



HAL
open science

Interaction entre un électron et un skyrmion dans un aimant présentant un ordre Néel, et étude combinée de familles de liquides de spin classiques

Naïmo Davier

► **To cite this version:**

Naïmo Davier. Interaction entre un électron et un skyrmion dans un aimant présentant un ordre Néel, et étude combinée de familles de liquides de spin classiques. Physique Générale [physics.gen-ph]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2023. Français. NNT : 2023TOU30118 . tel-04415190

HAL Id: tel-04415190

<https://theses.hal.science/tel-04415190>

Submitted on 24 Jan 2024

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

Présentée et soutenue par
Naïmo DAVIER

Le 11 juillet 2023

**Interaction entre un électron et un skyrmion dans un aimant
présentant un ordre Néel, et étude combinée de familles de
liquides de spin classiques.**

Ecole doctorale : **SDM - SCIENCES DE LA MATIERE - Toulouse**

Spécialité : **Physique de la Matière**

Unité de recherche :
LPT - Laboratoire de Physique Théorique

Thèse dirigée par
Pierre PUJOL et Revaz RAMAZASHVILI

Jury

M. Frédéric MILA, Rapporteur
M. Peter HOLDSWORTH, Rapporteur
M. Nicolas COMBE, Examineur
M. Pascal SIMON, Examineur
Mme Virginie SIMONET, Examinatrice
M. Sylvain CAPPONI, Examineur
M. Pierre PUJOL, Directeur de thèse
M. Revaz RAMAZASHVILI, Co-directeur de thèse

Remerciements

Je tiens à remercier mes deux directeurs de thèse Pierre et Revaz pour leur encadrement et leur disponibilité durant ces trois dernières années. Les sujets traités ne sont pas ceux qui ont été initialement envisagés, les réponses apportées ne sont pas non plus celles qui étaient forcément attendues, comme souvent il me semble dans la recherche. Ce fut donc une superbe aventure, que je suis très heureux d'avoir partagé avec eux. Je les remercie tous les deux notamment pour les nombreuses discussions physiques que l'on a pu avoir, ce qui m'a permis d'avoir une compréhension à la fois plus profonde et plus subtile des différentes notions et méthodes que l'on a pu aborder durant notre collaboration.

Je remercie chaleureusement les rapporteurs qui ont accepté de lire ce manuscrit sans doute un peu long, mais qui je l'espère saura les intéresser. Je remercie de même tous les autres membres du jury qui me permettent de conclure cette belle aventure.

Je remercie également les autres doctorants du labo qui ont su apporter parfois de la distraction, parfois un interlocuteur attentif aux questions qui ont pu me traverser l'esprit, mais qui toujours, dans un esprit de collaboration et de camaraderie ont su trouver les mots justes, bien que parfois plus approximatifs, et souvent maladroits, pour répondre tant à des problématiques qu'à des interrogations dira-t-on plus existentielles tout en étant bien moins fondamentales que la physique que nous traitons, au jour le jour, dans le vain espoir d'y apporter une contribution, tout en profitant du voyage, qui bien que souvent mouvementé, se révèle toujours chantant, apportant une éclaircie délicate sur les rivages brumeux de la connaissance, qui bien qu'insaisissable, nous apporte un but, un objectif, qu'il est si plaisant de poursuivre, surtout entouré de gens, tantôt sympathiques, tantôt de moins bonne humeur, mais toujours là, présents, parfois même le lundi, répondant à l'appel majestueux du savoir, immuable donc, auquel nous ne pouvons nous refuser à répondre.

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| I Étude de l'interaction électron-skyrmion dans un aimant présentant un ordre Néel | 5 |
| 1 Skyrmions, électrons et mémoire | 6 |
| 1.1 Le concept général de skyrmion | 6 |
| 1.2 Les skyrmions magnétiques | 8 |
| 1.3 L'utilisation de skyrmions pour des mémoires | 11 |
| 1.4 Les skyrmions antiferromagnétiques | 12 |
| 1.5 Travaux antérieurs voisins | 14 |
| 2 Un électron dans un aimant de Néel | 17 |
| 2.1 Construction du hamiltonien effectif | 18 |
| 2.2 Champ de jauge | 27 |
| 3 Belavin-Polyakov aux basses énergies | 32 |
| 3.1 Définitions et propriétés | 33 |
| 3.2 Résolution du hamiltonien de basse énergie | 36 |
| 3.3 Disparition des états liés aux petits rayons | 38 |
| 4 Belavin-Polyakov, états liés profonds | 49 |
| 4.1 Symétrie particule trou | 50 |
| 4.2 Point de croisement | 51 |
| 4.3 Au delà du point de croisement | 54 |
| 4.4 Argument de non croisement | 58 |
| 4.5 Théorie des perturbations pour les croisements | 60 |
| 4.6 Image physique | 65 |
| 4.7 Cas d'un skyrmion de charge quelconque | 66 |
| 5 Profil en paroi de domaine | 71 |
| 5.1 Définition et propriétés du profil | 72 |
| 5.2 États liés peu profonds | 75 |
| 5.3 États liés profonds | 79 |

| | | |
|------------|---|------------|
| 5.4 | Paroi de domaine rectiligne | 83 |
| 6 | Coût énergétique total d'un skyrmion | 88 |
| 6.1 | Position du problème | 89 |
| 6.2 | Coût énergétique d'un skyrmion de Belavin-Polyakov | 91 |
| 6.3 | Coût énergétique d'un skyrmion en paroi de domaine | 98 |
| 6.4 | Coût énergétique d'une paroi de domaine | 101 |
| 6.A | Calcul du coût énergétique des états liés quasi-classiques | 104 |
| 7 | Discussion | 110 |
| 7.1 | Condition nécessaire pour considérer un skyrmion comme statique | 110 |
| 7.2 | Transitions optiques | 113 |
| 7.3 | Profil de skyrmion favorisé | 119 |
| 7.4 | Densité de charge effective | 121 |
| 7.5 | Synthèse et ouverture | 122 |
| | | |
| II | Étude combinée de familles de liquides de spin classiques | |
| 128 | | |
| 8 | Liquides de spin classiques | 129 |
| 8.1 | Présentation générale | 129 |
| 8.2 | Modèles usuels | 132 |
| 8.3 | Ordre par le désordre | 134 |
| 9 | Méthodes et théories utilisées | 137 |
| 9.1 | Approximation de Luttinger Tisza | 137 |
| 9.2 | Lois de Gauss et liquides de spin algébriques | 140 |
| 9.3 | Simulations de Monte Carlo | 144 |
| 10 | Hamiltonien sur plaquette et vecteur de contrainte | 146 |
| 10.1 | Le Hamiltonien sur plaquette | 146 |
| 10.2 | Vecteur de contrainte | 148 |
| 10.3 | Tenseurs de Gauss émergent | 155 |
| 11 | Le damier généralisé | 161 |
| 11.1 | Propriétés du vecteur de contrainte | 162 |
| 11.2 | Approximation de Luttinger-Tisza | 163 |
| 11.3 | Points de pincement de haut rang | 165 |
| 11.4 | Analyse topologique du vecteur de contrainte | 169 |
| 11.5 | Facteur de structure et chaleur spécifique | 171 |
| 11.6 | Loi de Gauss | 175 |
| 11.7 | Lignes de dégénérescence | 178 |

| | |
|---|------------|
| 12 Le réseau de Kagomé vu comme composé de triangles | 186 |
| 12.1 Propriétés du vecteur de contrainte | 187 |
| 12.2 Approximation de Luttinger-Tisza | 189 |
| 12.3 Simulations Monte Carlo | 196 |
| 12.4 Loi de Gauss | 200 |
| 12.5 Lignes de dégénérescence | 202 |
| 12.6 Point multicritique | 206 |
| 13 Le réseau de kagomé vu comme composé d'hexagones | 210 |
| 13.1 Propriétés du vecteur de contrainte | 211 |
| 13.2 Approximation de Luttinger Tisza | 212 |
| 13.3 Simulations Monte Carlo | 213 |
| 13.4 Construction des lois de Gauss | 217 |
| 14 Discussion et perspectives | 224 |

Première partie

Étude de l'interaction électron-skyrmion dans un aimant présentant un ordre Néel

1

Skyrmions, électrons et mémoire

Contenu du chapitre

| | | |
|-------|--|----|
| 1.1 | Le concept général de skyrmion | 6 |
| 1.2 | Les skyrmions magnétiques | 8 |
| 1.3 | L'utilisation de skyrmions pour des mémoires | 11 |
| 1.4 | Les skyrmions antiferromagnétiques | 12 |
| 1.5 | Travaux antérieurs voisins | 14 |
| 1.5.1 | Interaction électron-skyrmion ferromagnétique | 14 |
| 1.5.2 | Interaction d'un électron avec une texture antiferromagnétique | 15 |

1.1 Le concept général de skyrmion

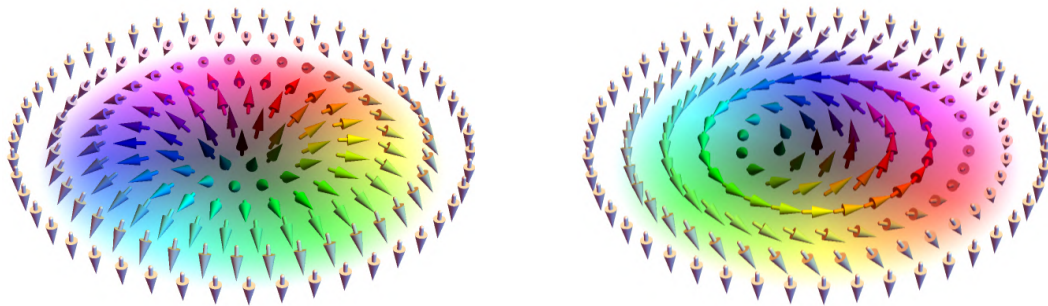


FIGURE 1.1 – Deux types de skyrmion, le skyrmion de Néel à gauche ressemble à un hérisson, tandis que le skyrmion de Bloch sur la droite a plus une allure de spirale.

Les skyrmions sont des objets fascinants, notamment pour leur évidente esthétique, pouvant ressembler à une spirale comme à un hérisson, tel que le présente la figure 1.1. Mais avant d'aller plus loin commençons par faire une description de cet objet

tenant son nom de Tony Skyrme[1, 2], l'ayant introduit dans le contexte de la physique des particules. Ces objets, se comportant de manière similaire à des particules, apparaissent sous différentes formes dans de nombreux domaines tels que l'étude de l'effet Hall quantique, la physique des particules, la théorie des cordes, les cristaux liquides ou encore les condensats de Bose-Einstein[3]. Ils interviennent notamment sous la forme de solitons[4] dans le cadre du magnétisme, comme nous allons le voir plus en détail dans le présent manuscrit.

Ces objets peuvent être décrits par un champ vectoriel normé $\mathbf{n}(x, y)$ vivant dans un espace bidimensionnel. Grâce à leur haute symétrie ce champ peut s'exprimer naturellement en coordonnées sphériques comme

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

L'angle orbital θ a la particularité de ne dépendre que de la distance $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ au centre du skyrmion, pris ici comme origine du plan. On a notamment, par convention¹,

$$\theta(0) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \theta(r) = \pi, \quad (1.2)$$

imposant donc que le champ \mathbf{n} pointe vers le haut en son centre, et vers le bas à l'infini, comme illustré sur la figure 1.1. L'angle azimutal ne dépend quant à lui que de la coordonnée angulaire du plan $\alpha = \arctan \frac{y}{x}$ selon $\phi \equiv Q\alpha + \gamma$. Le second paramètre, γ , est appelé l'hélicité, il définit la manière dont le champ se tord en s'éloignant de son centre. Pour $\gamma = 0$, le champ s'enroulera autour du vecteur angulaire $\mathbf{e}_\alpha = (-\sin \alpha, \cos \alpha)^t$, comme représenté sur la gauche de la figure 1.1, formant une sorte de hérisson. On a alors un skyrmion qui est dit de type Néel, par analogie avec les parois de domaines magnétiques qui présentent le même type de structure. Dans le cas $\gamma = \frac{\pi}{2}$, le champ \mathbf{n} s'enroulera cette fois autour du vecteur radial $\mathbf{e}_r = (\cos \alpha, \sin \alpha)^t$, formant plutôt une spirale comme représenté sur la droite de la figure 1.1. On appelle ces skyrmions des skyrmions de Bloch, là encore par analogie avec les parois de domaines magnétiques.

Pour comprendre le second paramètre, Q , appelé charge topologique, il faut regarder un skyrmion comme étant plutôt défini sur la sphère \mathbb{S}^2 . La définition dans le plan présentée plus haut peut en effet être vue comme la projection stéréographique du champ \mathbf{n} défini sur la sphère, associant le pôle nord de la sphère avec l'origine du plan, et le pôle sud avec la limite $r \rightarrow \infty$. Une représentation de cette cartographie $\mathbb{S}^2 \leftrightarrow \mathbb{R}^2$ est proposée sur la figure 1.2. On y présente quatre types de skyrmions, représentés dans le plan \mathbb{R}^2 sur la première ligne, et sur la sphère \mathbb{S}^2 sur la seconde ligne. Dans cette seconde représentation la charge Q apparaît naturellement comme le nombre de fois où le champ \mathbf{n} s'enroule autour de la sphère. On comprend ainsi que cette charge est

1. L'autre convention possible consiste à inverser les deux limites.

de nature topologique, et indexe le secteur topologique dans lequel se trouve le champ vectoriel \mathbf{n} allant de \mathbb{S}^2 dans \mathbb{R}^3 . Cette charge se calcule explicitement selon

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int d^2 \mathbf{n} \cdot (\partial_x \mathbf{n} \times \partial_y \mathbf{n}) = -\frac{1}{2} \int_0^\infty dr \sin \theta \frac{d\theta}{dr} \cdot \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \frac{d\phi}{d\alpha}, \quad (1.3)$$

où la seconde égalité peut être démontrée en exprimant le champ \mathbf{n} en coordonnées sphériques[3]. La première intégrale, appelée polarité, vaut nécessairement

$$p = -\frac{1}{2} \int_0^\infty dr \sin \theta \frac{d\theta}{dr} = -\frac{1}{2} [\cos \theta]_0^\infty = \pm 1 \quad (1.4)$$

selon la convention choisie, elle vaut notamment 1 si on fait le choix (1.2). La deuxième intégrale vaut quant à elle

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \frac{d\phi}{d\alpha} = Q \quad (1.5)$$

suivant la définition adoptée plus haut pour $\phi(\alpha)$. Pour que le champ $\mathbf{n}(r, \alpha)$ soit monovalué on doit avoir $\mathbf{n}(r, \alpha + 2\pi) = \mathbf{n}(r, \alpha)$, ce qui impose que la charge topologique Q est nécessairement un entier, qui peut néanmoins être négatif. La figure 1.2 donne par exemple les illustrations de skyrmions de charge $Q = -1$ et $Q = 2$. Si il y a plusieurs skyrmions dans le plan, l'intégrale (1.3) donne la somme des charges des skyrmions présents dans la surface intégrée. Si tous les skyrmions sont de même nature alors dans ce cas on pourra parler de nombre de skyrmions, en divisant l'intégrale par la charge des skyrmions en présence. Cette dernière proposition permet de comprendre pourquoi l'intégrande peut parfois être appelée densité de skyrmions, plutôt que densité de charge.

Cette définition insinue à tort qu'un skyrmion est nécessairement hautement symétrique. En réalité ce qui caractérise vraiment la présence d'un skyrmion de charge Q est l'équation (1.3) qui ne dépend pas de la structure interne du skyrmion, mais compte seulement le nombre de fois où le champ vectoriel \mathbf{n} s'enroule autour de la sphère lorsqu'on parcourt le plan. La charge apparaît ainsi comme un invariant topologique, quantité robuste qui ne dépend pas des propriétés locales du champ.

1.2 Les skyrmions magnétiques

Concentrons nous maintenant sur les skyrmions magnétiques, qui sont ceux qui vont tout particulièrement nous intéresser par la suite. Dans le cas d'un aimant il est naturel de définir une aimantation locale $\mathbf{M}(\mathbf{r})$. On parlera alors de skyrmion lorsque le champ normalisé

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) \equiv \frac{\mathbf{M}(\mathbf{r})}{M_s} \quad (1.6)$$

satisfait les conditions évoquées précédemment, avec M_s l'aimantation de saturation. Dans le cas où le système est bidimensionnel, les définitions précédentes s'appliquent directement. Dans le cas tridimensionnel on pourra visualiser les skyrmions comme des

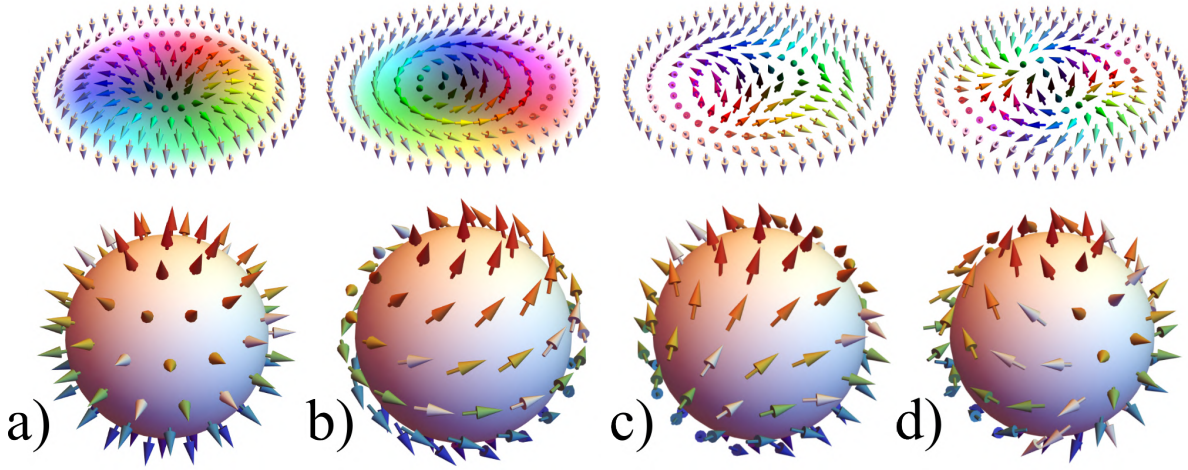


FIGURE 1.2 – Différents types de skyrmions, représentés dans le plan sur la première ligne et sur la sphère pour la seconde ligne. On a en **a)** un skyrmion de type Néel de charge 1, suivi en **b)** d'un skyrmion de Bloch de charge 1, lui même suivi par **c)** un skyrmion de type Néel ayant une charge $Q = -1$, on termine à droite par **d)** un skyrmion de Néel ayant une charge $Q = 2$.

objets définis dans chaque plan de coupe, s'étendant selon la troisième direction comme une ligne (ou un tube) de skyrmions[3].

Voilà une définition fort commode, mais il est légitime de se demander si des skyrmions peuvent se former spontanément au sein d'un aimant, et si oui comment. La réponse est oui, c'est possible. Pour savoir comment, il faut regarder de plus près la fonctionnelle énergie des systèmes permettant l'émergence de telles structures, afin de comprendre quelles sont les interactions nécessaires à l'émergence de tels objets. Cette fonctionnelle peut s'écrire comme²

$$\mathcal{H}[\mathbf{m}] = \int d^2r \left[A \partial_i \mathbf{m} \cdot \partial_i \mathbf{m} + K(1 - m_z^2) + Hm_z + De_{DM} \right], \quad (1.7)$$

où une somme sur les indices répétés est sous entendue pour le premier terme, comme ce sera le cas pour la suite du manuscrit. Le premier terme est un terme d'élasticité représentant la limite continue d'un modèle sur réseau avec un couplage entre moments magnétiques \mathbf{S}_i de la forme Heisenberg ferromagnétique

$$\mathcal{H}_{\text{elas}} \sim \frac{1}{2} \tilde{A} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.8)$$

avec la somme se faisant généralement sur les premiers voisins et $\tilde{A} \sim a^2 A$. Lorsque

2. Dans le cas d'un système tridimensionnel on pourra alors voir \mathcal{H} comme une densité linéique d'énergie.

seul ce terme élastique est présent alors on peut montrer[5] qu'au secteur topologique³ indexé par la charge Q est associé un minimum d'énergie $4\pi A Q$, qui est atteint pour un profil de skyrmion dit de Belavin-Polyakov, qui sera discuté plus en détail au chapitre 3.

