lattice. *Journal of Mathematical Physics*, 9(4), 1968. (page 123)
- [8] F. Bert, D. Bono, P. Mendels, F. Ladieu, F. Duc, J.-C. Trombe, and P. Millet. Ground State of the Kagomé-Like  $S = 1/2$  Antiferromagnet Volborthite  $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_7(\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . *Phys. Rev. Lett.*, 95 :087203, Aug 2005. (page 11)
- [9] F. Bert, D. Bono, P. Mendels, J.-C. Trombe, P. Millet, A. Amato, C. Baines, and A. Hillier. Dilution in volborthite  $S = 1/2$  frustrated magnet : a  $\mu\text{SR}$  and NMR study. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 16(11) :S829, 2004. (page 11)
- [10] F. Bert, A. Olariu, A. Zorko, P. Mendels, J. C. Trombe, F. Duc, M. A. de Vries, A. Harrison, A. D. Hillier, J. Lord, A. Amato, and C. Baines. Frustrated magnetism in the quantum Kagome Herbertsmithite  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$

- antiferromagnet. *Journal of Physics : Conference Series*, 145(1) :012004, 2009. (page 10)
- [11] S. Capponi, O. Derzhko, A. Honecker, A. M. Läuchli, and J. Richter. Numerical study of magnetization plateaus in the spin- $\frac{1}{2}$  kagome Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 88 :144416, Oct 2013. (page 100)
- [12] H. J. Changlani and A. M. Läuchli. Trimerized ground state of the spin-1 Heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice. *Phys. Rev. B*, 91 :100407, Mar 2015. (page 88)
- [13] J. I. Cirac, D. Poilblanc, N. Schuch, and F. Verstraete. Entanglement spectrum and boundary theories with projected entangled-pair states. *Phys. Rev. B*, 83 :245134, Jun 2011. (page 51)
- [14] J. I. Cirac and F. Verstraete. Renormalization and tensor product states in spin chains and lattices. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 42(50) :504004, 2009. (page 35)
- [15] R. H. Colman, F. Bert, D. Boldrin, A. D. Hillier, P. Manuel, P. Mendels, and A. S. Wills. Spin dynamics in the  $S = \frac{1}{2}$  quantum kagome compound vesignieite,  $\text{Cu}_3\text{Ba}(\text{VO}_5\text{H})_2$ . *Phys. Rev. B*, 83 :180416, May 2011. (page 12)
- [16] P. Corboz and F. Mila. Crystals of Bound States in the Magnetization Plateaus of the Shastry-Sutherland Model. *Phys. Rev. Lett.*, 112 :147203, Apr 2014. (pages 34, 98, and 110)
- [17] A. Z. D. M. Greenberger, M. A. Horne. Going beyond Bell's Theorem . In K. M., editor, *Bell's Theorem, Quantum Theory, and Conceptions of the Universe*, pages 69–72. Kluwer, 1989. (page 49)
- [18] M. A. de Vries, K. V. Kamenev, W. A. Kockelmann, J. Sanchez-Benitez, and A. Harrison. Magnetic Ground State of an Experimental  $S = 1/2$  Kagome Antiferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 100 :157205, Apr 2008. (page 10)
- [19] S. Depenbrock, I. P. McCulloch, and U. Schollwöck. Nature of the Spin-Liquid Ground State of the  $S = 1/2$  Heisenberg Model on the Kagome Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 109 :067201, Aug 2012. (page 10)
- [20] I. Dzyaloshinsky. A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 4(4) :241 – 255, 1958. (page 9)
- [21] J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio. *Colloquium* : Area laws for the entanglement entropy. *Rev. Mod. Phys.*, 82 :277–306, Feb 2010. (page 38)
- [22] S. El Shawish, O. Cépas, and S. Miyashita. Electron spin resonance in  $S = \frac{1}{2}$  antiferromagnets at high temperature. *Phys. Rev. B*, 81 :224421, Jun 2010. (page 9)