Le second terme de la fonctionnelle (1.7) est un terme d'anisotropie favorisant ici une aimantation selon l'axe z , avec un poids énergétique décrit par la constante K ayant la dimension d'une énergie surfacique. Le troisième est simplement un terme d'interaction avec un champ magnétique extérieur H , dirigé ici lui aussi selon l'axe z . Le dernier terme correspond à une interaction de type Dzyaloshinskii–Moriya, interaction chirale s'exprimant sur réseau sous la forme

$$\mathcal{H}_D = \sum \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j), \quad (1.9)$$

avec \mathbf{D}_{ij} un tenseur antisymétrique, dont la structure dépend du matériau considéré. Cette interaction, due à des effets spin-orbitaux, est l'interaction qui favorise des configurations non colinéaires telles que les skyrmions. Cette interaction peut se traduire de différentes manières dans la limite du continu selon le matériau considéré. On observe généralement des termes de la forme

$$e_{DM} = \varepsilon_{ijk} m_i \partial_k m_j \quad (1.10)$$

dans le coeur de matériaux, et des termes du genre

$$e_{DM} = \epsilon_{ij} \mathbf{e}_i \cdot (\partial_i \mathbf{m} \times \mathbf{m}) \quad (1.11)$$

aux interfaces[6, 3], avec ε_{ijk} et ϵ_{ij} des tenseurs complètement antisymétriques. Dans les deux cas on a le produit d'une composante de l'aimantation avec la dérivée première d'une autre composante, impliquant que la constante D soit une énergie linéique. Il est pertinent de réécrire l'énergie (1.7) en renormalisant l'échelle de longueur selon l'épaisseur de paroi $l_w = \sqrt{A/K}$ en prenant $\tilde{r} = r/l_w$. Cela mène à

$$\begin{aligned} \mathcal{H}[\mathbf{m}] &= \int d^2 \tilde{r} \left[\frac{A}{2} (\tilde{\nabla} \cdot \mathbf{m})^2 + K l_w^2 (1 - m_z^2) + l_w^2 H m_z + D l_w \tilde{e}_{DM} \right] \\ &= A \int d\tilde{r}^2 \left[(\tilde{\nabla} \cdot \mathbf{m})^2 + (1 - m_z^2) + h m_z + 2\epsilon \tilde{e}_{DW} \right] \end{aligned} \quad (1.12)$$

où

$$\epsilon = \frac{D}{2\sqrt{AK}}, \quad h = \frac{A}{K} H, \quad (1.13)$$

et où le tilde signifie que les dérivées du terme correspondant ont été adimensionnées. On voit ainsi que le paramètre clé va être la valeur du paramètre ϵ , associée à l'amplitude effective h du champ magnétique appliqué. Il a été montré que trois phases

3. C'est à dire lorsque le champ $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ s'enroule Q fois autour de la sphère en parcourant le plan, autrement dit il existe un skyrmion de charge Q dans le plan.

peuvent être observées selon les valeurs prises par ces deux paramètres[6]. La première est une phase uniforme⁴, on y observe simplement une configuration ferromagnétique $\mathbf{m} = \pm \mathbf{e}_z$. C'est la seule phase observée lorsque $\epsilon < \frac{2}{\pi}$. Les deux autres phases sont observées pour $\epsilon > \frac{2}{\pi}$, l'augmentation/diminution du champ magnétique permettant de passer de l'une à l'autre des ces trois phases. La seconde phase est dite en spirale, on y observe une modulation du champ $\mathbf{m}(\mathbf{r})$ selon une unique direction, formant des parois de domaines parallèles et régulièrement espacées. Elle est observée pour de petites valeurs de h . La troisième phase abrite un réseau de skyrmions, dont le paramètre de maille dépend des deux paramètres ϵ et h . Si cette phase abrite un tel réseau c'est que le skyrmion devient alors la structure la plus favorable énergétiquement. Cette phase représente la phase intermédiaire entre la phase spirale et la phase uniforme lorsqu'on augmente l'intensité du champ magnétique appliqué[6, 8]. Il est important de noter que l'apparition de skyrmions stables ne peut se produire qu'en présence d'un champ magnétique non nul $|h| > 0$ dans le cadre du système modèle présenté ici. On peut néanmoins souligner le fait que l'utilisation de diverses astuces et méthodes a aujourd'hui permis de créer et observer des skyrmions stables, apparaissant de plus à des températures raisonnables[9, 10, 11].

Nous venons d'introduire la notion de skyrmion, et nous avons explicité leur description dans le cas de matériaux magnétiques. Nous allons maintenant brièvement explorer une application que pourraient avoir ces objets dans le futur de l'électronique de spin.

1.3 L'utilisation de skyrmions pour des mémoires

L'intérêt principal des skyrmions magnétiques d'un point de vue pratique est que ces objets pourraient servir de porteurs d'information[10, 12, 3]. Le principe serait de placer (écrire) des skyrmions le long d'un matériau magnétique de géométrie quasi unidimensionnelle que nous appelleront rail. On pourrait alors imaginer déplacer ces skyrmions le long du rail afin de venir les lire/écrire au niveau d'une pointe située à une extrémité du rail[13, 14, 15, 16]. On lirait alors un "1" lorsque la pointe détecterait un skyrmion, et un "0" si elle n'en détecte aucun. Ces futures mémoires pourraient permettre d'obtenir un excellent rapport capacité de stockage / volume, ainsi qu'une vitesse de lecture et d'écriture potentiellement meilleure que les mémoires actuelles. Afin de mieux comprendre le fonctionnement de telles mémoires, on se propose maintenant de s'intéresser de plus près au déplacement de skyrmions le long d'un rail.

Les skyrmions peuvent être déplacés le long d'un matériau quasi unidimensionnel, que nous appelleront rail, en utilisant un courant électrique polarisé ou courant de spin. Il y a deux possibilités, injecter un courant de spin directement dans le rail, ou alors

4. On peut mentionner que au sein de cette phase dans la limite $\epsilon \ll 1$ le cœur d'un skyrmion optimal adopte[7] un profil analogue à celui de belavin-Polyakov observé dans le cas $D = K = 0$. L'énergie minimale d'un skyrmion est alors de l'ordre de $4\pi A Q$, le rendant hautement instable.

injecter un courant électrique dans un second rail, ayant les bonnes propriétés et accolé au rail contenant les skyrmions. Le courant transverse de spin dans ce second rail, dû à l'effet Hall de spin, influera alors sur les skyrmions présents dans le rail principal. Dans les deux cas le principe repose sur les interactions de type échange et spin-orbite, entre le spin des électrons et les moments magnétiques qui composent le skyrmion. Cette interaction va produire un moment de torsion, résultant en une déformation du skyrmion, produisant un mouvement effectif de ce dernier. L'inconvénient de ce dispositif est qu'il existe une composante intrinsèque à la force s'appliquant au skyrmion, appelé effet Hall de skyrmion, qui le fait dévier de la direction du courant de spin appliqué⁵. Cet effet, intrinsèque aux objets ayant une charge topologique non nulle, est particulièrement contraignant si on veut créer une mémoire puisqu'elle va conduire à la collision des skyrmions sur les parois du rail, menant à des pertes d'information. Diverses solutions ont été proposées pour résoudre ce problème, consistant généralement à façonner soit le rail secondaire d'injection, soit le rail abritant les skyrmions, de telle sorte à produire des forces effectives qui compensent l'effet Hall de skyrmion. Ces solutions sont néanmoins très compliquées à mettre en pratique expérimentalement car elles reposent sur la possibilité de façonner à la perfection le rail à l'échelle microscopique. Elles permettraient de plus de solutionner le problème pour une unique valeur du courant appliqué, et manquent donc beaucoup de souplesse.

1.4 Les skyrmions antiferromagnétiques

C'est dans cette optique que des objets similaires, les skyrmions antiferromagnétiques, attirent actuellement beaucoup d'attention[12, 3]. Ces objets sont l'analogie directe des skyrmions ferromagnétiques présentés plus haut, mais pour des systèmes où le paramètre d'ordre local n'est plus l'aimantation locale \mathbf{M} mais le paramètre d'ordre Néel. Considérons un système antiferromagnétique présentant un ordre Néel, pour lequel les moments magnétiques de deux sites voisins, placés sur un réseau bipartite, sont toujours opposés, comme représenté sur la figure 1.3. L'aimantation effective locale est alors définie comme

$$\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2}{2M_s}, \quad (1.14)$$

tandis que le paramètre d'ordre Néel est quant à lui défini comme

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2}{2M_s}. \quad (1.15)$$

Pour un matériau présentant une forte interaction d'échange antiferromagnétique entre premiers voisins, on aura une configuration douce où $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ varie lentement. Dans ce

5. Cette force peut être visualisée comme étant l'analogie de la force de Magnus qui s'applique à un objet en rotation lors de son mouvement dans un fluide, l'objet en rotation pouvant être associé à un skyrmion dans le cas présent.

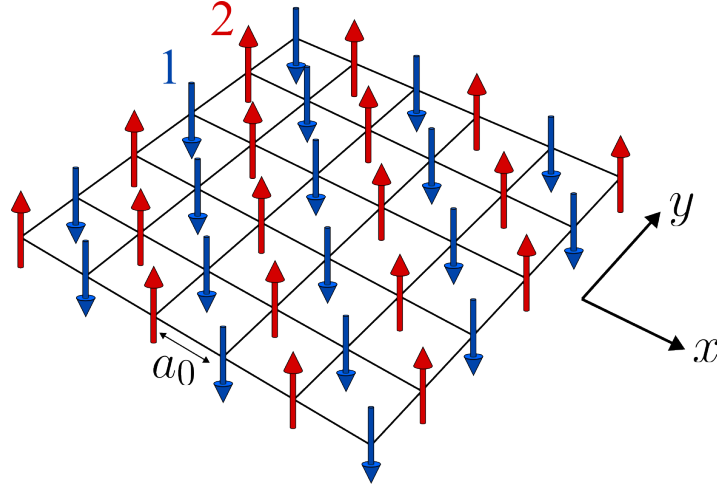


FIGURE 1.3 – Aimant antiferromagnétique présentant un ordre Néel, sur un réseau carré de paramètre de maille a_0 . Une translation de $a_0\mathbf{e}_x$ ou $a_0\mathbf{e}_y$ conduit à une inversion du moment magnétique considéré. On peut définir deux sous réseaux présentant chacun un ordre ferromagnétique, représentés en rouge et bleu, à partir desquels les définitions du paramètre d'ordre Néel $\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2}{2M_s}$, et de l'aimantation effective locale $\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2}{2M_s}$ sont naturelles.

cas on aura de plus $\|\mathbf{m}\| \ll 1 \simeq \|\mathbf{n}\|$, permettant en général de négliger les fluctuations de l'aimantation effective locale \mathbf{m} et de ne travailler qu'avec le paramètre d'ordre Néel \mathbf{n} . Maintenant que ces deux champs effectifs sont définis, on voit que si on applique la définition précédemment établie d'un skyrmion au champ \mathbf{n} , on obtient ce que l'on appelle un skyrmion antiferromagnétique. Ce dernier est en fait composé de deux skyrmions ferromagnétiques de charges topologiques opposées, chacun situé sur un des deux sous réseaux. L'intérêt de ce nouvel objet est que la direction de déviation d'un skyrmion due à l'effet Hall de skyrmion dépend du signe de sa charge topologique. Un skyrmion antiferromagnétique étant justement composé de deux skyrmions jumeaux ayant des charges topologiques opposées, il ressentira deux forces transverses opposées et de même amplitude, qui vont donc toujours se compenser. Il devient alors possible de déplacer un skyrmion en ligne droite sans subir l'effet Hall de skyrmion. Ces objets sont d'autant plus prometteurs que le fait qu'ils n'aient aucune aimantation nette les rend à priori beaucoup plus robuste vis à vis de perturbations magnétiques extérieures. On peut finalement noter que la vitesse de déplacement théorique des skyrmions antiferromagnétiques est nettement supérieure à celle des skyrmions ferromagnétiques[3].

Les problèmes qui se posent néanmoins avec ces objets prometteurs sont les difficultés, pour l'instant théoriques, liées à leur écriture et leur détection[3, 17, 18, 19, 20, 21, 22]. Il est techniquement possible d'écrire la fonctionnelle énergie (1.7) et de refaire la discussion associée en remplaçant l'aimantation locale \mathbf{m} par le paramètre d'ordre Néel[8]. On voit cependant que l'apparition de skyrmions est assujettie à l'application d'un champ magnétique externe, qui devrait, dans le cas antiferromagnétique,

être modulé à l'échelle du réseau. Cela peut se faire en utilisant un matériau bi-couche, où la couche de substrat est elle-même antiferromagnétique et permet ainsi d'appliquer un champ magnétique effectif ayant la modulation spatiale souhaitée. On ne peut néanmoins pas dans ce cas paramétrer l'intensité du champ magnétique imposé, ce qui complique énormément les choses si on veut pouvoir façonner les skyrmions produits. Pour ce qui est de la détection le problème vient du fait qu'un skyrmion antiferromagnétique ne produisant pas d'aimantation nette, les méthodes de détection magnétiques utilisées pour leurs homologues ferromagnétiques ne fonctionnent pas.

On peut tout de même noter que des skyrmions antiferromagnétiques ont pu être créés et observés expérimentalement en superposant deux couches ferromagnétiques, abritant chacune un skyrmion dont les charges topologiques sont opposées. Les deux couches étant en interaction les deux skyrmions sont ainsi liés, formant de manière effective un skyrmion antiferromagnétique[23], dit synthétique.

Afin de pouvoir espérer un jour former et manipuler des skyrmions antiferromagnétiques au sein d'un matériau, il faut étudier et comprendre comment ces objets interagissent avec les différents degrés de libertés présents au sein d'un cristal. L'objet de la première partie de ce manuscrit est ainsi de comprendre, du point de vue quantique, quels vont être les possibles interactions d'un skyrmion antiferromagnétique avec les électrons qui l'entourent au sein du cristal. Mais avant de s'attaquer au problème, nous nous proposons de commencer par brièvement passer en revue les différents travaux qui ont été faits sur des sujets voisins.

1.5 Travaux antérieurs voisins

1.5.1 Interaction électron-skyrmion ferromagnétique

On commence par passer en revue les études qui ont été faites concernant l'interaction électron-skyrmion ferromagnétique. L'interaction des électrons de conduction avec un skyrmion ferromagnétique donne lieu du point de vue macroscopique à un phénomène appelé effet Hall topologique[24, 25, 26]. Cet effet se traduit par l'observation d'un comportement anormal de la résistivité de Hall ρ_{xy} qui est corrélée à la détection de skyrmions. Cet effet est dû, du point de vue microscopique, à la diffusion des électrons sur les skyrmions présents dans le matériau considéré[27, 25, 26, 28]. Ce phénomène de diffusion est la conséquence d'un couplage d'échange

$$V = -J\mathbf{M}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{s}} \quad (1.16)$$

entre les moments magnétiques composant le skyrmion, décrits par l'aimantation locale $\mathbf{M}(\mathbf{r})$, et le spin de l'électron traduit ici par l'opérateur $\hat{\mathbf{s}}$. On constate que cette interaction produit un couplage effectif entre le mouvement de l'électron et son spin[29], c'est à dire un couplage spin-orbite, qui est dû au fait que le champ d'aimantation $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ varie spatialement. On peut visualiser ça classiquement comme si l'électron modifiait

sa trajectoire de telle sorte à ce que son spin demeure toujours aligné avec l'aimantation locale⁶. On peut noter que ce couplage spin-orbite effectif n'existe qu'à cause de l'inhomogénéité de l'aimantation locale, ce qui suggère que la force de ce couplage sera fonction du gradient de $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ [30, 31]. Le couplage spin-orbite "usuel" apparaît dans l'équation de Pauli

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\Phi - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H} - \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{p}} \right] \phi \quad (1.17)$$

comme une trace du développement non relativiste, en puissances de $1/c$, de l'équation de Dirac[32]. Dans le cas de l'interaction (1.16) on observe qu'il n'y a pas cette fois de petit paramètre analogue à $1/c$. Ce couplage spin-orbite effectif peut donc être, du point de vue théorique, arbitrairement grand pour un matériau présentant une forte aimantation ainsi qu'une grande intégrale d'échange J .

La compréhension détaillée de la diffusion d'un électron sur un skyrmion ferromagnétique semble bien maîtrisée, ayant été modélisée analytiquement et numériquement[27, 25, 26, 28]. Ces résultats montrent par ailleurs que dans le cas d'un skyrmion ferromagnétique, l'interaction effective qui existe entre un électron et un skyrmion via le terme de couplage (1.16) ne peut conduire qu'à une diffusion de l'électron, cette dernière affectant à la fois la trajectoire mais aussi le spin de l'électron. Nous verrons dans la suite de ce manuscrit que ce type de comportement n'est pas le seul observé pour un skyrmions antiferromagnétique.

Nous allons maintenant nous concentrer sur le sujet qui fait l'objet de ce manuscrit, à savoir l'étude, du point de vue quantique, de l'interaction d'un électron avec un skyrmion antiferromagnétique. Nous allons pour cela commencer par établir une description hamiltonienne générale de l'interaction d'un électron avec une texture magnétique présentant localement un ordre Néel.

1.5.2 Interaction d'un électron avec une texture antiferromagnétique

Le traitement de l'interaction entre un électron et une texture magnétique ferromagnétique, bien connue théoriquement et expérimentalement, a récemment été complétée[33] par l'étude théorique de l'interaction entre un électron et une texture magnétique au sein d'un matériau antiferromagnétique. Cette étude se place dans le contexte adiabatique[33] où l'interaction d'échange entre le spin de l'électron et l'aimantation du matériau (1.16) domine la dynamique de l'électron. Dans le cas d'un matériau ferromagnétique cela implique que le spin de l'électron s'aligne en tout temps et en tout

6. Cette représentation imagée, un peu cavalière, correspond à la limite adiabatique dans laquelle l'amplitude J du couplage (1.16) est telle que c'est cette interaction qui domine le comportement de l'électron.

point avec l'aimantation du matériau. Dans le cas d'un aimant antiferromagnétique cela n'est pas possible puisque cela signifierait des retournements successifs du spin à l'échelle du réseau. Cela signifie que bien qu'un axe de polarisation soit donné par le paramètre d'ordre Néel (1.15), il n'y a pas d'orientation privilégiée pour le spin le long de cet axe. L'ordre antiferromagnétique produit ainsi deux bandes d'énergie dégénérées, puisqu'à chaque énergie on peut associer de manière équivalente deux états de polarisations opposées. La dynamique d'un électron au sein d'une bande d'un tel matériau est donc décrite par une théorie de jauge non abélienne⁷, rendant compte de l'oscillation de la fonction d'onde de l'électron entre ces deux états de polarisation au cours du temps et au sein de l'espace.

Le traitement de la dynamique particulière des électrons au sein d'un matériau antiferromagnétique réalisé dans cette étude[33] se fait dans la limite quasi classique. Le hamiltonien est ainsi projeté dans un états quasi classique, constitué d'un paquet d'onde possédant un centre de masse et une vitesse bien définis. Cela permet alors la détermination du système effectif d'équations régissant la dynamique classique de l'électron. Le but est de réaliser un analogue antiferromagnétique des équations régissant le comportement d'un courant électrique au sein d'un matériau présentant une texture magnétique non uniforme, mais aussi d'ouvrir la voie à l'étude réciproque de l'impact d'un courant électrique polarisé en spin sur une texture magnétique[34].

L'approche semi-classique utilisée, faisant intervenir un paquet d'onde localisé afin d'en dériver les équations du mouvement, est intrinsèquement différente de l'approche utilisée dans ce manuscrit, purement quantique. Elle ne peut pas en particulier identifier de potentiels états liés entre les électrons étudiés et la texture magnétique sous-jacente. On peut de plus noter que les équations du mouvement obtenues grâce à une telle étude sont singulières au voisinage des minimums de la bande de conduction (et des maximums de la bande de valence) induites par l'ordre antiferromagnétique, points centraux de l'étude réalisée dans ce manuscrit.

7. Dans le cas ferromagnétique une bande est associée à une unique polarisation, et la théorie de jauge correspondante est ainsi de type $U(1)$.

2

Un électron dans un aimant de Néel

On veut dans ce chapitre établir le formalisme permettant de décrire le comportement d'un électron au sein d'un aimant bidimensionnel présentant un ordre Néel. On se propose pour cela de commencer par expliciter le hamiltonien décrivant le comportement de l'électron dans un aimant présentant un paramètre d'ordre uniforme. On se penchera ensuite sur le cas où le paramètre d'ordre n'est plus uniforme mais quelconque. On verra alors que le hamiltonien obtenu possède une forme simplifiée dans la limite des basses énergies. La transformation de jauge associée au hamiltonien obtenu, assez inusuelle, sera discutée en détails. La description de ce formalisme a pour but de pouvoir étudier le cas spécifique de l'interaction électron-skyrmion dans les chapitres suivant.

Contenu du chapitre

| | | |
|------------|---|-----------|
| 2.1 | Construction du hamiltonien effectif | 18 |
| 2.1.1 | Configuration uniforme | 19 |
| 2.1.2 | Texture magnétique quelconque | 22 |
| 2.1.3 | Hamiltonien effectif | 22 |
| 2.1.4 | Choix du minimum | 24 |
| 2.2 | Champ de jauge | 27 |
| 2.2.1 | Construction | 27 |
| 2.2.2 | Propriétés | 28 |
| 2.2.3 | Invariants de jauge | 30 |

2.1 Construction du hamiltonien effectif

On veut, afin de caractériser le comportement d'un électron au sein d'un matériau antiferromagnétique, établir le hamiltonien général décrivant le couplage entre une texture magnétique antiferromagnétique bidimensionnelle et un électron. Ce couplage est dû à l'interaction d'échange qui existe entre le spin de l'électron et les moments magnétiques des atomes composant le matériaux hôte. On se place ici dans le cadre d'un modèle continu, où on considère par conséquent l'interaction d'échange entre le spin d'un électron, et l'aimantation locale $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ du matériau. On peut utiliser le formalisme de la seconde quantification pour ainsi écrire le hamiltonien correspondant

$$\mathcal{H} = \frac{1}{a_0^2} \int d^2r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) [\varepsilon(\hat{\mathbf{p}}) + JM \cdot \boldsymbol{\sigma}] \Psi(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

qui peut être vu comme la limite continue d'un modèle microscopique défini sur un réseau carré de pas a_0 . $\Psi(\mathbf{r})^\dagger$ est l'opérateur champ spinoriel de création électronique. Le premier terme de ce hamiltonien décrit la dynamique de l'électron au sein du matériau, avec $\varepsilon(\mathbf{p})$ la relation de dispersion de l'électron, dont l'expression exacte peut être construite à partir d'un modèle sur réseau. On aura par exemple $\varepsilon(\mathbf{p}) = 2t \left[\cos\left(\frac{p_x a_0}{\hbar}\right) + \cos\left(\frac{p_y a_0}{\hbar}\right) \right]$ dans le cas où l'on ne considère qu'un couplage entre plus proches voisins sur un réseau carré de paramètre a_0 , avec une amplitude de saut t . Le second terme décrit quant à lui le couplage du spin de l'électron, représenté par le triplé des matrices de Pauli $\boldsymbol{\sigma}$, avec l'aimantation locale $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ du matériau sous-jacent.

On traite ici du cas d'un matériau antiferromagnétique présentant un ordre Néel, il est donc naturel de définir deux sous réseaux possédant chacun un ordre ferromagnétique. Ces deux sous réseaux portent ainsi des champs d'aimantation locaux $\mathbf{M}_1(\mathbf{r})$ et $\mathbf{M}_2(\mathbf{r})$ (voir figure 1.3). Il est alors pertinent de définir d'une part le paramètre d'ordre Néel $\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2}{2M_s}$, et l'aimantation effective locale $\mathbf{m}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2}{2M_s}$, avec M_s l'aimantation à saturation. Dans le cas d'un matériau possédant un couplage entre moments magnétiques voisins¹ suffisamment fort on a $\|\mathbf{n}\| \simeq 1 \gg \|\mathbf{m}\|$. On peut de plus noter que le temps de relaxation associé au champ \mathbf{m} sera bien plus court que celui du paramètre d'ordre Néel \mathbf{n} . On peut ainsi traiter le problème en négligeant l'aimantation effective \mathbf{m} , en prenant notamment $\mathbf{M}(\mathbf{r}) \simeq M_s \mathbf{n}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}$. Le vecteur $\mathbf{Q} = \left(\pm \frac{\pi}{a_0}, \pm \frac{\pi}{a_0}\right)$ décrit l'ordre Néel pour un réseau carré de paramètre de maille a_0 . On notera par la suite $\Delta \equiv JM_s$ afin de réécrire le hamiltonien comme

$$\mathcal{H} = \frac{1}{a_0^2} \int d^2r \Psi^\dagger(\mathbf{r}) [\varepsilon(\hat{\mathbf{p}}) + \Delta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}] \Psi(\mathbf{r}). \quad (2.2)$$

On va maintenant étudier la structure de bande produite par ce hamiltonien, en commençant par analyser le cas simple d'un matériau présentant un ordre Néel parfaitement uniforme.

1. On parle ici du couplage de type Heisenberg antiferromagnétique $A \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ responsable de l'ordre Néel local.

2.1.1 Configuration uniforme

On se place dans le cas d'une texture de spin uniforme afin de réaliser une première image physique du problème. Dans un tel cas on peut prendre $\mathbf{n}(\mathbf{r}) \equiv \mathbf{e}_z$ sans perte de généralité, et passer dans l'espace réciproque² en utilisant

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \Psi_{\mathbf{p}}, \quad \Psi_{\mathbf{p}} = \int d^2r e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

avec L la taille caractéristique du système. On obtient

$$\mathcal{H} = \frac{1}{a_0^2} \frac{1}{L^4} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \int d^2r \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \left[\varepsilon_{\mathbf{p}'} e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}} + \Delta\sigma_z e^{i(\mathbf{Q}+\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}} \right] \Psi_{\mathbf{p}'}. \quad (2.4)$$

L'intégration sur l'espace de coordonnées réelles mène à

$$\mathcal{H} = \frac{1}{L^2 a_0^2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \left[\varepsilon_{\mathbf{p}} \delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} + \Delta\sigma_z \delta_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}, \mathbf{p}'} \right] \Psi_{\mathbf{p}'}, \quad (2.5)$$

il devient alors évident que le second terme produit un couplage entre états d'impulsions \mathbf{p} et $\mathbf{p} + \mathbf{Q}$, réduisant ainsi la zone de Brillouin. On voit sur la figure 2.1 a) que cette nouvelle zone de Brillouin³ est deux fois plus petite que la zone de Brillouin de l'état paramagnétique parent, et diffère d'un angle $\frac{\pi}{4}$ dans son orientation. Il est alors pertinent de sommer sur cette nouvelle zone de Brillouin pour obtenir le hamiltonien

$$\mathcal{H} = \frac{1}{L^2 a_0^2} \sum_{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger & \Psi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{p}} & \Delta\sigma_z \\ \Delta\sigma_z & \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{\mathbf{p}} \\ \Psi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

qui agit désormais sur un bi-spineur.

Ce hamiltonien est facile à diagonaliser car $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ et $\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}$ sont des quantités scalaires. Il produit deux bandes d'énergie

$$E_{\pm} = \varepsilon_{+} \pm \sqrt{\Delta^2 + \varepsilon_{-}^2}, \quad \varepsilon_{\pm} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} \pm \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}}{2} \quad (2.7)$$

séparées par un gap d'épaisseur 2Δ . Ces deux bandes sont doublement dégénérées car, contrairement au cas d'un matériau ferromagnétique, aucune direction n'est privilégiée par la texture magnétique. On peut observer que le couplage du spin de l'électron avec une texture antiferromagnétique transforme donc un métal demi-rempli en isolant. On a alors une situation analogue à celle d'un semi-conducteur avec une bande de valence pleine et une bande de conduction vide, voir figure 2.1 b).

Dans l'optique de traiter plus tard le cas plus complexe d'un paramètre d'ordre Néel $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ quelconque, on veut maintenant dériver un hamiltonien effectif plus simple, agissant sur un spineur, qui décrit le comportement d'un unique électron situé dans la bande de conduction E_{+} que l'on vient d'identifier.

2. On parle ici indifféremment d'impulsion ou de vecteur d'onde, ce qui revient implicitement à considérer pour cette section le système d'unité pour lequel $\hbar = 1$. On utilisera ainsi les variables p et q pour noter les vecteurs d'onde dans tout le manuscrit.

3. On l'appellera par la suite zone de Brillouin réduite ou zone de Brillouin magnétique.

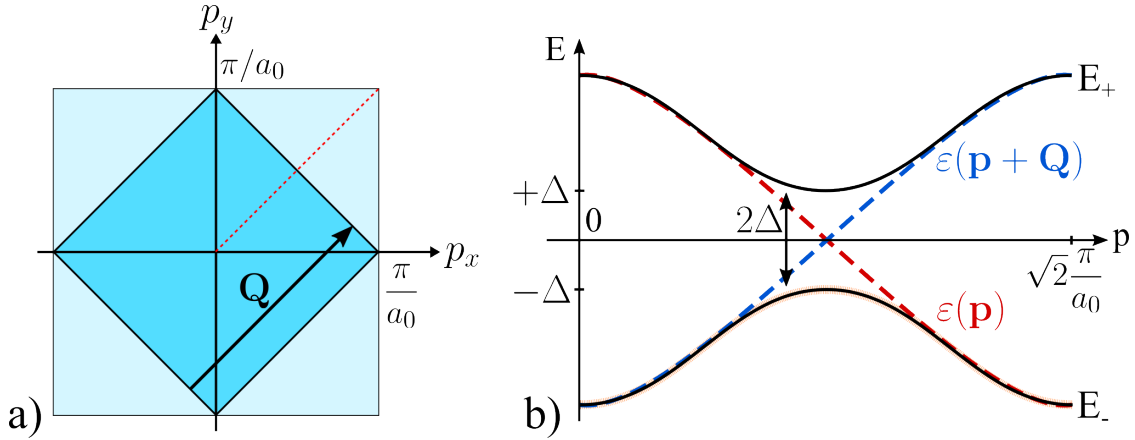


FIGURE 2.1 – **a)** La zone de Brillouin d’un matériau antiferromagnétique est réduite (en bleu) par rapport à la zone de Brillouin paramagnétique (en bleu clair) à cause du couplage entre les impulsions \mathbf{p} et $\mathbf{p} + \mathbf{Q}$ induit par le terme d’échange. Les axes des impulsions p_x et p_y sont pris selon les deux directions naturelles du réseau carré considéré, la constante \hbar est prise égale à 1. **b)** Structure de bande induite par l’interaction d’échange entre un électron et une texture magnétique antiferromagnétique uniforme. Les deux bandes sont doublement dégénérées, et séparées par un gap de largeur 2Δ . On a pris ici le cas d’un système modèle avec sauts entre premiers voisins décrit par $\varepsilon(\mathbf{p}) = 2t \left[\cos\left(\frac{p_x a_0}{\hbar}\right) + \cos\left(\frac{p_y a_0}{\hbar}\right) \right]$. La coordonnée d’impulsion est prise le long des pointillés représentés sur la figure **a)**. La bande de valence est hachurée pour illustrer le cas d’un matériau demi rempli, pour lequel seule la bande de valence est remplie à température nulle.

Hamiltonien effectif

On veut étudier le comportement d’un unique électron présent dans la bande de conduction. On cherche à décrire le comportement de basse énergie de cet électron, c’est à dire que l’on se focalise sur le voisinage d’un minimum de la bande de conduction. Pour ce faire on réalise un développement de l’énergie E_+ autour de ce minimum local. Cette construction est analogue à l’approximation des masses effectives qui est utilisée pour traiter les propriétés électroniques des impuretés hydrogénoïdes au sein des semi conducteurs [35, 36].

Les minimums de la bande de conduction sont tous les points \mathbf{p}_0 pour lesquels on assiste à un croisement évité, c’est à dire ceux pour lesquels $\varepsilon_- \propto \varepsilon_{\mathbf{p}} - \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} = 0$. On a donc par symétrie que ces points vont appartenir au bord de la zone de Brillouin réduite. Afin de réaliser ce développement, on commence par se placer dans la base qui diagonalise le hamiltonien (2.6) aux points \mathbf{p}_0 . On utilise pour cela que les vecteurs propres associés aux valeurs propres (2.7) ont la forme

$$\Psi^\pm \propto \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\Delta\sigma_z}{E_\pm + \varepsilon_-} \end{pmatrix} \otimes \psi_{\mathbf{p}} \quad (2.8)$$

avec ψ_p la fonction propre de l'opérateur $\hat{\mathbf{p}}$ associé à la valeur propre \mathbf{p} . Le changement de base se fait ainsi via la matrice de passage

$$\mathbf{P} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \mathbb{1} \\ \sigma_z & -\sigma_z \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

avec $\mathbb{1}$ la matrice identité dans l'espace de spin. Cette transformation mène au hamiltonien

$$\varepsilon_+ \mathbf{I}_4 + \begin{pmatrix} \Delta \mathbb{1} & \varepsilon_- \mathbb{1} \\ \varepsilon_- \mathbb{1} & -\Delta \mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

qui est bien diagonal au niveau du minimum de la bande de conduction, pour lequel pour $\varepsilon_- = 0$.

On veut maintenant partir de ce hamiltonien pour dériver le hamiltonien effectif s'appliquant au voisinage de la bande de conduction, dans l'esprit du développement de l'équation de Dirac vers celle de Schrödinger [32]. Pour cela on applique ce hamiltonien à un bispineur $(\Phi, \chi)^t$, et on décompose l'énergie comme $\Delta + \varepsilon$ où $|\varepsilon| \ll \Delta$. On obtient l'équation de Schrödinger

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_+ + \Delta & \varepsilon_- \\ \varepsilon_- & \varepsilon_+ - \Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} = (\Delta + \varepsilon) \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

que l'on peut séparer comme

$$\begin{aligned} \varepsilon_- \chi &= (\varepsilon - \varepsilon_+) \Phi, \\ \varepsilon_- \Phi &= (2\Delta + \varepsilon - \varepsilon_+) \chi. \end{aligned} \quad (2.12)$$

On voit alors que dans la limite où les énergies en jeu $|\varepsilon|$ et $|\varepsilon_{\pm}|$ sont petites comparées à l'épaisseur du gap Δ , on a

$$\chi \simeq \frac{\varepsilon_-}{2\Delta} \Phi \quad (2.13)$$

ce qui implique que le spineur χ est petit devant Φ . Dans l'esprit du développement de l'équation de Dirac vers celle de Schrödinger [32, 37] il est donc légitime de se restreindre à l'étude de cet unique spineur, obéissant à l'équation

$$\left(\varepsilon_+ + \frac{(\varepsilon_-)^2}{2\Delta} \right) \Phi = \varepsilon \Phi. \quad (2.14)$$

Cela correspond à se restreindre à l'étude du hamiltonien effectif

$$H_{eff}^u = \varepsilon_+ (\hat{\mathbf{p}}) + \frac{(\varepsilon_- (\hat{\mathbf{p}}))^2}{2\Delta} \quad (2.15)$$

qui agit sur un spineur et non plus un bispineur. On peut noter que ce hamiltonien n'est valable que s'il mène à des énergies propres ε petites devant l'épaisseur de gap Δ , si ce n'est pas le cas il faudra étudier le hamiltonien complet (2.6).

Maintenant que l'on possède une bonne compréhension des propriétés du modèle uniforme, on propose de se tourner vers le cas général d'une texture magnétique non-uniforme.

2.1.2 Texture magnétique quelconque

On considère le cas général d'une texture magnétique quelconque, décrite par un paramètre d'ordre Néel $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ dont l'orientation varie continûment dans le plan. On cherche à obtenir un hamiltonien similaire à celui dérivé dans le cas uniforme (2.6). On va pour cela réaliser une transformation unitaire dans l'espace de spin, permettant de recouvrer une configuration uniforme. On définit ainsi l'opérateur unitaire $U(\mathbf{r})$ agissant dans l'espace de spin, et produisant une rotation envoyant le vecteur \mathbf{n} sur la verticale \mathbf{e}_z ,

$$U^\dagger(\mathbf{r}) \left[\mathbf{n}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] U(\mathbf{r}) \equiv \sigma^z. \quad (2.16)$$

On réalise ensuite la transformation de l'opérateur champ

$$\Psi = U \tilde{\Psi} \quad (2.17)$$

qui permet de réécrire le hamiltonien (2.2) comme

$$\mathcal{H} = \frac{1}{a_0^2} \int d^2r \tilde{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left[U^\dagger(\mathbf{r}) \varepsilon(\hat{\mathbf{p}}) U(\mathbf{r}) + \Delta \sigma^z e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} \right] \tilde{\Psi}(\mathbf{r}). \quad (2.18)$$

On ne travaillera plus que dans la base $\tilde{\Psi}$, on omettra donc par la suite le \sim puisque cela ne prête pas à confusion. Sous cette transformation le terme d'échange devient ainsi analogue au cas uniforme, tandis que dans le terme cinétique il s'opère une substitution de Pierls

$$\hat{p}_i = -i\hbar\partial_i \longrightarrow U^\dagger \hat{p}_i U = \hat{p}_i + \mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.19)$$

où $\mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} = A_i^\alpha \sigma^\alpha = -i\hbar U^\dagger \partial_i U$ avec i les indices d'espace et α de spin. En se plaçant en représentation position et dans la base $(\Psi_{\mathbf{p}}, \Psi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}})^t$ on obtient finalement la formulation du hamiltonien (2.18)

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mathbf{p}} (\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma}) & \Delta \sigma_z \\ \Delta \sigma_z & \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} (\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

exprimé dans le formalisme de la première quantification. On a utilisé la notation $\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = U^\dagger \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}(\hat{\mathbf{p}}) U$ avec $\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$. Le champ de jauge introduit au cours de la substitution de Pierls étant non abélien, on notera que les termes situés sur la diagonale $\varepsilon_{\mathbf{p}}(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ et $\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})$ ne sont plus des scalaires. On ne peut donc plus diagonaliser directement ce hamiltonien.

2.1.3 Hamiltonien effectif

Tout comme dans le cas cas uniforme, les points \mathbf{p}_0 pour lesquels $\varepsilon_{\mathbf{p}_0} = \varepsilon_{\mathbf{p}_0+\mathbf{Q}}$ vont être le siège d'une levée de dégénérescence due au couplage induit par le terme d'échange. Par construction ces points vont donc là encore correspondre aux minimums locaux de la bande de conduction. On va ainsi, de manière analogue à ce que l'on a fait dans le cas uniforme, se placer dans la base qui diagonalise le hamiltonien (2.20)

aux points $\{\mathbf{p}_0\}$. Cela se fait en utilisant la matrice de passage \mathbf{P} définie selon (2.9), le hamiltonien se transforme alors comme

$$\tilde{H} = \mathbf{P}^\dagger H \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \gamma_+ + \Delta \mathbb{1} & \gamma_- \\ \gamma_- & \gamma_+ - \Delta \mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

avec

$$\gamma_\pm = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_{\mathbf{p}} (\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \pm \sigma_z \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} (\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sigma_z \right). \quad (2.22)$$

Il n'est pas évident à première vue que ce hamiltonien est diagonal aux points $\{\mathbf{p}_0\}$. L'objectif étant d'étudier le voisinage d'un minimum de la bande de conduction, on développe les relations de dispersions $\varepsilon_{\mathbf{p}}$ and $\varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}$ autour de l'impulsion \mathbf{p}_0 repérant ce minimum. Dans cette optique on observe bien que le Hamiltonien ci dessus est diagonal au point \mathbf{p}_0 puisqu'alors $\gamma_- = 0$ et γ_+ est un scalaire.

Appliquons maintenant ce hamiltonien à un bispineur, en gardant en tête que l'on se place près d'un minimum $E_+ = \Delta$ de la bande de conduction. On note ainsi l'énergie $E = \Delta + \varepsilon$ avec $|\varepsilon| \ll \Delta$, pour obtenir

$$\begin{pmatrix} \gamma_+ + \Delta \mathbb{1} & \gamma_- \\ \gamma_- & \gamma_+ - \Delta \mathbb{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix} = (\Delta + \varepsilon) \begin{pmatrix} \Phi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (2.23)$$

Cela mène aux deux sous équations

$$\begin{aligned} \gamma_- \chi &= (\varepsilon - \gamma_+) \Phi, \\ \gamma_- \Phi &= (2\Delta + \varepsilon - \gamma_+) \chi. \end{aligned} \quad (2.24)$$

On considère maintenant que la texture magnétique est suffisamment douce⁴ pour vérifier la condition $|\gamma_\pm| \ll \Delta$. On voit que cela implique à nouveau une hiérarchie entre les deux spineurs, puisque la relation

$$\chi \simeq \frac{\gamma_-}{2\Delta} \Phi, \quad (2.25)$$

implique $\Phi \gg \chi$. On peut donc éliminer le spineur χ pour obtenir une équation de Schrödinger effective

$$\left(\gamma_+ + \frac{\gamma_-^2}{2\Delta} \right) \Phi = \varepsilon \Phi \quad (2.26)$$

correspondant au hamiltonien effectif

$$H = \gamma_+ + \frac{\gamma_-^2}{2\Delta} \quad (2.27)$$

4. Cette condition correspond à considérer que le champ de jauge A_i^α , proportionnel aux dérivées première de l'opérateur U , variant par définition (2.16) de manière analogue à \mathbf{n} , est petit en amplitude si \mathbf{n} varie lentement.

Il agit sur le spineur

$$\Phi = \frac{\psi_{\mathbf{p}} + \sigma_z \psi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}}{\sqrt{2}} \quad (2.28)$$

où $\psi_{\mathbf{p}}$ (respectivement $\psi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}}$) est le spineur propre de l'opérateur $\hat{\mathbf{p}}$ associé à la valeur propre \mathbf{p} (respectivement $\mathbf{p} + \mathbf{Q}$).