- [23] M. Elhajal, B. Canals, and C. Lacroix. Symmetry breaking due to Dzyaloshinsky-Moriya interactions in the kagomé lattice. *Phys. Rev. B*, 66 :014422, Jul 2002. (page 9)
- [24] W. M. C. Foulkes, L. Mitas, R. J. Needs, and G. Rajagopal. Quantum Monte Carlo simulations of solids. *Rev. Mod. Phys.*, 73 :33–83, Jan 2001. (page 35)
- [25] D. E. Freedman, R. Chisnell, T. M. McQueen, Y. S. Lee, C. Payen, and D. G. Nocera. Frustrated magnetism in the  $S = 1$  kagome lattice  $\text{BaNi}_3(\text{OH})_2(\text{VO}_4)_2$ . *Chem. Commun.*, 48 :64–66, 2012. (page 20)
- [26] D. E. Freedman, T. H. Han, A. Prodi, P. Müller, Q.-Z. Huang, Y.-S. Chen, S. M. Webb, Y. S. Lee, T. M. McQueen, and D. G. Nocera. Site Specific X-ray Anomalous Dispersion of the Geometrically Frustrated Kagomé Magnet, Herbertsmithite,  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ . *Journal of the American Chemical Society*, 132(45) :16185–16190, 2010. PMID : 20964423. (page 10)
- [27] R. Ganesh, D. N. Sheng, Y.-J. Kim, and A. Paramekanti. Quantum paramagnetic ground states on the honeycomb lattice and field-induced Néel order. *Phys. Rev. B*, 83 :144414, Apr 2011. (page 64)
- [28] R. Ganesh, D. N. Sheng, Y.-J. Kim, and A. Paramekanti. Quantum paramagnetic ground states on the honeycomb lattice and field-induced Néel order. *Phys. Rev. B*, 83 :144414, Apr 2011. (page 63)
- [29] A. Garcia-Saez, V. Murg, and T.-C. Wei. Spectral gaps of Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki Hamiltonians using tensor network methods. *Phys. Rev. B*, 88 :245118, Dec 2013. (pages 63 and 82)
- [30] T. Gotohda, Y. Kugimiya, N. Hamaguchi, T. Matsushita, N. Wada, W. Fujita, and K. Awaga. Magnetic susceptibility and magnetization of slightly distorted Kagomé magnet,  $m\text{-EPYNN} \cdot \text{BF}_4$ . *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 66(8–9) :1446 – 1449, 2005. Proceedings of the {ISSP} International Symposium (ISSP-9) on Quantum Condensed System. (page 14)
- [31] O. Götze, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop, P. H. Y. Li, and J. Richter. Heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice with arbitrary spin : A higher-order coupled cluster treatment. *Phys. Rev. B*, 84 :224428, Dec 2011. (page 110)
- [32] O. Götze and J. Richter. Ground-state phase diagram of the XXZ spin- $s$  kagome antiferromagnet : A coupled-cluster study. *Phys. Rev. B*, 91 :104402, Mar 2015. (page 110)
- [33] 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 :1153–1156, Apr 1983. (page 110)

- [34] S. Hara, H. Sato, and Y. Narumi. Exotic Magnetism of Novel  $S = 1$  Kagome Lattice Antiferromagnet  $KV_3Ge_2O_9$ . *Journal of the Physical Society of Japan*, 81(7) :073707, 2012. (pages 14 and 18)
- [35] M. B. Hastings. Solving gapped Hamiltonians locally. *Phys. Rev. B*, 73 :085115, Feb 2006. (page 53)
- [36] M. B. Hastings. An area law for one-dimensional quantum systems. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2007(08) :P08024, 2007. (page 38)
- [37] J. S. Helton, K. Matan, M. P. Shores, E. A. Nytko, B. M. Bartlett, Y. Qiu, D. G. Nocera, and Y. S. Lee. Dynamic Scaling in the Susceptibility of the Spin- $\frac{1}{2}$  Kagome Lattice Antiferromagnet Herbertsmithite. *Phys. Rev. Lett.*, 104 :147201, Apr 2010. (page 10)
- [38] J. S. Helton, K. Matan, M. P. Shores, E. A. Nytko, B. M. Bartlett, Y. Yoshida, Y. Takano, A. Suslov, Y. Qiu, J.-H. Chung, D. G. Nocera, and Y. S. Lee. Spin Dynamics of the Spin-1/2 Kagome Lattice Antiferromagnet  $ZnCu_3(OH)_6Cl_2$ . *Phys. Rev. Lett.*, 98 :107204, Mar 2007. (pages 9 and 10)
- [39] C. Hotta, S. Nishimoto, and N. Shibata. Grand canonical finite size numerical approaches in one and two dimensions : Real space energy renormalization and edge state generation. *Phys. Rev. B*, 87 :115128, Mar 2013. (page 35)
- [40] C. Hotta and N. Shibata. Grand canonical finite-size numerical approaches : A route to measuring bulk properties in an applied field. *Phys. Rev. B*, 86 :041108, Jul 2012. (page 35)
- [41] T. Imai, E. A. Nytko, B. M. Bartlett, M. P. Shores, and D. G. Nocera.  $^{63}Cu$ ,  $^{35}Cl$ , and  $^1H$  NMR in the  $S = \frac{1}{2}$  Kagome Lattice  $ZnCu_3(OH)_6Cl_2$ . *Phys. Rev. Lett.*, 100 :077203, Feb 2008. (page 10)
- [42] Y. Iqbal, F. Becca, S. Sorella, and D. Poilblanc. Gapless spin-liquid phase in the kagome spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 87 :060405, Feb 2013. (page 10)
- [43] Y. Iqbal, D. Poilblanc, and F. Becca. Vanishing spin gap in a competing spin-liquid phase in the kagome Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 89 :020407, Jan 2014. (-)
- [44] Y. D. Iqbal. *Spin liquids in quantum antiferromagnetic models on two dimensional frustrated lattices*. Theses, Université Paul Sabatier - Toulouse III, Sept. 2012. Très honorable avec les félicitations du jury. (page 10)
- [45] H. Ishikawa, M. Yoshida, K. Nawa, M. Jeong, S. Krämer, M. Horvatić, C. Berthier, M. Takigawa, M. Akaki, A. Miyake, M. Tokunaga, K. Kindo, J. Yamaura, Y. Okamoto, and Z. Hiroi. One-Third Magnetization Plateau

- with a Preceding Novel Phase in Volborthite. *Phys. Rev. Lett.*, 114 :227202, Jun 2015. (pages 11, 12, and 13)
- [46] O. Janson, J. Richter, P. Sindzingre, and H. Rosner. Coupled frustrated quantum spin- $\frac{1}{2}$  chains with orbital order in volborthite  $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_7(\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . *Phys. Rev. B*, 82 :104434, Sep 2010. (page 11)
- [47] H. C. Jiang, Z. Y. Weng, and T. Xiang. Accurate Determination of Tensor Network State of Quantum Lattice Models in Two Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 101 :090603, Aug 2008. (page 54)
- [48] J. Jordan, R. Orús, G. Vidal, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Classical Simulation of Infinite-Size Quantum Lattice Systems in Two Spatial Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 101 :250602, Dec 2008. (page 51)
- [49] R. Kaltenbaek, J. Lavoie, B. Zeng, S. D. Bartlett, and K. J. Resch. Optical one-way quantum computing with a simulated valence-bond solid. *Nat Phys*, 6(11) :850–854, 11 2010. (page 51)
- [50] E. Kermarrec, P. Mendels, F. Bert, R. H. Colman, A. S. Wills, P. Strobel, P. Bonville, A. Hillier, and A. Amato. Spin-liquid ground state in the frustrated kagome antiferromagnet  $\text{MgCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ . *Phys. Rev. B*, 84 :100401, Sep 2011. (page 9)
- [51] G. Lawes, M. Kenzelmann, N. Rogado, K. H. Kim, G. A. Jorge, R. J. Cava, A. Aharony, O. Entin-Wohlman, A. B. Harris, T. Yildirim, Q. Z. Huang, S. Park, C. Broholm, and A. P. Ramirez. Competing Magnetic Phases on a Kagomé Staircase. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :247201, Dec 2004. (pages 14 and 19)
- [52] P. A. Lee. An End to the Drought of Quantum Spin Liquids. *Science*, 321(5894) :1306–1307, 2008. (page 8)
- [53] M. Levin and C. P. Nave. Tensor Renormalization Group Approach to Two-Dimensional Classical Lattice Models. *Phys. Rev. Lett.*, 99 :120601, Sep 2007. (page 51)
- [54] H. Li and F. D. M. Haldane. Entanglement Spectrum as a Generalization of Entanglement Entropy : Identification of Topological Order in Non-Abelian Fractional Quantum Hall Effect States. *Phys. Rev. Lett.*, 101 :010504, Jul 2008. (page 51)
- [55] W. Li, A. Weichselbaum, J. von Delft, and H.-H. Tu. Hexagon-singlet solid ansatz for the spin-1 kagome antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 91 :224414, Jun 2015. (page 88)
- [56] W. Li, S. Yang, M. Cheng, Z.-X. Liu, and H.-H. Tu. Topology and criticality in the resonating Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki loop spin liquid states. *Phys. Rev. B*, 89 :174411, May 2014. (page 61)