2.1.4 Choix du minimum

Nous avons établi l'expression du hamiltonien effectif décrivant le couplage d'un électron avec une texture de spin sous-jacente. Il nous faut maintenant expliciter les termes γ_{\pm} en choisissant une position spécifique \mathbf{p}_0 du minimum d'énergie local étudié. Il existe par symétrie deux types de candidats, les centres des bords de la zone de Brillouin magnétique, notés Σ_i , et les angles de cette dernière. On choisit ici de traiter le point Σ_1 , représenté sur la figure 2.2, qui est équivalent physiquement aux autres points Σ_i . On a alors, autour de ce point Σ_1 , et en se limitant à l'ordre deux,

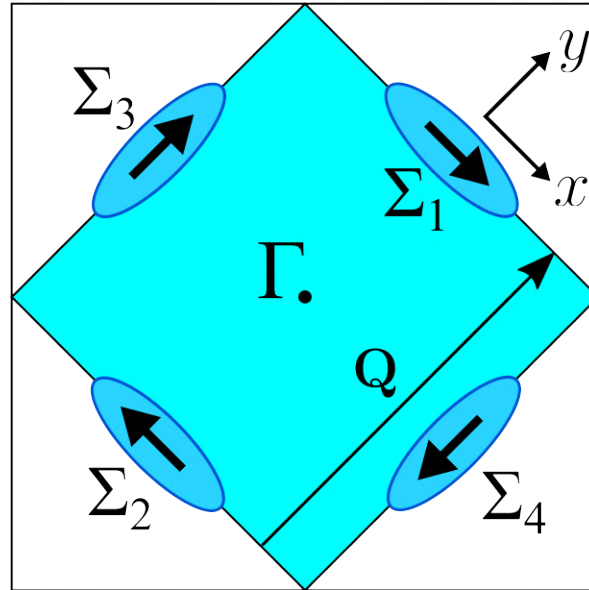


FIGURE 2.2 – Zone de Brillouin magnétique. Les points Σ_i sont des points de symétrie équivalentes, tout comme le sont les coins de la zone de Brillouin magnétique. L'étude présente se porte sur le point Σ_1 . A chacun des points Σ_i correspondent des états liés, dont la polarisation dépend du point choisi ainsi que du profil choisi. L'ovale autour de chaque point représente une équipotentielle de $E(\mathbf{p})$ avec E donnée par (2.7). On a représenté la polarisation des états liés de conduction correspondant à un skyrmion de Néel ($\gamma = 0$) décrit par le profil de Belavin-Polyakov. Cette polarisation est opposée pour les états de valence, et sa direction \mathbf{e}_σ dépend uniquement de l'hélicité γ selon $\mathbf{e}_\sigma = (\cos \gamma, \sin \gamma, 0)^t$.

$$\begin{aligned}\varepsilon_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{p}) &= vp_y + \frac{p_i^2}{2m_i}, \\ \varepsilon_{\mathbf{p}_0+\mathbf{Q}}(\mathbf{p}) &= -vp_y + \frac{p_i^2}{2m_i},\end{aligned}\tag{2.29}$$

avec v la vitesse de Fermi et m_i les masses de bande du système paramagnétique parent. Les directions x et y sont prises respectivement le long et perpendiculairement au bord de la zone de Brillouin magnétique, voir la figure 2.1. On en déduit que autour du point Σ_1 , en appliquant la substitution de Pierls (2.19), on a

$$\begin{aligned}\gamma_+ &= v\mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \sum_{i=x,y} \frac{1}{2m_i} \left[(\hat{p}_i + A_i^z \sigma^z)^2 + (A_i^{\parallel})^2 \right] \\ \gamma_- &= v(\hat{p}_y + A_y^z \sigma^z) + \frac{1}{2m_i} \{ \hat{p}_i, \mathbf{A}_i^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} \}\end{aligned}\tag{2.30}$$

où $\mathbf{A}_i^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} = A_i^x \sigma^x + A_i^y \sigma^y$ est la composante dans le plan x, y du potentiel vecteur $\mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}$. On peut alors réécrire le hamiltonien (2.27) à l'ordre 0 en Δ^{-1} simplement comme

$$H_0 = \gamma_+ = v \cdot \mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \sum_{i=x,y} \frac{1}{2m_i} \left[(\hat{p}_i + A_i^z \sigma^z)^2 + (A_i^{\parallel})^2 \right].\tag{2.31}$$

Le terme d'ordre 1 s'écrit quand à lui comme

$$H_1 = \frac{(\gamma_-)^2}{2\Delta} = \frac{1}{2\Delta} \left(v(\hat{p}_y + A_y^z \sigma^z) + \frac{1}{2m_i} \{ \hat{p}_i, \mathbf{A}_i^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} \} \right)^2.\tag{2.32}$$

On considère un matériau dont le paramètre d'ordre Néel \mathbf{n} varie sur une longueur caractéristique L grande devant le pas du réseau atomique a_0 . On définit maintenant le paramètre de maille effectif $a \equiv \frac{\hbar}{mv} = \frac{\Delta}{\varepsilon_F} \xi$, avec $\xi \equiv \frac{\hbar v}{\Delta}$ la longueur de cohérence⁵ du matériau et $\varepsilon_F = m_y v^2$ la largeur caractéristique de bande, où m_y est de l'ordre de la masse électronique m . Par construction les deux longueurs a et a_0 doivent être du même ordre de grandeur⁶. On en déduit que, sans surprise, il existe une hiérarchie entre les termes du premier et second ordre dans le développement (2.29),

$$\left| v(\hat{p}_y + A_y^z \sigma^z) \right| \sim \Delta \frac{\xi}{L} \gg \left| \frac{1}{2m_i} \{ \hat{p}_i, \mathbf{A}_i^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} \} \right| \sim \Delta \frac{\Delta \xi^2}{\varepsilon_F L^2} \sim \Delta \frac{\xi}{L} \frac{a}{L}.\tag{2.33}$$

On peut donc approximer le hamiltonien d'ordre 1 comme

$$H_1 \simeq \frac{v^2}{2\Delta} (\hat{p}_y + A_y^z \sigma^z)^2.\tag{2.34}$$

5. Le nom est choisi par analogie avec la théorie des supraconducteurs où la définition de cette longueur est similaire. Sa représentation physique ne peut être ici traduite par la taille caractéristique d'une paire de Cooper. Elle décrit plutôt la longueur caractéristique imposée par le matériau ferromagnétique utilisé.

6. Cela se montre par exemple en regardant une relation de dispersion ayant des termes de la forme $t \cos(\frac{a_0}{\hbar} p_i)$ qui développée à l'ordre deux donne $v \sim t \frac{a_0}{\hbar}$ et $m^{-1} \sim t \frac{a_0^2}{\hbar^2}$.

On voit alors qu'il ne modifie pas la structure du hamiltonien d'ordre 0, il ne fait que renormaliser la masse effective selon la direction y

$$m_y^{-1} \longrightarrow (m_y^*)^{-1} = m_y^{-1} + \frac{v^2}{\Delta}. \quad (2.35)$$

Cette renormalisation est cependant loin d'être négligeable, en effet on a

$$\frac{m_y}{m_y^*} \sim \frac{m_y v^2}{\Delta} \sim \frac{\varepsilon_F}{\Delta} \gg 1. \quad (2.36)$$

On a alors $(m_y^*)^{-1} \gg m_x^{-1}$ puisque m_x est de l'ordre de la masse électronique m ou plus grande (dans le cas où il ne peut y avoir que des sauts entre atomes premiers voisins, on a $m_x^{-1} = 0$). On a donc en réalité un hamiltonien effectif

$$H = \frac{1}{2m_i^*} (\hat{p}_y + A_y^z \sigma^z)^2 + v \mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{(A_i^{\parallel})^2}{2m_i} \quad (2.37)$$

avec $m_x^* = m_x$. On peut noter ici que ce hamiltonien présente deux termes de potentiels, dont on peut à nouveau évaluer les ordres de grandeurs respectifs. Pour un paramètre d'ordre Néel \mathbf{n} variant sur une longueur caractéristique L on a

$$|v \mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma}| \sim \Delta \frac{\xi}{L} \gg \left| \frac{(A_i^{\parallel})^2}{2m_i} \right| \sim \Delta \frac{a\xi}{L^2}. \quad (2.38)$$

Il est donc tout à fait légitime de négliger le second terme de potentiel comparé au premier, puisqu'on se place ici dans le cadre d'application d'un modèle continu pour lequel $L \gg a$. On traitera donc par la suite le hamiltonien

$$H = v \mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2m_i^*} (\hat{p}_y + A_y^z \sigma^z)^2 \quad (2.39)$$

Ce hamiltonien possède une structure inhabituelle, et ne semble pas invariant de jauge puisque les trois composantes de spin du champ de jauge n'interviennent pas de manière équivalente. On va cependant devoir regarder de plus près comment se transforme ce champ de jauge avant de statuer.

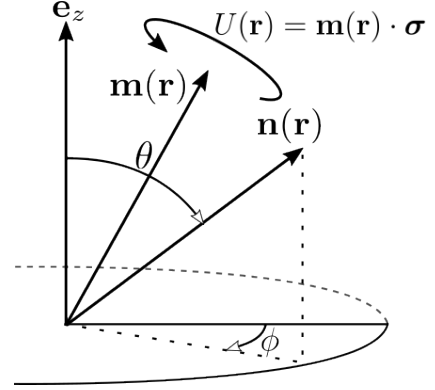
2.2 Champ de jauge

2.2.1 Construction

Il faut maintenant expliciter le champ de jauge A_i^α qui décrit la texture de spin du matériau sous-jacent. Pour cela il faut commencer par choisir un opérateur U réalisant la rotation décrite dans l'équation (2.16). L'opérateur

$$U(\mathbf{r}) = \mathbf{m}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.40)$$

avec \mathbf{m} le vecteur bissecteur entre le paramètre d'ordre Néel \mathbf{n} et la verticale \mathbf{e}_z [31] s'avère très commode à manipuler. Il correspond géométriquement à faire une rotation d'angle π autour du vecteur \mathbf{m} dans l'espace de spin.



On peut noter que le choix de jauge, plus immédiat, consistant plutôt à considérer une rotation d'angle θ autour de $\mathbf{e}_\phi = (\sin \phi, -\cos \phi, 0)^t$, décrite par l'opérateur $U_\theta = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \mathbb{1} - i \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \mathbf{e}_\phi \cdot \boldsymbol{\sigma}$ conduit évidemment aux mêmes résultats.

On peut maintenant utiliser (2.40) pour construire le potentiel vecteur, on a

$$\mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} = -i\hbar \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma} \partial_i \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \hbar \mathbf{m} \times \partial_i \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.41)$$

où on a utilisé la propriété générale des matrices de Pauli

$$(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{n} \cdot \mathbf{m} \mathbb{1} + i(\mathbf{n} \times \mathbf{m}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.42)$$

associée au fait que $\partial_i(\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}) = 2\mathbf{m} \cdot \partial_i \mathbf{m} = 0$. On peut maintenant exprimer le paramètre d'ordre Néel en coordonnées sphériques

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

pour obtenir, après un calcul simple mais laborieux,

$$\mathbf{A}_i = \frac{\partial_i \theta}{2} \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{\partial_i \phi}{2} \begin{pmatrix} -\sin \theta \cos \phi \\ -\sin \theta \sin \phi \\ 1 - \cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

On s'est placé ici dans le système d'unité pour lequel $\hbar = 1$, il en sera de même pour la suite du manuscrit, sauf pour les estimations d'ordre de grandeur pour lesquelles la dimension des différents termes n'est pas évidente.

2.2.2 Propriétés

Si on regarde de plus près la relation (2.16) définissant l'opérateur U , on voit que ce dernier est défini à une rotation près autour de l'axe porté par \mathbf{e}_z . En effet si on définit

$$U'(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})V_z(\mathbf{r}), \quad V_z(\mathbf{r}) = e^{i\chi(\mathbf{r})\sigma^z} \quad (2.45)$$

avec $\chi(\mathbf{r})$ un champ angulaire monovalué quelconque, on a alors

$$(U')^\dagger [\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}] U' = V^\dagger U^\dagger [\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}] U V_z = V^\dagger \sigma^z V = \sigma^z. \quad (2.46)$$

Cette propriété implique que le champ de jauge A_i^α se transforme comme

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{A}}_i &= -iV_z^\dagger U^\dagger \partial_i (UV_z) \\ &= V_z^\dagger \mathbf{A}_i V_z - iV_z^\dagger \partial_i V_z \\ &= V_z^\dagger \mathbf{A}_i^\parallel V_z + A_i^z \sigma^z + \partial_i \chi \sigma^z. \end{aligned} \quad (2.47)$$

On peut ici noter que bien que ce champ de jauge soit non abélien, il obéit à une transformation de jauge qui est quant à elle abélienne. Cette transformation se traduit par une rotation d'angle 2χ du potentiel vecteur \mathbf{A}_i^\parallel , ce dernier étant la partie du vecteur \mathbf{A}_i contenue dans le plan Oxy . Les composantes verticales A_i^z subissent quant à elles une transformation de jauge analogue à celle d'un champ électromagnétique

$$A_i^z \longrightarrow A_i^z + \partial_i \chi(\mathbf{r}). \quad (2.48)$$

On peut noter qu'en plus de la transformation ci dessus, il existe aussi une rotation autour de \mathbf{n} qui laisse invariante la transformation (2.16). On voit en effet qu'en définissant l'opérateur $W(\mathbf{r}) = e^{i\phi(\mathbf{r})\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}}$ avec ϕ un champ angulaire monovalué, on a

$$U^\dagger W^\dagger [\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}] W U = U^\dagger \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} U = \sigma^z. \quad (2.49)$$

Cela implique la transformation de jauge

$$\tilde{\mathbf{A}}_i = \mathbf{A}_i - iU^\dagger [W^\dagger \partial_i W] U. \quad (2.50)$$

On va montrer que cette transformation correspond, là encore, à une rotation dans le plan des composantes \mathbf{A}_i^\parallel , associé à une transformation électromagnétique pour les composantes A_i^z . Pour cela on réécrit l'opérateur W comme

$$W = e^{i\phi \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}} = \cos(\phi) + i \sin(\phi) \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.51)$$

cela permet d'obtenir

$$\begin{aligned} W^\dagger \partial_i W &= W^\dagger [(-\sin \phi + i \cos \phi \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \partial_i \phi + i \sin \phi \partial_i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}] \\ &= W^\dagger [i \partial_i \phi \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} W + i \sin \phi \partial_i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}] \\ &= i \partial_i \phi \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} + i \sin \phi W^\dagger \partial_i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{aligned} \quad (2.52)$$

et donc

$$\tilde{\mathbf{A}}_i = \mathbf{A}_i + \partial_i \phi \sigma^z + U^\dagger \left[\frac{\sin 2\phi}{2} \partial_i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \sin^2 \phi (\mathbf{n} \times \partial_i \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] U. \quad (2.53)$$

Le dernier terme appartient au plan orthogonal⁷ à \mathbf{e}_z et ne contribue donc qu'à la transformation de la composante dans le plan \mathbf{A}_i^\parallel . On veut maintenant montrer que cette composante dans le plan ne subit qu'une rotation. Pour cela on applique l'opérateur ∂_i à la relation définissant U , (2.16), pour obtenir

$$\partial_i U^\dagger \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} U + U^\dagger \partial_i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} U + U^\dagger \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \partial_i U = 0. \quad (2.54)$$

En multipliant à droite par $U^\dagger \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} U = \sigma^z$ on obtient alors

$$\partial_i U^\dagger U - i U^\dagger (\mathbf{n} \times \partial_i \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma} U + \sigma^z U^\dagger \partial_i U \sigma^z = 0. \quad (2.55)$$

Si on utilise maintenant que $\partial_i (U^\dagger U) = 0$ et donc que $U^\dagger \partial_i U = -\partial_i U^\dagger U$, on obtient

$$U^\dagger \partial_i U - \sigma^z U^\dagger \partial_i U \sigma^z = -i U^\dagger (\mathbf{n} \times \partial_i \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma} U. \quad (2.56)$$

Cela signifie, au regard de la définition (2.19) du champ de jauge A_i^α , que la composante dans le plan du champ peut s'écrire comme

$$\mathbf{A}_i^\parallel = -\frac{1}{2} U^\dagger [(\mathbf{n} \times \partial_i \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma}] U. \quad (2.57)$$

Maintenant qu'on connaît cette expression, on peut l'utiliser conjointement avec (2.53) pour obtenir

$$\tilde{\mathbf{A}}_i^\parallel = U^\dagger \left[\frac{\sin 2\phi}{2} \partial_i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \left(\sin^2 \phi - \frac{1}{2} \right) (\mathbf{n} \times \partial_i \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] U. \quad (2.58)$$

Cela signifie que la norme des composantes dans le plan \mathbf{A}_i^\parallel du champ de jauge s'écrit

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbf{A}}_i^\parallel)^2 &= U^\dagger \left[\left(\sin^2 \phi - \frac{1}{2} \right)^2 \|\partial_i \mathbf{n}\|^2 + \cos^2 \phi \sin^2 \phi \|\partial_i \mathbf{n}\|^2 \right] U \\ &= \frac{1}{4} \|\partial_i \mathbf{n}\|^2 = (\mathbf{A}_i^\parallel)^2. \end{aligned} \quad (2.59)$$

On constate ainsi que les normes des composantes dans le plan \mathbf{A}_i^\parallel du champ de jauge sont conservées, signifiant qu'elles ne subissent qu'une simple rotation dans le plan Oxy de l'espace de spin. On obtient donc finalement que les deux transformations de jauge (2.47) et (2.50) associées au champ de jauge $\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ sont finalement physiquement

7. Cela se voit en remarquant que $\partial_i \mathbf{n}$ et $\mathbf{n} \times \partial_i \mathbf{n}$ sont tout deux orthogonaux à \mathbf{n} . Lorsque l'opérateur U envoie \mathbf{n} sur \mathbf{e}_z il rend donc ces deux vecteurs orthogonaux à \mathbf{e}_z puisqu'une rotation conserve les angles.

équivalentes. Cette équivalence est explicite lorsqu'on considère les transformations pour des angles infinitésimaux χ et ϕ , auquel cas on a

$$\begin{aligned}\delta \mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} &= \tilde{\mathbf{A}}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= -i(1 - i\chi\sigma^z) U^\dagger \partial_i (U(1 - i\chi\sigma^z)) - \mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= i\chi [\mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}, \sigma^z] + \partial_i \chi \sigma^z\end{aligned}\tag{2.60}$$

et

$$\begin{aligned}\delta \mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} &= -iU^\dagger [(1 - i\phi \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \partial_i (1 + i\phi \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})] U \\ &= \phi U^\dagger [\partial_i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}] U + \partial_i \phi \sigma^z \\ &= i\phi [\mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}, \sigma^z] + \partial_i \phi \sigma^z,\end{aligned}\tag{2.61}$$

où on a utilisé que

$$\begin{aligned}-i\partial_i (U^\dagger \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} U) &= [\sigma^z, \mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}] - iU^\dagger \partial_i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} U \\ &\underset{\text{aussi}}{=} -i\partial_i \sigma^z = 0.\end{aligned}$$

On voit donc bien que sous cette forme infinitésimale l'équivalence des deux transformations de jauge apparaît explicitement.

On peut maintenant remarquer que seules les composantes A_i^z du champ de jauge entrent dans le terme cinétique du hamiltonien (2.37), ce dernier est donc bien invariant sous les transformations de jauge (2.47) et (2.50). Il en va de même pour les termes de potentiel qui ne font intervenir que les composantes dans le plan \mathbf{A}_i^\parallel du champ de jauge.

2.2.3 Invariants de jauge

On peut se demander quels sont les invariants associés avec les deux transformations de jauge équivalentes présentées ci dessus, et quelles sont leurs expressions. Le premier invariant se construit en utilisant le fait que sous ces transformations les composantes dans le plan \mathbf{A}_i^\parallel du champ de jauge ne subissent qu'une rotation. Cela implique que leur norme ainsi que leur produit vectoriel est conservé. Le calcul de leurs normes conduit à

$$(\mathbf{A}^\parallel)^2 = \frac{1}{4} (\partial_i \theta \partial^i \theta + \sin^2 \theta \partial_i \phi \partial^i \phi) = \frac{1}{4} \partial_i \mathbf{n} \partial_i \mathbf{n},\tag{2.62}$$

on voit que cet invariant correspond à l'intégrande de l'action d'un aimant isotrope, qui doit naturellement être conservée sous la transformation de jauge (2.47). Le produit vectoriel s'écrit quant à lui

$$\mathbf{A}_i^\parallel \times \mathbf{A}_j^\parallel = \frac{1}{4} \sin \theta (\partial_i \theta \partial_j \phi - \partial_j \theta \partial_i \phi) = \frac{1}{2} (\partial_i \mathbf{n} \times \partial_j \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = 2\pi \mathcal{D}_s(\mathbf{r}),\tag{2.63}$$

avec \mathcal{D}_s la densité de skyrmion[31] ou densité de charge topologique. On a vu en introduction qu'elle est telle que son intégrale est égale à la somme des charges topologiques des skyrmions présents dans le plan

$$\int d^2r \mathcal{D}_s(\mathbf{r}) = \int d^2r \frac{1}{4\pi} (\partial_i \mathbf{n} \times \partial_j \mathbf{n}) \cdot \mathbf{n} = \sum_i Q_i. \quad (2.64)$$

Cet invariant est donc là encore un invariant naturel du problème.

Les composantes A_i^z du champ de jauge obéissant à la transformation de jauge de l'électromagnétisme, il est naturel de se pencher sur le tenseur complètement antisymétrique

$$F_{ij}^z = \partial_i A_j^z - \partial_j A_i^z. \quad (2.65)$$

Cet invariant s'exprime comme

$$\begin{aligned} F_{ij}^z &= \partial_i \left(\partial_j \phi \frac{1 - \cos \theta}{2} \right) - \partial_j \left(\partial_i \phi \frac{1 - \cos \theta}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sin \theta (\partial_i \theta \partial_j \phi - \partial_j \theta \partial_i \phi), \end{aligned} \quad (2.66)$$

on obtient donc à nouveau la densité de charge topologique. On constate ainsi qu'il n'y a en réalité que deux invariants de jauge distincts associés à la transformation (2.47). Il est naturel que ce champ de jauge, construit géométriquement, soit associé au seul invariant topologique en jeu : la charge topologique totale.

On peut noter que le tenseur antisymétrique qu'on utilise habituellement pour les transformations de jauge non abéliennes, est ici identiquement nul

$$\mathbf{F}_{ij} \equiv \partial_i \mathbf{A}_j - \partial_j \mathbf{A}_i + i [\mathbf{A}_i, \mathbf{A}_j] = 0. \quad (2.67)$$

C'est dû au fait que les deux composantes de ce tenseur sont toute deux proportionnelles à la densité de charge, et se compensent donc parfaitement. Ce résultat n'a rien de surprenant puisque, on le rappelle, bien que le champ de jauge A_i^α soit non abélien, la transformation qui lui est associée est quant à elle bien abélienne.

Nous avons établi le hamiltonien décrivant l'interaction entre un électron de conduction et une texture magnétique antiferromagnétique, ainsi que la structure de jauge associée. On peut maintenant se tourner vers l'étude spécifique de l'interaction d'un électron avec un skyrmion antiferromagnétique.

3

Belavin-Polyakov aux basses énergies

On veut dans ce chapitre étudier l'interaction d'un électron avec un skyrmion, en commençant par traiter un profil modèle, tractable analytiquement. On commence pour cela par traiter le cas où le skyrmion considéré ne produit que des états propres électroniques dont l'énergie est faible comparé à l'écart d'énergie Δ entre les deux bandes de la structure énergétique électronique d'un aimant antiferromagnétique. On verra notamment que la présence d'un skyrmion peut conduire à l'apparition d'états liés électron-skyrmion. On verra aussi que ces états liés disparaissent lorsque la taille effective du skyrmion passe en dessous d'un certain seuil.

Contenu du chapitre

| | |
|---|-----------|
| 3.1 Définitions et propriétés | 33 |
| 3.1.1 Définitions | 33 |
| 3.1.2 Propriétés du profil de Belavin-Polyakov | 34 |
| 3.2 Résolution du hamiltonien de basse énergie | 36 |
| 3.3 Disparition des états liés aux petits rayons | 38 |
| 3.3.1 Modèle jouet isotrope | 38 |
| 3.3.2 Cas réel | 42 |
| 3.3.3 Validité du hamiltonien de basse énergie pour la description de la disparition des états liés | 46 |

3.1 Définitions et propriétés

3.1.1 Définitions

On veut maintenant se tourner vers l'étude spécifique de l'interaction d'un électron avec un skyrmion antiferromagnétique. On ne considère ici que l'effet d'un skyrmion préalablement formé sur les électrons voisins, en considérant le skyrmion comme une entrée statique et immuable du problème. Cette approximation ignore donc l'existence de modes propres de déformation pour les skyrmions, qui peuvent à priori être excités par les électrons. Nous reviendrons plus tard sur les limitations d'une telle approximation, qui sera discutée spécifiquement pour les deux profils de skyrmions traités dans ce manuscrit.

Commençons donc ici par se donner un profil de skyrmion comme entrée, afin d'explicitier le champ de jauge à l'origine du potentiel effectif ressenti par les électrons. On rappelle qu'un skyrmion est décrit, en coordonnées sphériques

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

par la donnée des angles $\theta(\mathbf{r}) \equiv \theta(r)$ et $\phi = Q\alpha + \gamma$ en fonction des coordonnées polaires du plan $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ et $\alpha = \arctan \frac{y}{x}$. Les deux paramètres Q et γ représentent respectivement la charge et l'hélicité du skyrmion. Les cas particuliers $\gamma = 0$ et $\gamma = \frac{\pi}{2}$ correspondent respectivement à des skyrmions dits de Néel et de Bloch.

On considère tout d'abord le cas modèle d'un aimant antiferromagnétique isotrope pour lequel la densité d'énergie due aux interactions spin-spin vaut $A(\nabla \mathbf{n})^2$ dans la limite du continu, avec A l'élasticité. Dans ce cas le profil de skyrmion minimisant l'énergie dans le secteur topologique indexé par le nombre d'enroulement Q est celui dit de Belavin-Polyakov [5, 4]. Il est défini dans le cas simple $Q = 1$ auquel on se restreint ici par

$$\sin \theta = \frac{2z}{1 + z^2}, \quad z = \frac{r}{R}, \quad (3.2)$$

voir figure 3.1 pour une représentation graphique. Il a la particularité de ne faire intervenir qu'un unique paramètre R , le rayon du skyrmion. On peut de plus noter que l'énergie $4\pi A Q$ associée à un unique skyrmion est indépendante du rayon du skyrmion.

Lorsque l'isotropie est perdue à cause d'un terme d'anisotropie favorisant un axe particulier, ou un terme d'interaction dit de Dzyaloshinskii-Moriya, le profil adopté est plus complexe mais demeure proche de ce profil dans la limite où l'amplitude de l'interaction de Dzyaloshinskii-Moriya demeure faible¹ devant les autres [7]. Il est donc naturel

1. En reprenant les notations de l'équation (1.13) de l'introduction, le bon critère pour observer le profil de Belavin-Polyakov comme solution minimisant l'énergie (1.12) pour une charge topologique non nulle $Q \neq 0$ est $\epsilon \ll 1$. On rappelle que ce minimum est local, et que les skyrmions ne sont dans ce régime que métastables en l'absence de champ magnétique extérieur.

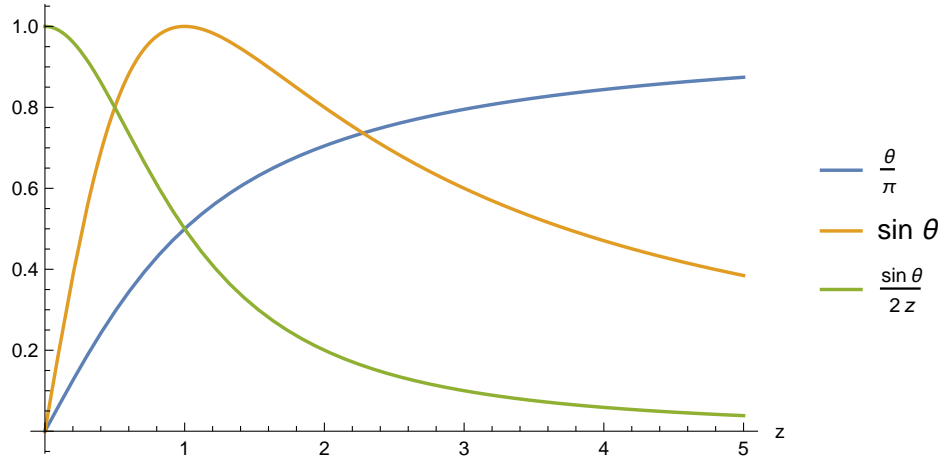


FIGURE 3.1 – Différents aspects du profil de Belavin-Polyakov. On a tracé en bleu l'angle orbital θ en fonction de la variable réduite z . Cet angle est défini via son sinus selon la relation (3.2), ce dernier est tracé en orange. On a tracé en vert l'allure caractéristique du terme de potentiel dominant, proportionnel à A_y^{\parallel} .

de commencer par étudier ce profil modèle, qui présente de plus certaines commodités mathématiques, comme on va le voir dans la section suivante.

On se place pour la suite de ce chapitre et le suivant dans le cadre d'un skyrmion de charge $Q = 1$, sauf dans la section dédiée où on montrera que ce cas simple illustre bien les propriétés générales du profil de Belavin-Polyakov.

3.1.2 Propriétés du profil de Belavin-Polyakov

En utilisant ce profil on peut aisément établir l'expression des différents termes de jauge qui vont intervenir dans la résolution du hamiltonien (2.39). On peut cependant commencer par noter que la définition (3.2) seule ne suffit pas à déterminer les composantes

$$A_i^z = \frac{\partial_i \phi}{2} (1 - \cos \theta) \quad (3.3)$$

pour lesquelles on doit spécifier les conditions aux limites $\theta(0)$ et $\lim_{r \rightarrow \infty} \theta$. Il semble à première vue surprenant que ce choix puisse importer, puisqu'on traite ici d'un skyrmion antiferromagnétique, les limites $\lim_{r \rightarrow \infty} \theta = 0$ ou π ne correspondent donc en principe qu'à un choix arbitraire concernant la définition du paramètre d'ordre Néel $\mathbf{n} = \pm \frac{\mathbf{M}_1 - \mathbf{M}_2}{2M_s}$. On voit cependant que si on fait le choix $\theta(0) = \pi$ notre paramétrisation conduit à une singularité au centre du skyrmion. On a en effet que dans ce cas les deux composantes se comportent comme

$$A_x^z \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{-\sin \alpha}{r}, \quad A_y^z \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{\cos \alpha}{r} \quad (3.4)$$

au centre du skyrmion. L'unique choix pertinent est donc $\theta(0) = 0$ et $\lim_{r \rightarrow \infty} \theta = \pi$, correspondant à considérer, dans le cas du profil de Belavin-Polyakov

$$\cos \theta = \frac{1 - z^2}{1 + z^2}. \quad (3.5)$$

Cette précision permet d'exprimer les deux composantes A_i^z du champ de jauge comme

$$A_x^z = \frac{-y}{R^2 + r^2}, \quad A_y^z = \frac{x}{R^2 + r^2}. \quad (3.6)$$

On peut noter que la circulation de la composante z du potentiel vecteur

$$\oint \mathbf{A}^z \cdot d\mathbf{l} \quad (3.7)$$

vaut approximativement² 2π lorsque le contour d'intégration est pris grand devant le rayon du skyrmion, ce qui n'est qu'une manifestation de l'équation (2.66). Cela signifie qu'un électron passant loin d'un skyrmion ressentira un flux³ de $\pm 2\pi$ selon l'orientation de son spin.

La particularité du profil de Belavin-Polyakov est que, pour ce profil spécifiquement, les composantes dans le plan Oxy du potentiel vecteur sont indépendantes de la coordonnée angulaire α du plan dans le cas d'un skyrmion de charge $Q = 1$. Prenons en guise d'exemple la composante

$$A_y^x = -\frac{\partial_y \theta}{2} \sin \phi - \frac{\partial_y \phi}{2} \sin \theta \cos \phi \quad (3.8)$$

et considérons le cas d'un skyrmion de charge 1 et d'hélicité quelconque, dont le profil angulaire est donc $\phi = \alpha + \gamma$. On a alors, en notant $\theta'(r) = \frac{d\theta}{dr}$,

$$\begin{aligned} A_y^x &= -\frac{1}{2} \cos \alpha \cos \phi \theta' - \frac{1}{2r} \sin \alpha \sin \phi \sin \theta, \\ &= -\frac{1}{2} \cos \alpha \sin \alpha \sin \gamma \left(\frac{\sin \theta}{r} - \theta' \right) - \frac{1}{2} \cos \gamma \left(\cos^2 \alpha \theta' + \sin^2 \alpha \frac{\sin \theta}{r} \right). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Or, il se trouve que le profil de Belavin-Polyakov en particulier est tel que

$$\theta'(r) = \frac{1}{R} \frac{2}{1 + z^2} = \frac{\sin \theta}{r}, \quad (3.10)$$

il est donc le profil pour lequel, dans le cas d'un skyrmion de charge 1, les composantes du potentiel vecteur sont indépendantes de l'angle polaire α . On a alors

$$\mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} \equiv A_y^x \sigma^x + A_y^y \sigma^y = -\frac{\sin \theta}{2r} \mathbf{e}_\sigma \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.11)$$

2. Dans le cas général l'équation (3.7) tend vers $2\pi \sum_i Q_i$ lorsque le contour d'intégration englobe largement un groupe de skyrmions de charges $\{Q_i\}$.

3. Dans le cas général d'un skyrmion de charge quelconque Q , le flux ressenti sera donc de $\pm 2\pi Q$.

avec $\mathbf{e}_\sigma = (\cos \gamma, \sin \gamma, 0)^t$ le vecteur unitaire donnant la direction de \mathbf{A}_y^\parallel dans l'espace de spin. On peut de plus noter que, quel que soit le profil, les composantes A_i^z du champ de jauge ne dépendent pas de l'hélicité. Cela nous permet de voir que dans le cas spécifique du profil de Belavin-Polyakov, l'hélicité ne fait que définir la direction dans le plan de la composante \mathbf{A}_y^\parallel du champ de jauge. On se restreindra donc sans perte de généralité au cas d'un skyrmion de Néel ($\gamma = 0$) dans l'étude de l'interaction d'un électron avec un skyrmion décrit par le profil de Belavin-Polyakov. On aura ainsi

$$\mathbf{A}_y^\parallel \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\frac{1}{R} \frac{1}{1+z^2} \sigma^x. \quad (3.12)$$

3.2 Résolution du hamiltonien de basse énergie

On dispose maintenant de tous les ingrédients nécessaires pour écrire explicitement l'équation de Schrödinger associée au hamiltonien effectif de basse énergie (2.39) précédemment construit. On peut commencer par noter que la forte anisotropie $m_y^* \ll m_x^*$ induite par le terme d'ordre Δ^{-1} rend le degré de liberté y très rapide par rapport à l'autre degré de liberté spatial x . On peut donc utiliser ici l'approximation de Born-Oppenheimer[38], qui est habituellement utilisée pour traiter des molécules. Elle stipule que la dynamique des électrons étant bien plus rapide que celle des noyaux, on peut commencer par calculer les orbitales et énergies propres des électrons en considérant les noyaux atomiques comme immobiles. On obtient alors des fonctions d'onde et des énergies qui dépendent paramétriquement de la position des noyaux. On réintroduit alors les opérateurs liés à la dynamique des noyaux pour obtenir une approximation des énergies réelles, prenant en compte la dynamique des électrons et des noyaux.

Dans le cas présent on va commencer par traiter le degré de liberté rapide y , en le considérant comme oscillant dans un potentiel dépendant paramétriquement du degré de liberté lent x . On commence donc par traiter le hamiltonien

$$\frac{H}{\Delta} = \frac{\xi^2}{2R^2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} + \frac{\tilde{x}^2}{(1+z^2)^2} \right) - \frac{\xi}{R} \frac{1}{1+z^2} \sigma^x. \quad (3.13)$$

On a adimensionné les variables d'espace $\tilde{x}_i = \frac{x_i}{R}$, tel que $z^2 = \tilde{x}^2 + \tilde{y}^2$. On a considéré $(m_y^*)^{-1} \simeq \frac{v^2}{2\Delta}$ et utilisé la longueur de cohérence $\xi = \frac{\hbar v}{\Delta}$. L'anticommutateur $\{\hat{p}_y, A_y^z \sigma^z\}$ a été négligé puisqu'il est proportionnel à σ^z et n'intervient donc qu'à l'ordre deux de la théorie des perturbations⁴, le terme de potentiel dominant étant orienté selon σ^x dans l'espace de spin. Il apparaît à la vue de ce hamiltonien qu'à la composante $|+\rangle_x$ de la fonction d'onde va correspondre un état lié électron-skyrmion, puisqu'alors le terme de potentiel dominant sera attractif. Il est possible d'estimer les énergies des états liés de

4. Cet argument pourra être rendu plus visuel lorsqu'on aura établi la structure des états liés, voir figure 4.6. On voit alors bien que dans la limite des petites énergies $R \gg \xi$, un couplage entre états de polarisations différentes ne peut avoir qu'une faible amplitude puisque l'écart d'énergie entre deux états de polarisation opposées est alors de l'ordre du gap 2Δ .

plus basses énergies en réalisant un développement harmonique du potentiel. On a alors

$$\left[-\frac{\xi^2}{2R^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} - \tilde{x}^2 \right) - \frac{\xi}{R} (1 - z^2) \right] \psi^{\uparrow x} = \frac{\varepsilon}{\Delta} \psi^{\uparrow x} \quad (3.14)$$

correspondant à une série d'énergies potentielles effectives

$$\frac{\varepsilon_x^n}{\Delta} = \frac{\xi}{R} \left(-1 + \left(n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{2\xi}{R}} + \left[1 + \frac{\xi}{2R} \right] \tilde{x}^2 \right) \quad (3.15)$$

agissant chacune comme un potentiel effectif pour le degré de liberté lent \tilde{x} . La réintroduction de l'opérateur différentiel associé au degré de liberté lent,

$$\frac{\hat{p}_x^2}{2m_x^*} = \Delta \frac{\varepsilon}{2} \frac{\xi^2}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2}, \quad (3.16)$$

avec $\varepsilon = \frac{m_y a}{m_x \xi} \ll 1$, conduit finalement aux niveaux d'énergie

$$\frac{\varepsilon_m^n}{\Delta} = \frac{\xi}{R} \left[-1 + \left(n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{2\xi}{R}} + \left(m + \frac{1}{2} \right) \sqrt{2\varepsilon} \left(\frac{\xi}{R} \right)^{3/2} \sqrt{1 + \frac{\xi}{2R}} \right] \quad (3.17)$$

Le paramètre infinitésimal ε reflète la forte anisotropie du terme cinétique, et sa présence indique que la contribution à l'énergie du degré de liberté lent est faible. On peut ainsi voir la structure énergétique associée au degré de liberté lent x comme la structure fine du problème, attachée à la structure énergétique principale due au degré de liberté rapide y .

On peut noter que les états liés que l'on vient d'identifier ont tous la même polarisation⁵ $|+\rangle_x$, et qu'il en sera de même si on choisit un autre point Γ_i de la zone de Brillouin magnétique pour réaliser le développement de $\varepsilon(\mathbf{p})$ (2.29). Il faudra alors pour chaque point Σ_i redéfinir l'axe x à partir duquel on définit l'hélicité et ainsi le vecteur \mathbf{e}_σ . Il faut faire attention au fait que cette polarisation est obtenue après les applications successives des opérateurs U^\dagger et \mathbf{P}^\dagger à la fonction d'onde physique vivant dans l'espace réel. On peut cependant noter que l'application de l'opérateur \mathbf{P}^\dagger ne modifie pas la polarisation de l'état considéré⁶. On a de plus que les états de fond de puits discutés ici sont localisés au centre du skyrmion. Or l'opérateur U est proche de l'identité dans cette région puisqu'au centre du skyrmion les moments magnétiques pointent selon \mathbf{e}_z . L'application de U modifie donc peu la polarisation $|+\rangle_x$ des états discutés ici. On verra

5. La polarisation sera $|+\rangle_{\mathbf{e}_\sigma}$ dans le cas général d'une hélicité quelconque γ .

6. Cela apparaîtra plus clairement dans la suite du manuscrit. On peut tout de même synthétiser en disant que si les états liés proches de la bande de valence (d'énergies proches de $-\Delta$) sont polarisés $|-\rangle_x$ (ce qui est le cas comme on le verra par la suite) alors l'application de l'opérateur \mathbf{P} laisse bien les polarisations des deux spineurs composant la fonction d'onde inchangées.

plus tard que la discussion générale est un peu plus subtile, elle sera réalisée pour étudier les possibles transitions optiques entre niveaux d'énergie correspondant à des états liés. La polarisation indiquée sur la figure 2.2 correspond donc à celles des niveaux (de valence) de plus basse énergie dans le cas d'un skyrmion de Néel pour lequel $\gamma = 0$.

L'énergie caractéristique des états liés (3.17) que l'on vient de dériver demeure petite devant Δ pour des skyrmions dont le rayon R est grand devant la longueur de cohérence ξ . Lorsque le rayon approche la longueur de cohérence, cette énergie devient comparable à Δ et la dérivation du hamiltonien effectif (2.27) devient caduque. Si on veut prolonger le tracé de l'énergie de l'état fondamental en fonction du rayon R on doit donc semblait-il traiter le hamiltonien complet (2.21), ce qui semble à première vue compliqué, ce dernier agissant notamment sur des bispineurs. On va donc dans un premier temps explorer la limite $R \ll \xi$, où, comme on va le voir, il est possible de continuer à utiliser le hamiltonien de basse énergie (2.39).

3.3 Disparition des états liés aux petits rayons

3.3.1 Modèle jouet isotrope

On cherche ici à profiter du fait que dans le cas du profil de Belavin-Polyakov la composante dans le plan du champ de jauge \mathbf{A}_i^{\parallel} est invariante par rotation dans l'espace réel, pour simplifier le problème et faire une conjecture générale. Essayons pour cela de considérer le cas d'un modèle jouet analogue à notre problème pour lequel on aurait des masses effectives isotropes. On considère dans ce cas le hamiltonien

$$H_i = \sum_{i=x,y} \frac{1}{2m^*} (\hat{p}_i + A_i^z \sigma^z)^2 + v A_y^x \sigma^x \quad (3.18)$$

ne faisant intervenir qu'une unique masse effective m^* . Considérons, seulement pour la démonstration de la propriété suivante, le cas général d'un skyrmion de charge topologique quelconque⁷ Q . On a alors

$$A_x^z = -Q \frac{\sin \alpha}{2r} (1 - \cos \theta) \quad \text{et} \quad A_y^z = Q \frac{\cos \alpha}{2r} (1 - \cos \theta), \quad (3.19)$$

et on voit ainsi que

$$\sum_i (A_i^z)^2 = Q^2 \frac{(1 - \cos \theta)^2}{4r^2} \quad (3.20)$$

7. Il est utile de faire cette démonstration dans le cas général dans l'optique de la section 4.7 qui est dédiée au cas de l'étude d'un skyrmion de charge $Q \neq 1$

est indépendant de la variable angulaire dans l'espace réel $\alpha = \arctan \frac{y}{x}$. On a de plus

$$\begin{aligned}\partial_x A_x^z &= \frac{Q}{2r} \sin \alpha \cos \alpha \left[2 \frac{1 - \cos \theta}{2r} - \theta' \sin \theta \right], \\ \partial_y A_y^z &= -\frac{Q}{2r} \sin \alpha \cos \alpha \left[2 \frac{1 - \cos \theta}{2r} - \theta' \sin \theta \right],\end{aligned}\tag{3.21}$$

ce qui implique que $\partial_i A_i^z = 0$. A cela s'ajoute le fait que $A_i^z \partial_i$ se met sous la forme

$$A_i^z \partial_i = Q \frac{(1 - \cos \theta)}{2r} \mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla = Q \frac{(1 - \cos \theta)}{2r^2} \frac{\partial}{\partial \alpha}\tag{3.22}$$

et correspond donc à un opérateur différentiel portant uniquement sur la variable angulaire α . On en déduit que dans le cas isotrope, le terme dynamique dans le hamiltonien (3.18) se formule naturellement en coordonnées polaires comme

$$(\hat{p}_i + A_i^z \sigma_z)^2 = -\Delta_{\mathbf{r}} - 2i\sigma^z Q \frac{(1 - \cos \theta(r))}{r^2} \frac{\partial}{\partial \alpha} + Q^2 \frac{(1 - \cos \theta(r))^2}{4r^2}\tag{3.23}$$

avec $\Delta_{\mathbf{r}}$ la partie du laplacien polaire portant sur la variable radiale. On voit alors que dans le cas isotrope, et pour le cas spécifique du profil de Belavin-Polyakov, le nombre l correspondant aux valeurs propres du moment cinétique devient un bon nombre quantique. En se plaçant dans le secteur $l = 0$, et pour un skyrmion de charge $Q = 1$, on a ainsi le hamiltonien

$$H_i^{l=0} = \frac{\hbar^2}{2m^* R^2} \left(-\frac{1}{z} \frac{\partial}{\partial z} \left(z \frac{\partial}{\partial z} \right) + \frac{z^2}{(1+z^2)^2} \right) - \Delta \frac{\xi}{R} \frac{1}{1+z^2} \sigma_x\tag{3.24}$$

qui ne porte que sur la variable radiale adimensionnée $z = \frac{r}{R}$. La question qui vient maintenant est : Quelle est la masse isotrope m^* à considérer pour réaliser un bon mapping entre le hamiltonien réel, anisotrope, et le hamiltonien jouet considéré ici ? On peut supposer qu'il faut choisir $m^* = \sqrt{m_x m_y^*}$ de telle sorte à ce que la densité d'états soit la même que dans le cas réel $m_y^* \ll m_x^*$, conservant ainsi la structure fondamentale du problème.