- [57] T. Liu, W. Li, A. Weichselbaum, J. von Delft, and G. Su. Simplex valence-bond crystal in the spin-1 kagome Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 91 :060403, Feb 2015. (page 88)
- [58] 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 :9301–9307, May 1990. (page 35)
- [59] M. Lubasch, J. I. Cirac, and M.-C. Bañuls. Algorithms for finite projected entangled pair states. *Phys. Rev. B*, 90 :064425, Aug 2014. (page 121)
- [60] C. K. Majumdar and D. K. Ghosh. On Next Nearest Neighbor Interaction in Linear Chain. I. *Journal of Mathematical Physics*, 1969. (pages 29 and 50)
- [61] 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, Sep 2013. (page 34)
- [62] T. Matsushita, N. Hamaguchi, K. Shimizu, N. Wada, W. Fujita, K. Awaga, A. Yamaguchi, and H. Ishimoto. Quantum Spin State and Magnetization Plateaus in an  $S=1$  Kagomé Heisenberg Antiferromagnet. *Journal of the Physical Society of Japan*, 79(9) :093701, 2010. (pages 14, 15, and 16)
- [63] P. Mendels and F. Bert. Quantum Kagome Antiferromagnet  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ . *Journal of the Physical Society of Japan*, 79(1) :011001, 2010. (page 8)
- [64] P. Mendels, F. Bert, M. A. de Vries, A. Olariu, A. Harrison, F. Duc, J. C. Trombe, J. S. Lord, A. Amato, and C. Baines. Quantum Magnetism in the Paratacamite Family : Towards an Ideal Kagomé Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 98 :077204, Feb 2007. (page 9)
- [65] W. Miller, M. Christensen, A. Khan, N. Sharma, R. B. Macquart, M. Avdeev, G. J. McIntyre, R. O. Piltz, and C. D. Ling.  $\text{YCa}_3(\text{VO})_3(\text{BO}_3)_4$  : A Kagomé Compound Based on Vanadium(III) with a Highly Frustrated Ground State. *Chemistry of Materials*, 23(5) :1315–1322, 2011. (pages 14 and 17)
- [66] T. Moriya. Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism. *Phys. Rev.*, 120 :91–98, Oct 1960. (page 9)
- [67] H. Nakano and T. Sakai. Magnetization Process of the Spin- $S$  Kagome-Lattice Heisenberg Antiferromagnet. *Journal of the Physical Society of Japan*, 84(6) :063705, 2015. (pages 105 and 106)
- [68] S. Nishimoto and M. Nakamura. Non-Symmetry-Breaking Ground State of the  $S = 1$  Heisenberg Model on the Kagome lattice. *arXiv preprint arXiv :1409.5870*, 2014. (page 88)