Le terme cinétique variant comme $\frac{1}{R^2}$ quand l'amplitude du potentiel est elle proportionnelle à $\frac{1}{R}$, il y a nécessairement un rayon pour lequel l'énergie cinétique va outrepasser l'énergie potentielle et où la fonction d'onde va commencer à "déborder du puits". On peut de plus remarquer que le terme répulsif $(A_i^z)^2$, bien que nul en $z = 0$, va venir réduire la largeur effective du puits de potentiel lorsque R diminue, le rendant notamment de portée finie. Dans cette limite on peut s'attendre à ce que l'énergie de l'état fondamental devienne petite comparée à la profondeur du puits de potentiel, et appliquer le cheminement suivant [39]. On commence par noter le potentiel comme

$$U(z) = \Delta \frac{\xi}{R} \left(\frac{R_l}{R} \frac{z^2}{(1+z^2)^2} - \frac{1}{1+z^2} \right)\tag{3.25}$$

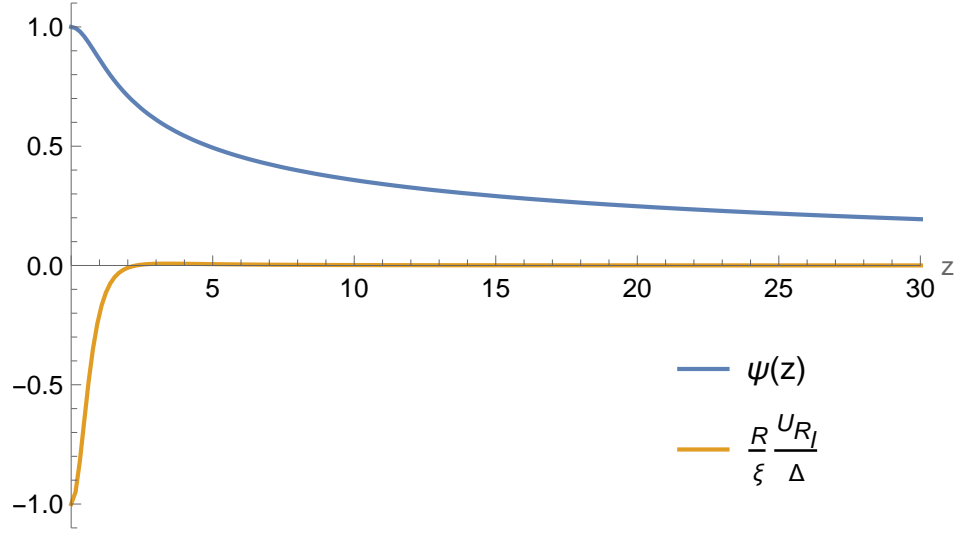


FIGURE 3.2 – Fonction d’onde non normalisée pour l’état fondamental lié au hamiltonien (3.24), tracée en bleu pour $R = 0.84R_l$. On a représenté en orange le potentiel effectif (3.25) donné en unités de $\Delta \frac{\xi}{R}$. On observe en comparant les deux que la fonction d’onde s’étale bien au delà du puits de potentiel.

avec $R_l = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2}\xi$. Ce potentiel a, pour $R \leq R_l$ et grâce au premier terme qui est répulsif, une portée finie (voir la figure 3.2) que l’on note z_1 . Dans ce contexte commençons par regarder la région de l’espace $z \leq z_1$ pour laquelle l’énergie de l’état fondamental ε vérifie la condition $|\varepsilon| \ll |U(z)| \sim |U(0)|$. L’équation de Schrödinger s’y écrit

$$\frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \frac{1}{z} \frac{d}{dz} \left(z \frac{d\psi}{dz} \right) = U(z)\psi(z), \quad (3.26)$$

en intégrant jusqu’à z_1 on obtient

$$z_1 \left. \frac{d\psi}{dz} \right|_{z_1} = \frac{2m^*R^2}{\hbar^2} \int_0^{z_1} U(z)\psi(z)zdz. \quad (3.27)$$

On considère maintenant que la fonction d’onde, très étalée dans ce régime où l’énergie cinétique domine, varie peu de 0 à z_1 . Cela permet d’écrire

$$\left. \frac{d\psi}{dz} \right|_{z_1} \simeq \frac{1}{z_1} \frac{2m^*R^2}{\hbar^2} \psi(z_1) \int_0^{z_1} U(z)zdz. \quad (3.28)$$

Loin du puits, pour $z \gg z_1$ on a $|\varepsilon| \gg |U(z)|$ et donc l’équation de Schrödinger est celle d’une particule libre,

$$\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \left(z \frac{d\psi}{dz} \right) = \kappa^2 \psi(z), \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m^*R^2|\varepsilon|}{\hbar^2}} \quad (3.29)$$

qui a pour solution la fonction de Hankel $H_0^{(1)}(i\kappa z)$. Pour $\kappa z \ll 1$ cette fonction se comporte comme $\ln(\kappa z)$, or on a $z_1 \sim 1$ et donc

$$\kappa z_1 \sim \kappa = \sqrt{\frac{R}{\xi} \frac{R}{R_l} \frac{|\varepsilon|}{\Delta}} \ll 1 \quad (3.30)$$

pour $R \sim R_l \ll \xi$ et puisque $|\varepsilon| \ll \Delta$. Cela permet de faire l'approximation

$$\frac{1}{\psi(z_1)} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z_1} \simeq \frac{1}{z_1 \ln(\kappa z_1)}. \quad (3.31)$$

Cela nous conduit à

$$\kappa z_1 = \sqrt{\frac{2m^* R^2 |\varepsilon|}{\hbar^2}} z_1 \simeq \exp \left[\frac{\hbar^2}{2m^* R^2} \left(\int_0^{z_1} U(z) z dz \right)^{-1} \right] \quad (3.32)$$

et ainsi à

$$\varepsilon \simeq -\frac{\hbar^2}{2m^* R^2 z_1^2} \exp \left[\frac{\hbar^2}{m^* R^2} \left(\int_0^{z_1} U(z) z dz \right)^{-1} \right]. \quad (3.33)$$

L'intégrale du potentiel se comporte ici comme

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta} \frac{R}{\xi} \int_0^{z_1} U(z) z dz &= \frac{\sqrt{\varepsilon}}{4} \frac{\xi}{R} \left(-\frac{z_1^2}{1+z_1^2} + \ln(1+z_1^2) \right) - \frac{\ln(1+z_1^2)}{2} \\ &\underset{z_1 \geq 2}{\sim} \left(\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \frac{\xi}{R} - 1 \right) \ln z_1. \end{aligned} \quad (3.34)$$

On en déduit finalement que

$$\begin{aligned} \varepsilon &\simeq -\frac{\hbar^2}{2m^* R^2 z_1^2} \exp \left[\frac{\hbar^2}{m^* R^2 \Delta} \frac{R}{\xi} \left(\frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \frac{\xi}{R} - 1 \right)^{-1} \frac{1}{\ln z_1} \right] \\ &\simeq -\Delta \frac{R_l}{R} \frac{\xi}{R} \frac{e^{2/\ln z_1}}{z_1^2} \exp \left[\frac{1}{1 - \frac{R}{R_l}} \right] \end{aligned} \quad (3.35)$$

avec

$$R_l \equiv \frac{\sqrt{\varepsilon}}{2} \xi \quad (\ll \xi) \quad (3.36)$$

et $\frac{e^{2/\ln z_1}}{z_1^2}$ de l'ordre de l'unité pour $z_1 \sim 2$. Cela signifie qu'il existe un rayon limite $\bar{R} \sim R_l$ pour lequel l'énergie s'annule, signifiant la disparition du dernier état lié.

Ce résultat peut être confirmé en résolvant numériquement le hamiltonien (3.24). On obtient l'énergie tracée sur la figure 3.3, où on observe une disparition de l'état lié pour $R = \bar{R} = 0.84R_l$. La fonction d'onde correspondant à la disparition du dernier état fondamental est tracée sur la figure 3.2 pour $R = \bar{R} = 0.84R_l$, on observe bien qu'elle s'étend loin au delà du puits de potentiel.

Fort de cette intuition nous allons maintenant traiter le Hamiltonien de basse énergie réel (2.39) et essayer de voir si on observe le même comportement général.

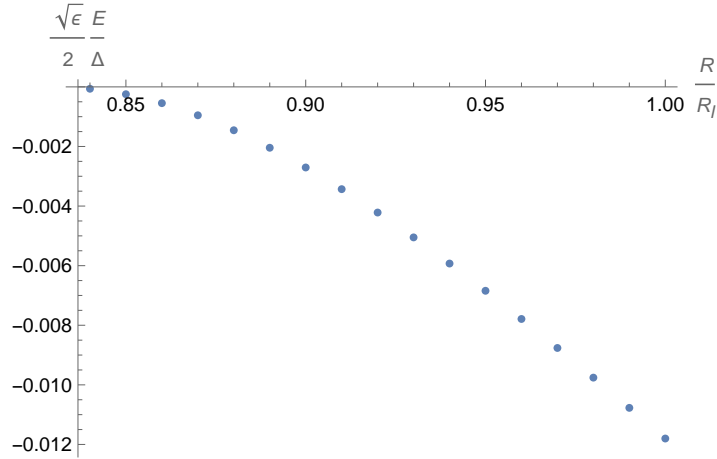


FIGURE 3.3 – Énergie propre associée au hamiltonien (3.24), obtenue numériquement. L'énergie est donnée en unités de $\Delta \frac{\xi}{R_l} = 2 \frac{\Delta}{\sqrt{\epsilon}}$ et comme une fonction de $\frac{R}{R_l}$ où $R_l \equiv \frac{\sqrt{\epsilon}}{2} \xi$. L'énergie est comptée relativement au minimum de la bande de conduction, et on observe que pour $R \leq 0.84 R_l$ le niveau d'énergie du l'état fondamental se fond dans la bande. Il n'y a alors plus d'état lié.

3.3.2 Cas réel

On cherche maintenant à estimer le rayon de disparition des états liés \bar{R} dans le cas réel fortement anisotrope. On se propose pour cela d'adapter les méthode usuelles de calcul de l'énergie fondamentale pour un potentiel attractif peu profond [39], comme on l'a fait dans le cas isotrope.

Calcul de l'énergie d'un état lié peu profond, méthode

On va utiliser une méthode usuelle pour le calcul de l'énergie d'un état lié peu profond à une dimension[39], qu'on se propose d'introduire rapidement. Considérons le cas unidimensionnel d'une particule soumise à un potentiel attractif peu profond $U(y)$ de portée R , décrit par le hamiltonien

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(y). \quad (3.37)$$

Peu profond signifie ici que l'énergie cinétique caractéristique de la particule dans le puits est grande devant la profondeur du puits $|U| \ll \frac{\hbar^2}{2mR^2}$. On fait l'hypothèse qu'il existe un état lié dont l'énergie ϵ est petite devant l'amplitude $|U|$ du potentiel. On en déduit que dans la région du puits $|y| \leq R$ on peut négliger l'énergie dans l'équation de Schrödinger. On peut de plus supposer que, l'amplitude du potentiel étant faible devant l'énergie cinétique, l'étendue de la fonction d'onde est grande devant celle du potentiel, ce qui entraîne que la fonction d'onde varie très peu dans la région $|y| \leq R$.

Cela mène à l'équation

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} \simeq \frac{2m}{\hbar^2} U \psi_0. \quad (3.38)$$

Intégrons alors ce résultat entre deux points $\pm y_c$ tels que $R \ll y_c \ll \kappa^{-1}$ avec $\kappa = \sqrt{2m|\varepsilon|/\hbar}$. Puisque l'intégrale de $U(y)$ converge et que $U(|y| \geq R) \sim 0$ on peut élargir l'intégrale à l'ensemble des réels pour le membre de droite, menant à

$$\left. \frac{d\psi}{dy} \right|_{-y_c}^{y_c} = \frac{2m}{\hbar^2} \psi_0 \int_{\mathbb{R}} U dy. \quad (3.39)$$

Loin du puits, à l'inverse, on peut négliger le terme de potentiel par rapport à l'énergie de la particule ε , cela signifie que loin du puits le problème s'identifie à celui d'une particule libre à 1D, décrite par la fonction d'onde $\psi(y) = \psi_0 e^{-\kappa|y|}$. En utilisant cette forme asymptotique pour estimer le membre de gauche on en déduit l'égalité

$$-2\kappa = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{\mathbb{R}} U dy \quad (3.40)$$

menant finalement à l'énergie

$$\varepsilon = -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\int_{\mathbb{R}} U dy \right)^2. \quad (3.41)$$

Ce résultat valide l'hypothèse initiale puisqu'on voit que l'énergie obtenue est de l'ordre de $\frac{2mR^2}{\hbar^2} |U|^2$ et donc bien petite devant l'amplitude du potentiel $|U|$.

Application au cas d'un skyrmion de petit rayon

On va maintenant appliquer cette méthode à notre cas. Mais avant d'aller plus loin commençons par travailler un peu le hamiltonien de basse énergie pour qu'il soit plus facile à traiter. On va en particulier lui appliquer une transformation de jauge afin de se débarrasser du terme hors diagonal $\frac{\{\hat{p}_y, \tilde{A}_y^z\}}{2m_y^*} \sigma^z$ dont l'amplitude n'est plus petite devant celle des autres termes pour $R \ll \xi$. On réalise donc la transformation définie par

$$W = e^{i\chi\sigma^z}, \quad \chi(\tilde{x}, \tilde{y}) = \frac{-\tilde{x}}{\sqrt{1+\tilde{x}^2}} \arctan \frac{\tilde{y}}{\sqrt{1+\tilde{x}^2}}, \quad (3.42)$$

avec $\tilde{x}_i = \frac{x_i}{R}$, sous laquelle le hamiltonien de basse énergie (2.37) devient

$$\tilde{H} = \frac{\hat{p}_y^2}{2m_y^*} + v\tilde{\mathbf{A}}_y^{\parallel} + \frac{(\hat{p}_x + \tilde{A}_x^z \sigma_z)^2}{2m_x}, \quad (3.43)$$

avec

$$\begin{aligned} \tilde{A}_x^z &= A_x^z + \partial_x \chi \\ &= \frac{1}{R} \left(-\frac{\tilde{y}}{(1+\tilde{x}^2)(1+z^2)} - \frac{1}{(1+\tilde{x}^2)^{3/2}} \arctan \left[\frac{\tilde{y}}{\sqrt{1+\tilde{x}^2}} \right] \right) \end{aligned} \quad (3.44)$$

et

$$\tilde{\mathbf{A}}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} = A_y^x [\sigma^x \cos 2\chi + \sigma^y \sin 2\chi]. \quad (3.45)$$

Puisque $(m_y^*)^{-1} \gg m_x^{-1}$ on va là encore appliquer l'approximation de Born-Oppenheimer et considérer le mouvement de l'électron dans un potentiel paramétrique unidimensionnel $\mathcal{U}_x(y)$. Les échelles d'énergie en jeu sont

$$E_C = \frac{\hbar^2}{2m_y^* R^2} \sim \Delta \frac{\xi^2}{R^2} \quad \text{et} \quad |\mathcal{U}_x| \sim \Delta \frac{\xi}{R}, \quad (3.46)$$

en se concentrant sur la composante attractive du potentiel. On voit donc bien que dans la limite des petits rayons $R \ll \xi$ on se trouve dans le cadre du puits peu profond décrit précédemment. On est alors amené à intégrer les différentes composantes du potentiel \mathcal{U}_x , à commencer par

$$u_1(x)\sigma^x = v \int dy \left(\tilde{\mathbf{A}}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) = -\Delta \xi \sigma^x \frac{\sin\left(\frac{\pi \tilde{x}}{\sqrt{1+\tilde{x}^2}}\right)}{\tilde{x}}. \quad (3.47)$$

Le résultat est proportionnel à σ^x car $\chi(\tilde{x}, \tilde{y})$ est une fonction paire de \tilde{y} , et que $\tilde{A}_y^y \propto \sin(2\chi)$, voir équations (3.42) et (3.45), l'intégrale de cette composante du champ de jauge se moyenne donc à 0. Pour ce qui est du terme $\frac{(\tilde{A}_x^z)^2}{2m_x}$ il faut être prudent car sa limite lorsque y tend vers l'infini est finie,

$$\lim_{y \rightarrow \infty} \frac{(\tilde{A}_x^z)^2}{2m_x} = \frac{\hbar^2}{2m_x R^2} \frac{\pi^2}{4} \frac{1}{(1+\tilde{x}^2)^3} \equiv \frac{A^2(\tilde{x})}{2m_x}. \quad (3.48)$$

On peut cependant décomposer ce terme comme

$$(\tilde{A}_i^z)^2 = \left[(\tilde{A}_i^z)^2 - A^2 \right] + A^2 \quad (3.49)$$

et ainsi définir

$$u_2(x) = \frac{1}{2m_x} \int dy \left[(\tilde{A}_x^z)^2 - A^2 \right] = \Delta \frac{1}{4} \frac{m_y}{m_x} \frac{a\xi}{R} \frac{\pi^2}{2} \frac{1}{(1+\tilde{x}^2)^3}. \quad (3.50)$$

On constate que ce terme est plus petit que u_1 d'un facteur $\frac{m_x R}{m_y a} \gg 1$, et décroît aussi vite lorsque \tilde{x} tend vers l'infini, il peut donc être négligé. Suivant (3.41) on obtient donc, pour le degré de liberté lent \tilde{x} , un potentiel attractif effectif

$$\omega_-(\tilde{x}) = -\frac{m_y^*}{2\hbar^2} u_1(\tilde{x})^2 = -\frac{\Delta}{2} \frac{\sin^2\left(\frac{\pi \tilde{x}}{\sqrt{1+\tilde{x}^2}}\right)}{\tilde{x}^2} \quad (3.51)$$

auquel il faut ajouter le potentiel répulsif

$$\omega_+(\tilde{x}) = \frac{A^2(\tilde{x})}{2m_x} = \frac{\Delta}{2} \left(\frac{R_l}{R} \right)^2 \frac{\pi^2}{(1+\tilde{x}^2)^3} \quad (3.52)$$

où $R_l \equiv \frac{1}{2\sqrt{2}}\sqrt{\epsilon}\xi \ll \xi$. On voit que le terme attractif semble en dehors du cadre de l'approximation réalisée pour obtenir le hamiltonien effectif considéré ici, qui stipule que les différents termes entrant en jeu dans ce dernier doivent être petits devant Δ . On voit cependant que lorsque le rayon R approche le rayon critique R_l les amplitudes de ces deux termes deviennent comparables. Pour qu'il puisse y avoir compensation il faut cependant le terme attractif décroisse au moins aussi vite que le terme répulsif, or on a bien que

$$\omega_-(\tilde{x}) + \omega_+(\tilde{x}) \xrightarrow{\tilde{x} \rightarrow \infty} \Delta \frac{\pi^2}{2} \left[-\frac{1}{4} + \left(\frac{R_l}{R} \right)^2 \right] \frac{1}{\tilde{x}^6}. \quad (3.53)$$

On en déduit que pour le rayon $R = R_l$ le potentiel effectif $\Omega(\tilde{x}) = \omega_-(\tilde{x}) + \omega_+(\tilde{x})$ devient répulsif, entraînant la disparition des états liés. Ce résultat doit plus s'interpréter comme une estimation de l'ordre de grandeur du rayon de disparition réel des états liés $\bar{R} \sim \sqrt{\epsilon}\xi$ que comme un calcul rigoureux.

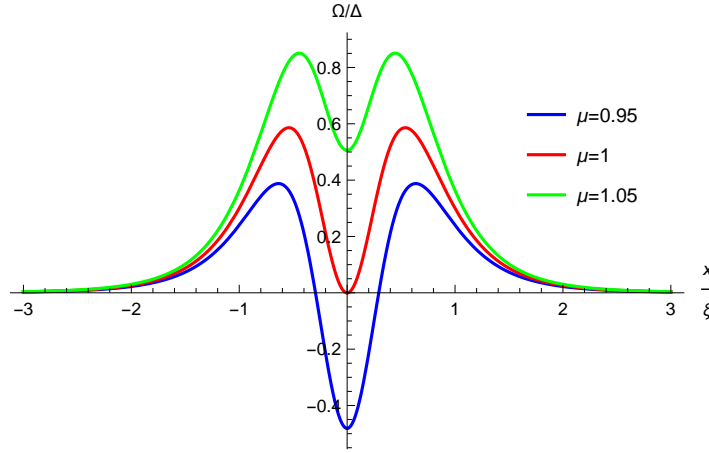


FIGURE 3.4 – Tracé du potentiel effectif $\frac{\Omega(\tilde{x})}{\Delta} = -\frac{1}{2} \frac{\sin^2\left(\frac{\pi\tilde{x}}{\sqrt{1+\tilde{x}^2}}\right)}{\tilde{x}^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\bar{R}}{R}\right)^2 \frac{\pi^2}{(1+\tilde{x}^2)^3}$ pour différentes valeurs du rapport $\mu = \frac{R_l}{R}$. On constate que l'amplitude maximale du potentiel $\Omega(\tilde{x})$ reste de l'ordre de Δ même lorsque ce dernier passe d'attractif à répulsif. On observe de plus que la profondeur du puits est faible comparée à Δ uniquement pour un rayon R appartenant à un voisinage très restreint du rayon critique R_l .

Une rapide estimation montre que la profondeur du puits varie avec le rayon comme

$$-\omega_-(0) + \omega_+(0) = \Delta \frac{\pi^2}{2} \left(1 - \left(\frac{R_l}{R} \right)^2 \right) \underset{R \gtrsim \bar{R}}{\simeq} \Delta \pi^2 \frac{R - R_l}{R_l}, \quad (3.54)$$

signifiant qu'on s'attend à ce que l'énergie de l'état fondamental varie très vite en fonction du rayon pour $R \gtrsim \bar{R}$, particulièrement si on considère l'échelle de longueur fixée par la longueur de cohérence ξ puisque $\bar{R} \ll \xi$.