- [69] S. Nishimoto, N. Shibata, and C. Hotta. Controlling frustrated liquids and solids with an applied field in a kagome Heisenberg antiferromagnet. *Nat Commun*, 4, 08 2013. (pages 100 and 110)
- [70] T. Nishino and K. Okunishi. Corner Transfer Matrix Renormalization Group Method. *Journal of the Physical Society of Japan*, 65(4) :891–894, 1996. (pages 51 and 123)
- [71] T. Nishino and K. Okunishi. Corner Transfer Matrix Algorithm for Classical Renormalization Group. *Journal of the Physical Society of Japan*, 66(10) :3040–3047, 1997. (pages 51 and 123)
- [72] M. Nishiyama, T. Morimoto, S. Maegawa, T. Inami, and Y. Oka. Magnetic ordering and fluctuation in Kagome lattice anti-ferromagnets, Fe and Cr jarosites. *Canadian Journal of Physics*, 79(11-12) :1511–1516, 2001. (pages 20 and 21)
- [73] Y. Okamoto, M. Tokunaga, H. Yoshida, A. Matsuo, K. Kindo, and Z. Hiroi. Magnetization plateaus of the spin- $\frac{1}{2}$  kagome antiferromagnets volborthite and vesignieite. *Phys. Rev. B*, 83 :180407, May 2011. (pages 11 and 12)
- [74] S. Okubo, H. Ohta, K. Hazuki, T. Sakurai, N. Kobayashi, and Z. Hiroi. High-field {ESR} study of kagome-like substance  $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_7(\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . *Physica B : Condensed Matter*, 294–295 :75 – 78, 2001. Proceedings of the Sixth International Symposium on Research in High Magnetic Fields. (page 11)
- [75] K. Okuta, S. Hara, H. Sato, Y. Narumi, and K. Kindo. Observation of 1/3 Magnetization-Plateau-Like Anomaly in  $S=3/2$  Perfect Kagomé Lattice Antiferromagnet  $\text{KCr}_3(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_2$  (Cr-jarosite). *Journal of the Physical Society of Japan*, 80(6) :063703, 2011. (page 20)
- [76] A. Olariu, P. Mendels, F. Bert, F. Duc, J. C. Trombe, M. A. de Vries, and A. Harrison.  $^{17}\text{O}$  NMR Study of the Intrinsic Magnetic Susceptibility and Spin Dynamics of the Quantum Kagome Antiferromagnet  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ . *Phys. Rev. Lett.*, 100 :087202, Feb 2008. (page 10)
- [77] R. Orús. Exploring corner transfer matrices and corner tensors for the classical simulation of quantum lattice systems. *Phys. Rev. B*, 85 :205117, May 2012. (pages 51 and 126)
- [78] R. Orús. A practical introduction to tensor networks : Matrix product states and projected entangled pair states . *Annals of Physics*, 349 :117 – 158, 2014. (pages 35, 52, 53, and 54)
- [79] R. Orús and G. Vidal. Simulation of two-dimensional quantum systems on an infinite lattice revisited : Corner transfer matrix for tensor contraction. *Phys. Rev. B*, 80 :094403, Sep 2009. (pages 51, 123, 124, 125, 126, and 128)

- [80] M. Oshikawa, M. Yamanaka, and I. Affleck. Magnetization Plateaus in Spin Chains : “Haldane Gap” for Half-Integer Spins. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :1984–1987, Mar 1997. (page 110)
- [81] H. N. Phien, J. A. Bengua, H. D. Tuan, P. Corboz, and R. Orús. Infinite projected entangled pair states algorithm improved : Fast full update and gauge fixing. *Phys. Rev. B*, 92 :035142, Jul 2015. (pages 67, 118, 119, 120, and 121)
- [82] T. Picot and D. Poilblanc. Nematic and supernematic phases in kagome quantum antiferromagnets under the influence of a magnetic field. *Phys. Rev. B*, 91 :064415, Feb 2015. (page 74)
- [83] T. Picot, M. Ziegler, R. Orús, and D. Poilblanc. Spin- $S$  Kagome quantum antiferromagnets in a field with tensor networks. (page 94)
- [84] D. Poilblanc, J. I. Cirac, and N. Schuch. Chiral topological spin liquids with projected entangled pair states. *Phys. Rev. B*, 91 :224431, Jun 2015. (page 61)
- [85] D. Poilblanc, P. Corboz, N. Schuch, and J. I. Cirac. Resonating-valence-bond superconductors with fermionic projected entangled pair states. *Phys. Rev. B*, 89 :241106, Jun 2014. (page 61)
- [86] D. Poilblanc, N. Schuch, and J. I. Cirac. Field-induced superfluids and Bose liquids in projected entangled pair states. *Phys. Rev. B*, 88 :144414, Oct 2013. (pages 61, 64, and 65)
- [87] D. Poilblanc, N. Schuch, D. Pérez-García, and J. I. Cirac. Topological and entanglement properties of resonating valence bond wave functions. *Phys. Rev. B*, 86 :014404, Jul 2012. (page 58)
- [88] E. Polizzi, F. Mila, and E. S. Sørensen.  $S = \frac{1}{2}$  chain-boundary excitations in the Haldane phase of one-dimensional  $S = 1$  systems. *Phys. Rev. B*, 58 :2407–2410, Aug 1998. (page 110)
- [89] J. A. Quilliam, F. Bert, R. H. Colman, D. Boldrin, A. S. Wills, and P. Mendels. Ground state and intrinsic susceptibility of the kagome antiferromagnet vesignieite as seen by  $^{51}\text{V}$  NMR. *Phys. Rev. B*, 84 :180401, Nov 2011. (page 12)
- [90] R. Raussendorf. Quantum computing : Shaking up ground states. *Nat Phys*, 6(11) :840–841, 11 2010. (page 51)
- [91] N. Schuch, D. Poilblanc, J. I. Cirac, and D. Pérez-García. Resonating valence bond states in the PEPS formalism. *Phys. Rev. B*, 86 :115108, Sep 2012. (pages 58 and 61)
- [92] N. Schuch, M. M. Wolf, F. Verstraete, and J. I. Cirac. Computational Complexity of Projected Entangled Pair States. *Phys. Rev. Lett.*, 98 :140506, Apr 2007. (page 53)

- [93] 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, Apr 2002. (pages 106 and 107)
- [94] M. P. Shores, E. A. Nytko, B. M. Bartlett, , and D. G. Nocera\*. A Structurally Perfect  $S = 1/2$  Kagomé Antiferromagnet. *Journal of the American Chemical Society*, 127(39) :13462–13463, 2005. PMID : 16190686. (page 8)
- [95] R. R. P. Singh and D. A. Huse. Ground state of the spin-1/2 kagome-lattice Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 76 :180407, Nov 2007. (page 10)
- [96] R. R. P. Singh and D. A. Huse. Triplet and singlet excitations in the valence bond crystal phase of the kagome lattice Heisenberg model. *Phys. Rev. B*, 77 :144415, Apr 2008. (page 10)
- [97] M. Takano, T. Shinjo, and T. Takada. On the Spin Arrangement in “Kagome” Lattice of Antiferromagnetic  $\text{KFe}_3(\text{OH})_6(\text{SO}_4)_2$ . *Journal of the Physical Society of Japan*, 30(4) :1049–1053, 1971. (page 20)
- [98] D. F. B. ten Haaf, H. J. M. van Bemmelen, J. M. J. van Leeuwen, W. van Saarloos, and D. M. Ceperley. Proof for an upper bound in fixed-node Monte Carlo for lattice fermions. *Phys. Rev. B*, 51 :13039–13045, May 1995. (page 35)
- [99] M. Troyer and U.-J. Wiese. Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations. *Phys. Rev. Lett.*, 94 :170201, May 2005. (page 35)
- [100] F. Verstraete and J. I. Cirac. Renormalization algorithms for quantum-many body systems in two and higher dimensions. *arXiv preprint cond-mat/0407066*, 2004. (page 51)
- [101] F. Verstraete and J. I. Cirac. Valence-bond states for quantum computation. *Phys. Rev. A*, 70 :060302, Dec 2004. (page 51)
- [102] F. Verstraete, M. M. Wolf, D. Perez-Garcia, and J. I. Cirac. Criticality, the Area Law, and the Computational Power of Projected Entangled Pair States. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :220601, Jun 2006. (page 53)
- [103] N. Wada, T. Kobayashi, H. Yano, T. Okuno, A. Yamaguchi, and K. Awaga. Observation of Spin-Gap State in Two-Dimensional Spin-1 Kagomé Antiferromagnet  $m\text{-MPYNN} \cdot \text{BF}_4$ . *Journal of the Physical Society of Japan*, 66(4) :961–964, 1997. (page 14)
- [104] L. Wang, D. Poilblanc, Z.-C. Gu, X.-G. Wen, and F. Verstraete. Constructing a Gapless Spin-Liquid State for the Spin-1/2  $J_1 - J_2$  Heisenberg Model on a Square Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 111 :037202, Jul 2013. (page 61)