Le traitement effectué dans le cas du hamiltonien anisotrope manque à première vue le fait que la disparition des états liés est due au terme répulsif dominant $\frac{(A_y^z)^2}{2m_y^*}$, ce dernier étant caché par la transformation de jauge (3.42). Il est néanmoins responsable de la limite finie du terme (3.48) qui est lui même à l'origine d'une redéfinition de l'origine des énergies, traduite par le terme répulsif $\omega_+(\tilde{x})$. On peut néanmoins expliciter qualitativement l'effet du terme répulsif dominant $\frac{(A_y^z)^2}{2m_y^*}$ en l'estimant dans l'approximation harmonique. Si on approche en effet son amplitude par $\hbar^2 \frac{x^2}{2m_y^* R^4}$, et qu'on estime la valeur moyenne de x^2 selon l'approximation harmonique,

$$\langle \tilde{x}^2 \rangle = \frac{\sqrt{\epsilon}}{2\sqrt{2}} \sqrt{\frac{1}{1 + 2\frac{R}{\xi}}} \underset{R \ll \xi}{\sim} \frac{\sqrt{\epsilon}}{2\sqrt{2}}, \quad (3.55)$$

on a finalement

$$\frac{(A_y^z)^2}{2m_y^*} \sim \Delta \sqrt{\epsilon} \frac{\xi^2}{R^2}. \quad (3.56)$$

Il apparaît alors naturellement que ce terme répulsif va compenser le terme attractif pour un rayon de l'ordre de $R \sim \sqrt{\epsilon} \xi$, en bon accord avec le calcul plus rigoureux mené ci dessus.

On peut remarquer lorsqu'on trace $\Omega(\tilde{x})$ que l'amplitude du potentiel effectif demeure de l'ordre de Δ même au voisinage de R_l , comme représenté sur la figure 3.4. Il est alors légitime de se demander si le fait que l'énergie propre associée soit petite comparée à Δ suffit à supporter la validité du hamiltonien effectif utilisé ici, qui n'est valable a priori que lorsque les différents termes en jeu sont faibles devant Δ . Regardons si on peut justifier plus proprement la validité de ce hamiltonien.

3.3.3 Validité du hamiltonien de basse énergie pour la description de la disparition des états liés

On veut dans cette dernière partie comprendre pourquoi le hamiltonien de basse énergie, obtenu en supposant que l'amplitude des termes de potentiel était petite, demeure tout de même valable dans la région $R \gtrsim \bar{R}$ de l'espace des paramètres, où l'amplitude du champ de jauge $A \sim \Delta \xi / R$ est grande devant l'énergie du gap Δ . Pour cela on se propose d'analyser en détail la procédure suivie à la section 2.1.3, qui a permis de dériver ce hamiltonien de basse énergie (2.39). Repartons du développement de l'équation de Schrödinger que l'on a réalisé dans cette section, ce développement prenait la forme de deux équations,

$$\begin{aligned} \gamma_- \chi &= (\varepsilon - \gamma_+) \Phi, \\ \gamma_- \Phi &= (2\Delta + \varepsilon - \gamma_+) \chi. \end{aligned} \quad (3.57)$$

On veut montrer que l'approximation $\chi \simeq \frac{\gamma_-}{2\Delta} \Phi$ qui conduit au hamiltonien de basse énergie (2.27), est valable pour un rayon de skyrmion R appartenant à un proche

voisinage de \bar{R} . En regardant la seconde équation de (3.57) on voit que la validité de cette hypothèse peut se tester en vérifiant que la condition

$$2\Delta|\chi\rangle \gg \gamma_+|\chi\rangle \quad (3.58)$$

est respectée, puisque la condition $\varepsilon \ll \Delta$ est quant à elle imposée. Or si cette condition est respectée, on peut remplacer $|\chi\rangle$ par $\frac{\gamma_-}{2\Delta}|\Phi\rangle$, pour obtenir la condition

$$\langle\gamma_-\Phi|\gamma_-\Phi\rangle \gg \langle\gamma_-\Phi|\frac{\gamma_+}{2\Delta}|\gamma_-\Phi\rangle. \quad (3.59)$$

On va maintenant voir que cette condition peut être vérifiée dans la limite $R \rightarrow \bar{R}^+$. Afin d'évaluer les deux termes composant cette inégalité nous n'allons garder que les termes dominant dans les opérateurs γ_{\pm} et ainsi approximer

$$\gamma_+ \simeq vA_y^x\sigma_x \quad \text{et} \quad \gamma_- \simeq v(\hat{p}_y + A_y^z\sigma^z). \quad (3.60)$$

Il nous faut maintenant déterminer la fonction d'onde $\Phi(x, y)$ afin de calculer les deux termes que l'on souhaite comparer. On se place dans le cadre des approximations de la section précédente. On peut ainsi utiliser que pour $\tilde{y} \gg 1$ la fonction d'onde décroît comme $e^{-\kappa_y\tilde{y}}$ où $\kappa_y = \frac{R}{\xi}\sqrt{2\frac{|\varepsilon|}{\Delta}}$. De même pour $\tilde{x} \gg \tilde{x}_c \sim \sqrt[6]{\frac{\Delta}{|\varepsilon|}}$ la fonction d'onde décroît comme $e^{-\kappa_x\tilde{x}}$ où $\kappa_x = 2\frac{R_l}{R}\sqrt{\frac{|\varepsilon|}{\Delta}}$. On a donc $\kappa_i \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0$, ce qui signifie que l'on peut, en notant

$$|\Phi\rangle = |\phi\rangle \otimes |+\rangle_x \quad (3.61)$$

faire l'approximation

$$|\gamma_-\Phi\rangle = v\left(|\hat{p}_y\phi\rangle \otimes |+\rangle_x + A_y^z|\phi\rangle \otimes |-\rangle_x\right) \underset{\kappa_y \ll 1}{\sim} vA_y^z|\phi\rangle \otimes |-\rangle_x \quad (3.62)$$

pour $\tilde{y} \gg 1$. On en déduit que l'on peut minorer

$$\begin{aligned} \langle\gamma_-\Phi|\gamma_-\Phi\rangle &> v^2\langle\phi|(A_y^z)^2|\phi\rangle \\ &> 4\Delta^2\frac{\xi^2}{R^2}\int_{\tilde{x}_c}^{\infty}d\tilde{x}\int_1^{\infty}d\tilde{y}\frac{\tilde{x}^2}{(1+z^2)^2}e^{-2\kappa_x\tilde{x}-2\kappa_y\tilde{y}} \\ &> 4\Delta^2\frac{\xi^2}{R^2}\int_{\tilde{x}_c}^{\infty}d\tilde{x}\int_{\tilde{x}_c}^{\infty}d\tilde{y}\frac{\tilde{x}^2}{(1+z^2)^2}e^{-4\kappa_x z} \end{aligned} \quad (3.63)$$

où on a utilisé que $|\tilde{x}| + |\tilde{y}| \leq 2z$, que $\tilde{x}_c \gg 1$ et que $\kappa_x > \kappa_y$. On voit que dans cette dernière intégrale les deux variables sont équivalentes, on peut ainsi échanger les notations et ainsi obtenir

$$\begin{aligned} \int_{\tilde{x}_c}^{\infty}d\tilde{x}\int_{\tilde{x}_c}^{\infty}d\tilde{y}\frac{\tilde{x}^2}{(1+z^2)^2}e^{-4\kappa_x z} &= \frac{1}{2}\int_{\tilde{x}_c}^{\infty}d\tilde{x}\int_{\tilde{x}_c}^{\infty}d\tilde{y}\frac{\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2}{(1+z^2)^2}e^{-4\kappa_x z} \\ &= \pi\int_{x_c}^{\infty}dz\frac{z^3}{1+z^2}e^{-4\kappa_x z} \\ &\sim -\pi\ln(8\kappa_x x_c). \end{aligned} \quad (3.64)$$

On a utilisé que $\kappa_x x_c \sim \left(\frac{|\varepsilon|}{\Delta}\right)^{1/3} \ll 1$ pour obtenir la forme asymptotique de l'intégrale. On obtient donc finalement la minoration

$$\langle \gamma_- \Phi | \gamma_- \Phi \rangle > -\Delta^2 \frac{\xi^2}{R^2} \pi \ln(8\kappa_x x_c) \quad (3.65)$$

impliquant que ce terme diverge lorsque l'énergie ε de l'état lié fondamental s'annule.

Pour le second terme de l'équation (3.59) avec lequel on veut faire la comparaison, on a

$$\begin{aligned} \langle \gamma_- \Phi | \frac{\gamma_+}{2\Delta} | \gamma_- \Phi \rangle &\simeq \frac{v^3}{2\Delta} \langle \psi | A_{\tilde{y}}^x (A_{\tilde{y}}^z)^2 | \psi \rangle \\ &\simeq \Delta^2 \left(\frac{\xi}{R}\right)^3 \iint d\tilde{x} d\tilde{y} \frac{\tilde{x}^2}{(1+z^2)^3} e^{-2\kappa_x \tilde{x} - 2\kappa_y \tilde{y}} \end{aligned} \quad (3.66)$$

où cette fois l'intégrale converge même dans la limite $\kappa_i \rightarrow 0$. On voit donc la décroissance lente de la fonction d'onde à longue portée due à la disparition de l'état lié provoque une divergence logarithmique du terme $\langle \gamma_- \Phi | \gamma_- \Phi \rangle$. Ce dernier l'emporte donc toujours sur le terme $\langle \gamma_- \Phi | \frac{\gamma_+}{2\Delta} | \gamma_- \Phi \rangle$, même si ce terme vient avec un coefficient $\frac{\xi}{R}$ qui est très grand dans cette limite $R \sim \bar{R}$.

Cette analyse confirme bien que c'est le caractère longue portée des termes A_i^z qui produit la disparition de l'état lié lorsque le rayon du skyrmion tend vers sa valeur critique \bar{R} .

On a réussi à obtenir une description satisfaisante des limites $R \gg \xi$ et $R \gtrsim \bar{R} \ll \xi$, mais il nous reste maintenant à discuter la région intermédiaire $R \sim \xi$ dans laquelle on s'attend à avoir une énergie caractéristique de l'ordre de Δ pour les états liés.

4

Belavin-Polyakov, états liés profonds

Ce chapitre a pour but d'établir la structure énergétique des états liés dans la région de l'espace des paramètres pour laquelle le hamiltonien de basse énergie qui a occupé le chapitre précédent ne peut plus être utilisé. On va commencer par expliciter les hypothèses nécessaires au traitement du hamiltonien complet, avant d'estimer qualitativement la structure énergétique des états liés. Cela nous permettra d'obtenir une image complète de la structure énergétique des états liés pour le profil de Belavin-Polyakov. On terminera par discuter le cas d'un skyrmion de Belavin-Polyakov de charge topologique quelconque.

Contenu du chapitre

| | | |
|------------|---|-----------|
| 4.1 | Symétrie particule trou | 50 |
| 4.2 | Point de croisement | 51 |
| 4.2.1 | Application au profil de Belavin-Polyakov | 53 |
| 4.3 | Au delà du point de croisement | 54 |
| 4.3.1 | Équation fondamentale | 54 |
| 4.3.2 | Résolution pour le profil de Belavin-Polyakov | 56 |
| 4.4 | Argument de non croisement | 58 |
| 4.5 | Théorie des perturbations pour les croisements | 60 |
| 4.6 | Image physique | 65 |
| 4.7 | Cas d'un skyrmion de charge quelconque | 66 |
| 4.7.1 | Nouveau champ de jauge | 66 |
| 4.7.2 | Cas modèle isotrope | 68 |
| 4.7.3 | Synthèse | 69 |

On veut traiter dans ce chapitre la région intermédiaire $\bar{R} \ll R \lesssim \xi$ de l'espace des paramètres, pour laquelle on s'attend à observer des états liés profonds, situés proche du centre du gap. Jusqu'ici on s'est concentré sur le voisinage de la bande de conduction, et aux états liés qui sont donc issus de cette bande, au sens où les électrons occupant ces états occuperaient des états de la bande de conduction dans le cas où il n'y aurait pas de skyrmion. Afin d'avoir une image complète de ce qui se passe pour les états liés profonds auxquels est dédié ce chapitre, on se propose donc de commencer par regarder comment se comportent les états issus de la bande de valence.

4.1 Symétrie particule trou

Nous allons être amenés pour traiter les états liés profonds à utiliser le hamiltonien complet

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \gamma_+ + \Delta & \gamma_- \\ \gamma_- & \gamma_+ - \Delta \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

On a pu voir lorsqu'on a traité le cas uniforme que la structure était symétrique vis à vis du centre du gap, comme schématisé sur la figure 2.1. Dans le cas général, la diagonalisation de ce hamiltonien ne peut être achevée à cause du caractère matriciel compliqué des opérateurs γ_{\pm} . On peut cependant le diagonaliser par blocs et obtenir les deux sous hamiltoniens

$$h_{\pm} = \gamma_{\pm} \pm \sqrt{\Delta^2 + \gamma_{\pm}^2}. \quad (4.2)$$

Dans la limite des petites énergies on a

$$h_+ = \Delta + \gamma_+ + \frac{\gamma_-^2}{2\Delta}, \quad h_- = -\Delta + \gamma_+ - \frac{\gamma_-^2}{2\Delta}, \quad (4.3)$$

où h_+ correspond bien au hamiltonien effectif de basse énergie (2.27) dérivé dans le chapitre 2. Ces deux hamiltoniens sont très similaires. On note $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ les polarisations des états propres de l'opérateur γ_+ , qui sont selon l'axe porté par le vecteur \mathbf{e}_{σ} dans le cas du profil de Belavin Polyakov. On considère maintenant que, dans la limite des basses énergies, les composantes dominantes de l'opérateur γ_-^2 sont proportionnelles à l'identité dans l'espace de spin¹. On a alors

$$\langle \uparrow | h_+ | \uparrow \rangle = \langle \downarrow | -h_- | \downarrow \rangle, \quad (4.4)$$

ce qui implique une symétrie

$$E_+^{\uparrow}(R) = -E_-^{\downarrow}(R) \quad (4.5)$$

pour les énergies propres de ces deux sous hamiltoniens. Cela signifie que les énergies propres des états liés sont symétriques deux à deux par rapport au centre du gap.

1. Cette hypothèse est raisonnable, elle repose sur les mêmes raisons pour lesquelles on a négligé les termes proportionnels à $\{\hat{p}_i, A_i^z \sigma^z\}$ dans le hamiltonien (3.13) au chapitre précédent

Ce résultat se maintient dans le cas général dès lors que l'opérateur $\sqrt{\Delta^2 + \gamma_-^2}$ peut être considéré comme proportionnel à l'identité dans l'espace de spin. Cette condition va être vérifiée en première approximation dans une certaine région de l'espace des paramètres, comme on va le voir dans la suite du chapitre.

On peut de plus argumenter que cette symétrie est naturelle puisque la densité d'états à deux dimensions est constante pour une dispersion quadratique. On s'attend donc dans le cas uniforme à ce la densité d'état soit constante dans le voisinage du minimum de la bande de conduction, et égale par symétrie à celle observée dans le voisinage du maximum de la bande de valence. On peut alors s'attendre à ce que lors d'une petite perturbation de l'ordre magnétique, la densité d'états reste symétrique vis à vis du centre du gap ouvert par la présence d'un ordre Néel.

Cette symétrie particule trou implique que si les énergies de certains états liés s'anulent pour un certain rayon, on assiste à des croisements. On cherche maintenant à savoir si on peut identifier analytiquement l'abscisse de ce(s) point(s) de croisement.

4.2 Point de croisement

Cherchons si dans le cas qui nous intéresse ici de l'interaction électron-skyrmion décrite par le hamiltonien

$$H = \begin{pmatrix} \gamma_+ + \Delta & \gamma_- \\ \gamma_- & \gamma_+ - \Delta \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

il peut exister un point de croisement correspondant à une énergie propre nulle (correspondant à un écart d'énergie égal à Δ par rapport à l'une des deux bandes d'énergie). Commençons par faire l'approximation

$$\begin{aligned} \gamma_+ &\simeq v \mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} \simeq -v |A_y^{\parallel}| \mathbf{e}_\sigma \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \gamma_- &\simeq v (\hat{p}_y + A_y^z \sigma^z) \end{aligned} \quad (4.7)$$

avec \mathbf{e}_σ le vecteur unitaire donnant la direction de \mathbf{A}_y^{\parallel} dans l'espace de spin. Cette approximation revient à négliger les termes de masse dans le développement en impulsion, qui sont de l'ordre de $\Delta \frac{a\xi}{R^2}$, et qui sont donc négligeables pour $R \sim \xi$ devant les termes du premier ordre allant comme $\Delta \frac{\xi}{R}$. On voit que dans cette approximation le seul opérateur différentiel porte sur la variable y , et on choisit alors de fixer l'autre degré de liberté x à sa valeur moyenne qui par symétrie vaut 0. Cela peut se justifier en arguant que, pour le degré de liberté lent seulement, le hamiltonien de basse énergie peut être vu comme valable même pour $R \sim \xi$. On s'attend ainsi à ce que la fonction d'onde varie selon x de manière similaire aux états propres de l'oscillateur harmonique unidimensionnel. Dans ce contexte, on peut estimer la valeur moyenne de \hat{x}^2 en intégrant sur l'état fondamental de l'oscillateur harmonique. On obtient

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\sqrt{\epsilon}}{2\sqrt{2}} \sqrt{\frac{1}{1 + 2\frac{R}{\xi}}} \ll 1, \quad (4.8)$$

ce qui justifie de fixer x à zéro et de négliger le terme en A_y^z . Cette approximation permet de considérer γ_- comme proportionnel à l'identité dans l'espace de spin, appuyant l'hypothèse utilisée pour mettre en évidence la symétrie particule trou.

On cherche maintenant à voir si il existe dans cette approximation un rayon critique R^* pour lequel l'énergie s'annule, correspondant ainsi à un point de croisement. On va pour cela appliquer ce hamiltonien à un bispineur Ψ en se plaçant, pour les deux spineurs, dans la base de spin relative à l'axe porté par le vecteur \mathbf{e}_σ qui donne la direction dans l'espace de spin de l'opérateur γ_+ . On note dans cette base $\Psi = (\phi_1, \psi_1, \psi_2, \phi_2)$, et γ_\pm pour les normes de γ_\pm , tel que

$$\gamma_+ = -\gamma_+\sigma^z, \quad \gamma_- = \gamma_- . \quad (4.9)$$

On cherche maintenant quelle est la forme des états propre associés à une valeur propre nulle. On veut ainsi résoudre

$$\begin{pmatrix} \Delta - \gamma_+\sigma^z & \gamma_- \\ \gamma_- & -\Delta - \gamma_+\sigma^z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (4.10)$$

correspondant au système d'équations suivant

$$\begin{aligned} (1) \quad & (\Delta - \gamma_+)\phi_1 + \gamma_-\psi_2 = 0 \\ (2) \quad & (\Delta + \gamma_+)\psi_1 + \gamma_-\phi_2 = 0 \\ (3) \quad & \gamma_-\phi_1 - (\gamma_+ + \Delta)\psi_2 = 0 \\ (4) \quad & \gamma_-\psi_1 - (\Delta - \gamma_+)\phi_2 = 0 \end{aligned} \quad (4.11)$$

où on voit que les équations (1) et (3) couplent ϕ_1 et ψ_2 tandis que les équations (2) et (4) couplent ψ_1 et ϕ_2 . Il est alors naturel d'utiliser les équations (2) et (3) pour obtenir

$$\psi_1 = -\frac{\gamma_-}{\Delta + \gamma_+}\phi_2, \quad \psi_2 = \frac{\gamma_-}{\Delta + \gamma_+}\phi_1. \quad (4.12)$$

Ces expressions sont valables puisque γ_+ est par définition une fonction positive. Cela mène après injection dans les équations (1) et (4) à une unique équation

$$(\Delta - \gamma_+)\phi + \gamma_- \frac{1}{\Delta + \gamma_+} \gamma_- \phi = 0. \quad (4.13)$$

On doit ici faire attention au fait que l'opérateur γ_- est proportionnel à ∂_y et ne commute donc pas avec γ_+ qui est une fonction de y . Cela implique

$$\gamma_- \frac{1}{\Delta + \gamma_+} \gamma_- = \frac{1}{\Delta + \gamma_+} \gamma_-^2 - \frac{1}{(\Delta + \gamma_+)^2} \gamma_- (\gamma_+) \gamma_- \quad (4.14)$$

et on obtient ainsi en multipliant par la gauche l'équation (4.13) par $(\Delta + \gamma_+)$ l'équation

$$\left[\gamma_-^2 - \frac{1}{\Delta + \gamma_+} \gamma_- (\gamma_+) \gamma_- + \Delta^2 - (\gamma_+)^2 \right] \phi = 0. \quad (4.15)$$

Les deux équations portant sur les ϕ_i étant identiques on en déduit $\phi_1 = \pm \phi_2$ et par la même occasion $\psi_1 = \mp \psi_2$. Ce résultat était prévisible dans le contexte de la symétrie particule-trou explicitée plus haut.

On peut noter que le calcul effectué et les arguments présentés jusqu'ici ne sont pas limités au profil de Belavin-Polyakov. Le résultat sera valable pour tous les profils satisfaisant aux mêmes propriétés générales. On se propose maintenant d'appliquer l'équation obtenue au cas spécifique du profil de Belavin-Polyakov, afin d'obtenir le rayon de croisement R^* .