- [105] G. H. Wannier. Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net. *Phys. Rev.*, 79 :357–364, Jul 1950. (page 25)
- [106] S. R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, 69 :2863–2866, Nov 1992. (page 35)
- [107] M. M. Wolf, F. Verstraete, M. B. Hastings, and J. I. Cirac. Area Laws in Quantum Systems : Mutual Information and Correlations. *Phys. Rev. Lett.*, 100 :070502, Feb 2008. (page 53)
- [108] D. Wulferding, P. Lemmens, P. Scheib, J. Röder, P. Mendels, S. Chu, T. Han, and Y. S. Lee. Interplay of thermal and quantum spin fluctuations in the kagome lattice compound herbertsmithite. *Phys. Rev. B*, 82 :144412, Oct 2010. (page 10)
- [109] Z. Y. Xie, J. Chen, M. P. Qin, J. W. Zhu, L. P. Yang, and T. Xiang. Coarse-graining renormalization by higher-order singular value decomposition. *Phys. Rev. B*, 86 :045139, Jul 2012. (page 51)
- [110] Z. Y. Xie, J. Chen, J. F. Yu, X. Kong, B. Normand, and T. Xiang. Tensor Renormalization of Quantum Many-Body Systems Using Projected Entangled Simplex States. *Phys. Rev. X*, 4 :011025, Feb 2014. (pages 58, 71, and 109)
- [111] Z. Y. Xie, H. C. Jiang, Q. N. Chen, Z. Y. Weng, and T. Xiang. Second Renormalization of Tensor-Network States. *Phys. Rev. Lett.*, 103 :160601, Oct 2009. (page 51)
- [112] S. Yan, D. A. Huse, and S. R. White. Spin-Liquid Ground State of the  $S = 1/2$  Kagome Heisenberg Antiferromagnet. *Science*, 332(6034) :1173–1176, 2011. (page 10)
- [113] M. Yoshida, M. Takigawa, H. Yoshida, Y. Okamoto, and Z. Hiroi. Phase Diagram and Spin Dynamics in Volborthite with a Distorted Kagome Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 103 :077207, Aug 2009. (page 11)
- [114] H. H. Zhao, Z. Y. Xie, Q. N. Chen, Z. C. Wei, J. W. Cai, and T. Xiang. Renormalization of tensor-network states. *Phys. Rev. B*, 81 :174411, May 2010. (page 51)
- [115] M. E. Zhitomirsky. Real-space perturbation theory for frustrated magnets : application to magnetization plateaus. *Journal of Physics : Conference Series*, 592(1) :012110, 2015. (pages 105 and 106)
- [116] A. Zorko, F. Bert, A. Ozarowski, J. van Tol, D. Boldrin, A. S. Wills, and P. Mendels. Dzyaloshinsky-Moriya interaction in vesignieite : A route to freezing in a quantum kagome antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 88 :144419, Oct 2013. (pages 12 and 13)

- [117] A. Zorko, S. Nellutla, J. van Tol, L. C. Brunel, F. Bert, F. Duc, J.-C. Trombe, M. A. de Vries, A. Harrison, and P. Mendels. Dzyaloshinsky-Moriya Anisotropy in the Spin-1/2 Kagome Compound  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ . *Phys. Rev. Lett.*, 101 :026405, Jul 2008. (page 9)
- [118] A. Zorko, S. Nellutla, J. van Tol, L. C. Brunel, F. Bert, F. Duc, J.-C. Trombe, and P. Mendels. Electron spin resonance investigation of the spin-1/2 kagomé antiferromagnet  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ . *Journal of Physics : Conference Series*, 145(1) :012014, 2009. (page 9)



# Liste des publications

- [1] T. Picot and D. Poilblanc, “Nematic and supernematic phases in kagome quantum antiferromagnets under the influence of a magnetic field”, *Physical Review B* **91**, 064415 (2015).
- [2] T. Picot, M. Ziegler, R. Orús, and D. Poilblanc, “Spin- $S$  Kagome quantum antiferromagnets in a field with tensor networks”, *Physical Review B* **93**, 060407(R) (2016).
- [3] A. Kshetrimayum, T. Picot, R. Orús, and D. Poilblanc, “The spin-1/2 Kagome XXZ in a field : competition between lattice nematic and solid orders”, arXiv : 1608.00437 (2016).



## **Systèmes de spins quantiques frustrés sous champ magnétique étudiés par méthodes Tensor Network**

La frustration magnétique est une propriété physique faisant l'objet de très nombreuses études. Elle intervient lorsque que la géométrie du système ne permet pas la minimisation simultanée des énergies locales, menant alors à une dégénérescence macroscopique. Présent dans la nature au travers de différents minéraux, dont la célèbre herbertsmithite, le réseau kagomé antiferromagnétique est un parfait exemple de système bidimensionnel frustré. Lorsqu'à cette propriété s'ajoute un champ magnétique extérieur tendant à polariser le matériau, la compétition de ces deux phénomènes donne naissance à des processus d'aimantation exotiques, tels que les plateaux d'aimantation pour lesquels la susceptibilité magnétique est nulle. Nous avons étudié le réseau kagomé avec le hamiltonien AKLT de spin 2 et le hamiltonien de Heisenberg pour les spins 1/2, 1, 3/2 et 2 sous champ magnétique. Ce travail a été effectué en utilisant des méthodes numériques appelées méthodes Tensor Network. Tout d'abord développées dans le cadre de la théorie quantique de l'information, ces méthodes, basées sur le principe d'intrication, ont très vite été utilisées en matière condensée. Elles ont permis l'étude de systèmes bidimensionnels frustrés, jusqu'alors limitée aux méthodes numériques déjà connues telles que les méthodes Monte Carlo ou encore DMRG. Nous avons été en mesure de produire les diagrammes de phases, d'une grande richesse, pour tous les modèles cités, en fonction du champ magnétique.

*Mots-Clés : Frustration, Kagomé, Tensor Network, Plateaux d'aimantation*

## **Frustrated quantum spin systems under magnetic field studied by Tensor Network methods**

Magnetic frustration is a physical property that is the topic of numerous studies. It occurs when the system geometry does not permit simultaneous minimization of local energies, which leads to a macroscopic degeneracy. Present in nature through various minerals, including the famous herbertsmithite, the antiferromagnetic kagome lattice is a perfect example of two-dimensional frustrated system. When an external magnetic field tending to polarized the material is added to this property, the competition of these two phenomena give rise to exotic magnetization processes, such as magnetization plateaux for which the magnetic susceptibility is zero. We studied the kagome lattice with the AKLT Hamiltonian of spin 2 and the Heisenberg Hamiltonian for spin 1/2, 1, 3/2 and 2 in a magnetic field. This work was performed using numerical methods called Tensor Network methods. First developed in the context of quantum information theory, these methods, based on the principle of entanglement, were quickly used in condensed matter. They allowed the study of two-dimensional frustrated systems previously limited to the already known numerical methods such as Monte Carlo or DMRG methods. We were able to produce rich phase diagrams for all models listed, depending on the magnetic field.

*Keywords : Frustration, Kagome, Tensor Network, Magnetization Plateaux*