4.2.1 Application au profil de Belavin-Polyakov

Dans le cas particulier du profil de Belavin-Polyakov on peut expliciter l'opérateur γ_+ pour obtenir l'équation

$$\left[- \left(\frac{\xi}{R} \right)^2 \frac{d^2}{d\tilde{y}^2} - \left(\frac{\xi}{R} \right)^3 \frac{\frac{2\tilde{y}}{(1+\tilde{y}^2)^2}}{1 + \frac{\xi}{R} \frac{1}{1+\tilde{y}^2}} \frac{d}{d\tilde{y}} + 1 - \left(\frac{\xi}{R} \frac{1}{1 + \tilde{y}^2} \right)^2 \right] \phi = 0. \quad (4.16)$$

Cette équation est compliquée à résoudre, notamment à cause du fait qu'elle fait apparaître une dérivée première précédée d'une fonction non triviale. Afin de s'affranchir de cette difficulté, on se propose de réaliser la transformation suivante pour la fonction d'onde,

$$\phi = e^{\mathcal{A}} \chi, \quad \mathcal{A}'(\tilde{y}) = - \frac{1}{1 + \frac{R}{\xi}(1 + \tilde{y}^2)} \frac{\tilde{y}}{1 + \tilde{y}^2} \quad (4.17)$$

tel que l'équation (4.16) se réécrit comme

$$\left[- \frac{d^2}{d\tilde{y}^2} + \tilde{R}^2 - \tilde{R} \frac{1 + \tilde{R} + (3 + \tilde{R})\tilde{y}^2}{(1 + \tilde{y}^2)(1 + \tilde{R} + \tilde{R}\tilde{y}^2)^2} \right] \chi = 0 \quad (4.18)$$

avec $\tilde{R} = R/\xi$. Cette équation correspond à l'équation de Schrödinger décrivant une particule piégée dans le puits de potentiel effectif

$$\tilde{R}^2 - \tilde{R} \frac{1 + \tilde{R} + (3 + \tilde{R})\tilde{y}^2}{(1 + \tilde{y}^2)(1 + \tilde{R} + \tilde{R}\tilde{y}^2)^2}, \quad (4.19)$$

associée à une énergie nulle. Le minimum de ce potentiel effectif devient 0 pour \tilde{R} de l'ordre de 0.6, signifiant que l'abscisse du point de croisement doit être de cet ordre de grandeur.

On peut résoudre numériquement cette équation différentielle 1D avec conditions aux bords. Le potentiel étant pair, on cherche la fonction d'onde sous la forme d'une fonction paire ou impaire. Pour cela on résout (4.16), avec les conditions aux bords $\phi'(0) = 0$, $\phi(0) = 1$ pour une fonction paire, et $\phi(0) = 0$, $\phi(1) = 1$ pour une fonction impaire. On cherche alors les valeurs de \tilde{R} pour lesquelles la fonction d'onde reste bornée pour $|\tilde{y}| \leq 100$. On trouve $R^* \simeq 0.37\xi$ pour une fonction d'onde paire, tandis qu'on ne trouve pas de solution physique qui soit impaire. Cela signifie que les seuls états dont les énergies peuvent se croiser sont des états dont la fonction d'onde ne présente pas de 0 selon y . La présente résolution ne permet cependant pas de statuer sur la dépendance des fonctions d'onde de ces états relativement à la coordonnée lente x .

Voyons maintenant si on peut élargir ce résultat et dire quelque chose concernant le comportement des énergies propres (indexées grâce au degré de liberté rapide y seulement) dans la région intermédiaire $\tilde{R} \ll R \lesssim \xi$.

4.3 Au delà du point de croisement

4.3.1 Équation fondamentale

On peut essayer d'étendre notre analyse au voisinage du point de croisement que l'on vient d'identifier en suivant les mêmes approximations (4.7) et la même méthode que précédemment. On utilise la même notation que dans la partie précédente pour le bispineur Ψ auquel on applique le hamiltonien. Cela mène à une équation de Schrödinger pour une énergie quelconque E

$$\begin{pmatrix} \Delta - \gamma_+ \sigma^z & \gamma_- \\ \gamma_- & -\Delta - \gamma_+ \sigma^z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \psi_1 \\ \psi_2 \\ \phi_2 \end{pmatrix}, \quad (4.20)$$

qui peut là encore se décomposer comme système de quatre équations

$$\begin{aligned} (1) \quad & (\Delta - \gamma_+ - E)\phi_1 + \gamma_- \psi_2 = 0, \\ (2) \quad & (\Delta + \gamma_+ - E)\psi_1 + \gamma_- \phi_2 = 0, \\ (3) \quad & \gamma_- \phi_1 - (\gamma_+ + \Delta + E)\psi_2 = 0, \\ (4) \quad & \gamma_- \psi_1 - (\Delta - \gamma_+ + E)\phi_2 = 0. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Cela amène à exprimer les composantes ψ_i comme

$$\psi_1 = -\frac{\gamma_-}{\Delta + \gamma_+ - E}\phi_2, \quad \psi_2 = \frac{\gamma_-}{\Delta + \gamma_+ + E}\phi_1. \quad (4.22)$$

On peut alors injecter la seconde expression dans l'équation (1) pour obtenir

$$(\Delta - \gamma_+ - E)\phi_1 + \gamma_- \frac{\gamma_-}{\Delta + \gamma_+ + E}\phi_1 = 0. \quad (4.23)$$

On doit à nouveau faire attention au fait que $\gamma_- \propto \partial_y$, ce qui implique

$$\gamma_- \frac{\gamma_-}{\Delta + \gamma_+ + E} = \frac{\gamma_-^2}{\Delta + \gamma_+ + E} - \frac{\gamma_-(\gamma_+)}{(\Delta + \gamma_+ + E)^2} \gamma_- \quad (4.24)$$

où on applique le numérateur en premier. On a alors

$$\left[\gamma_-^2 - \frac{\gamma_-(\gamma_+)}{\Delta + \gamma_+ + E} \gamma_- + \Delta^2 - (\gamma_+ + E)^2 \right] \phi_1 = 0. \quad (4.25)$$

Si on fait de même pour ϕ_2 on obtient

$$\left[\gamma_-^2 - \frac{\gamma_-(\gamma_+)}{\Delta + \gamma_+ - E} \gamma_- + \Delta^2 - (\gamma_+ - E)^2 \right] \phi_2 = 0. \quad (4.26)$$

On voit que les deux équations sont symétriques vis à vis de la double transformation $E \rightarrow -E$ et $\phi_1 \rightarrow \phi_2$, on a ainsi l'équation générale

$$\left[\gamma_-^2 - \frac{\gamma_-(\gamma_+)}{\Delta + \gamma_+ \pm E} \gamma_- + \Delta^2 - (\gamma_+ \pm E)^2 \right] \phi = 0 \quad (4.27)$$

On voit cette fois qu'on obtient deux équations différentes pour ϕ_1 et ϕ_2 . On a $+E$ pour l'équation portant sur ϕ_1 , qui correspond aux états d'énergies proches de Δ aux grands rayons, et $-E$ pour l'équation portant sur ϕ_2 qui décrit les états liés d'énergies proches de $-\Delta$ pour $R \gg \xi$. On retrouve bien la symétrie électron-trou évoquée précédemment.

Les énergies propres obtenues par la résolution de (4.27) sont à interpréter en regardant les degrés de liberté spatiaux comme étant découplés. On obtient la composante de la fonction d'onde portant sur y par résolution de l'équation fondamentale (4.27). Il faut ensuite lui attacher une composante portant sur le degré de liberté lent x , qui peut être vu comme étant toujours harmonique. A chaque énergie propre E^i obtenue via l'équation (4.27) correspondra donc une collection d'énergies de la forme

$$E_n^i \simeq E^i + \left(\frac{1}{2} + n \right) \hbar \omega_x, \quad (4.28)$$

avec

$$\hbar \omega_x \sim \Delta \left(\frac{\xi}{R} \right)^{3/2} \sqrt{\epsilon} \sqrt{1 + \frac{\xi}{2R}}. \quad (4.29)$$

Ce résultat est donc bien évidemment une grosse approximation de la structure énergétique réelle des états liés, mais nous permet d'obtenir une image qualitative de cette structure complexe.

On a obtenu une méthode permettant d'estimer les énergies propre du hamiltonien complet (4.1). On se propose maintenant de l'appliquer au cas spécifique du profil de Belavin-Polyakov.

4.3.2 Résolution pour le profil de Belavin-Polyakov

Dans le cas spécifique du profil de Belavin-Polyakov, l'équation (4.27) se met sous la forme

$$\left[- \left(\frac{\xi}{R} \right)^2 \frac{d^2}{d\tilde{y}^2} - \left(\frac{\xi}{R} \right)^3 \frac{\frac{2\tilde{y}}{(1+\tilde{y}^2)^2}}{1 + \frac{E}{\Delta} + \frac{\xi}{R} \frac{1}{1+\tilde{y}^2}} \frac{d}{d\tilde{y}} + 1 - \left(\frac{E}{\Delta} + \frac{\xi}{R} \frac{1}{1+\tilde{y}^2} \right)^2 \right] \phi = 0. \quad (4.30)$$

La résolution de cette équation différentielle peut se faire numériquement, comme précédemment pour le cas particulier $E = 0$. On cherche pour chaque rayon R l'énergie minimale permettant une fonction d'onde physique, c'est à dire qui correspond à une probabilité de présence nulle loin du centre du skyrmion pour les états liés. Loin du centre du skyrmion signifie ici pour $|\tilde{y}| \gg R/\xi$. On cherche de plus une fonction paire ou impaire, le skyrmion étant symétrique vis à vis de son centre. On obtient ainsi l'énergie de l'état fondamental en faisant varier l'énergie, en partant de $-\Delta$, jusqu'à obtenir une solution numérique de l'équation (4.30) qui ait les bonnes propriétés. En répétant ce processus (en ajustant l'énergie de départ) on peut ensuite obtenir les énergies des états excités pour un rayon donné. Le tracé correspondant pour l'état fondamental et le premier état excité est présenté sur la figure 4.1.

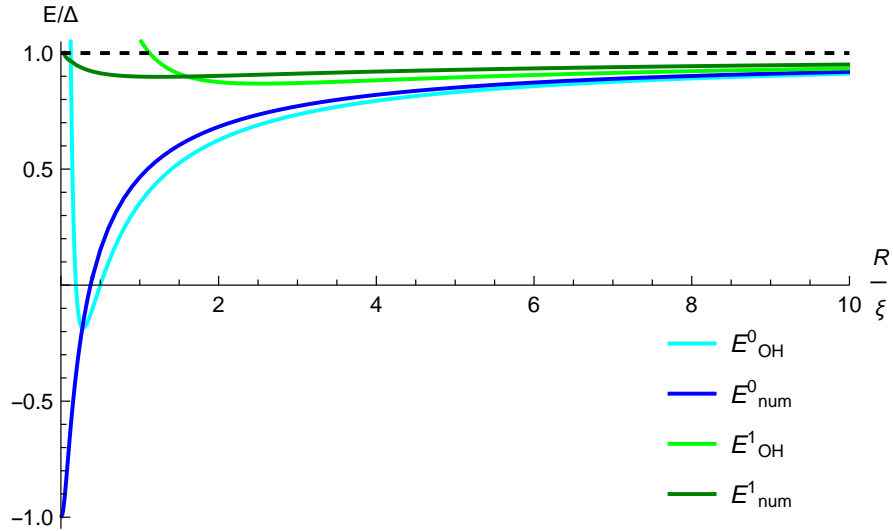


FIGURE 4.1 – Tracé en bleu nuit de l'énergie de l'état fondamental, obtenu par résolution de l'équation (4.30). L'énergie et le rayon sont adimensionnés selon leurs échelles naturelles qui sont respectivement l'épaisseur du gap Δ et la longueur de cohérence ξ . On compare ce résultat à celui obtenu dans la limite $R \gg \xi$ à l'aide d'un développement harmonique du hamiltonien de basse énergie, tracé en cyan. On constate que l'accord est très bon pour $R \geq 5$. On compare de même le résultat numérique obtenu pour le premier état excité tracé en vert foncé au résultat harmonique en vert clair. Là encore l'accord est bon aux grands rayons, mais on constate que l'accord est moindre que pour l'état fondamental lorsque le rayon s'approche de la longueur de cohérence.

Les résultats numériques semblent indiquer que l'énergie de l'état fondamental tend vers $-\Delta$ lorsque le rayon R tend vers 0. Ce résultat est incompatible avec la disparition de l'état lié pour $R \rightarrow \bar{R}$. On sait néanmoins que ces résultats numériques ne sont valables que dans la limite où les effets du degré de liberté lent x peuvent être négligés, et que ce n'est plus le cas pour $R \gtrsim \bar{R}$. Il est donc probable que pour $\bar{R} \lesssim R < R^*$ l'énergie du niveau fondamental remonte vers la bande de conduction, pour y disparaître pour un rayon $R \sim \bar{R}$ comme représenté sur le schéma 4.3. Cela correspond au fait qu'il existe un rayon R_c à partir duquel les hypothèses réalisées pour arriver à l'équation maîtresse (4.27) ne sont plus valables. Ce point sera discuté en détail plus bas.

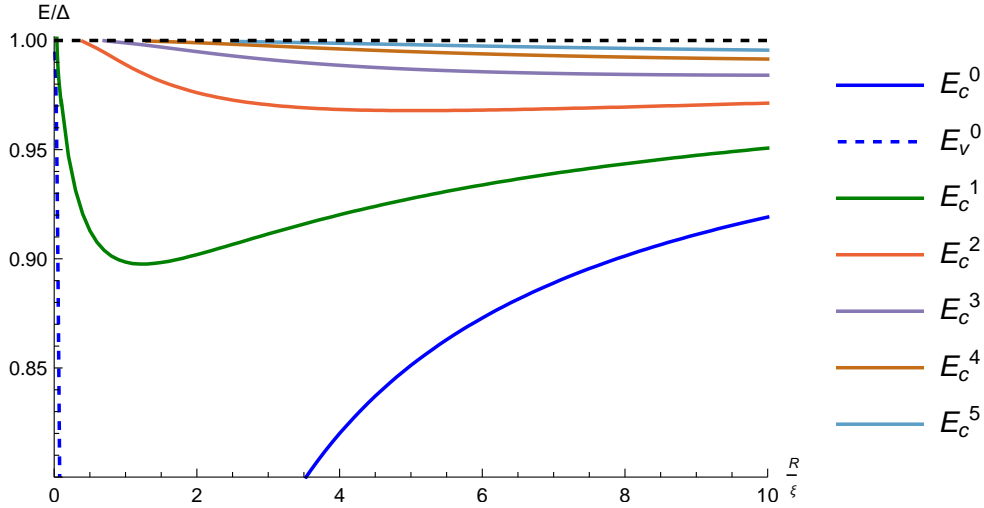


FIGURE 4.2 – Tracé des niveaux d'énergies correspondant aux états excités, valeurs propres de l'équation (4.30). Ces énergies sont données en unités naturelles de Δ , tandis que le rayon est donné en unité de la longueur de cohérence ξ . L'indice n des énergies E_c^n représente le nombre de zéros de la fonction d'onde associée selon la coordonnée y . On observe que même pour $R \sim 10\xi$ on a une rapide perte de l'harmonicit  pour les niveaux excités, avec $E^{n+1} - E^n$ diminuant rapidement avec n .

On a tracé les résultats obtenus pour les états excités sur la figure 4.2, où les indices i des énergies E_c^i tracées correspondent aux zéros de la fonction d'onde selon la coordonnée y . On observe que les différentes énergies propres sont très proches les unes des autres dans la limite $R \gg \xi$, en bon accord avec le résultat analytique obtenu dans cette limite (3.17). On peut néanmoins noter que l'harmonicit  des niveaux excités, stipulant que l'écart entre les niveaux d'énergie $E_c^{n+1} - E_c^n = \hbar\omega_y$ est constant, est rapidement perdue, les fréquences de transition diminuant rapidement avec n .

On rappelle que chacune des énergies propres E_c^i tracées ici est obtenue pour les états dits de conduction. Il existe donc pour chacune de ces énergies une énergie jumelle $E_v^i = -E_c^i$ qui est issue de la bande de valence. On voit de plus que le niveau d'énergie

fondamentale E_c^0 croise le centre du gap en $R = R^*$, ce qui signifie qu'il va y avoir un croisement entre les niveaux d'énergies E_c^0 et E_v^0 des états fondamentaux issus des deux bandes. Puisque ces deux niveaux sont chacun associés à une collection de sous-niveaux dus au degré de liberté lent x , voir l'équation (4.28), il existe un grand nombre de points de croisements entre des états d'énergies E_n^0 et $-E_n^0$ dans la région $R \lesssim R^*$. On rappelle que ces états possèdent deux à deux des polarisations opposées, prises le long de la direction imposée dans l'espace de spin par γ_+ , cela aura bientôt son importance. On veut maintenant essayer de comprendre comment ces croisements vont être impactés par les termes du hamiltonien complet que l'on a négligés jusqu'ici.

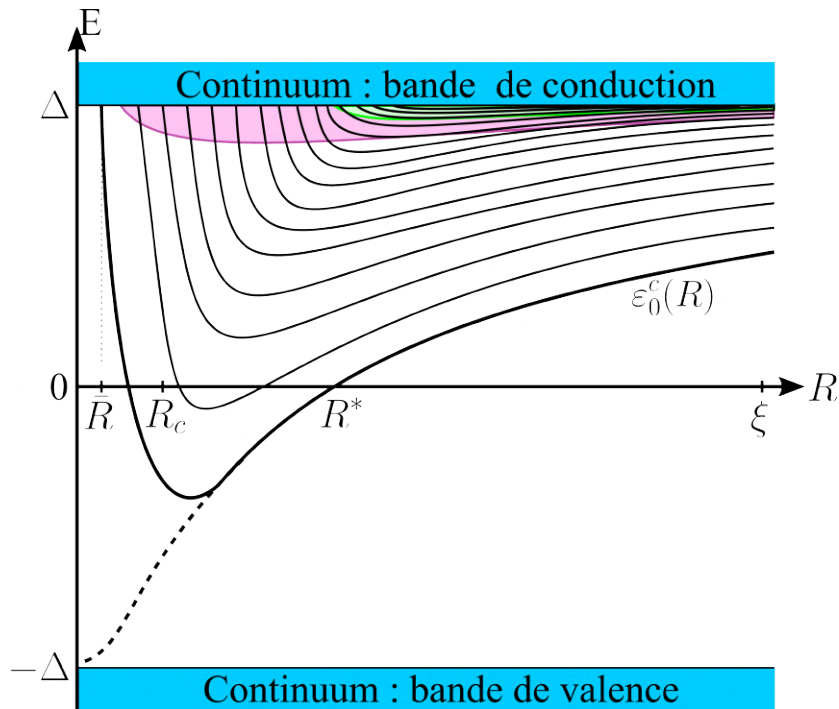


FIGURE 4.3 – Schéma représentant la structure la plus vraisemblable pour les énergies des différents états issus de la bande de conduction. On a représenté en noir l'état fondamental et les états excités liés au degré de liberté lent x qui lui sont associés. On a représenté en couleur les différentes "bandes" liées aux états excités relativement au degré de liberté rapide y . Par symétrie on aura la même structure, mais avec des signes opposés, pour les états issus de la bande de valence.

4.4 Argument de non croisement

Avant de s'attaquer au problème brute de force on se propose de présenter un argument de symétrie[39] concernant la structure globale des états liés au voisinage des supposés points de croisement.

Considérons un hamiltonien quelconque H dépendant continûment d'un paramètre R . Soient $U_1(R)$ et $U_2(R)$ deux énergies propres de ce hamiltonien, on se pose maintenant la question de savoir si il est possible que pour une valeur de R donnée ces deux énergies puissent devenir dégénérées. Pour cela prenons une valeur R_0 du paramètre R telle que les énergies propres $E_i = U_i(R_0)$ soient très proches (mais pas égales), et cherchons si, pour un paramètre proche $R = R_0 + \delta R$, les énergies propres U_i peuvent devenir dégénérées. Pour cela écrivons le hamiltonien comme étant composé du hamiltonien H_0 au point R_0 , ayant les énergies propres E_i associées au vecteurs propres $|\psi_i\rangle$, plus une perturbation $V = \delta R \frac{\partial H}{\partial R}$. Les énergies E_i du hamiltonien non perturbé H_0 étant très proches, cherchons les fonctions propres du hamiltonien perturbé sous la forme

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle. \quad (4.31)$$

On a alors l'équation de Schrödinger

$$(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (4.32)$$

menant à

$$c_1(E_1 + V - E)|\psi_1\rangle + c_2(E_2 + V - E)|\psi_2\rangle = 0 \Rightarrow \begin{cases} c_1(E_1 + V_{11} - E) + c_2V_{12} = 0 \\ c_1V_{21} + c_2(E_2 + V_{22} - E) = 0 \end{cases}. \quad (4.33)$$

Pour que ces deux équations soient compatibles il faut que le déterminant associé soit nul, ce qui conduit à

$$E = \frac{1}{2}(E_1 + E_2 + V_{11} + V_{22}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(E_1 - E_2 + V_{11} - V_{22})^2 + |V_{12}|^2}. \quad (4.34)$$

On voit alors que pour obtenir deux énergies dégénérées il faut annuler séparément les deux termes dans la racine, puisque ce sont des carrés. Cela n'est généralement pas possible lorsqu'on dispose comme ici d'un unique paramètre R . Pour que ce soit possible il faut donc que les termes hors diagonaux soient uniformément nuls, $V_{12} = V_{21}^* = 0$, pour tout R . Cela correspond généralement au cas où les énergies propres $U_1(R)$ et $U_2(R)$ correspondent à deux états de symétries différentes. On en déduit que le croisement des énergies de deux états de même symétrie est interdit dans le cas d'un hamiltonien régi par un unique paramètre R .

Dans notre cas on a que pour le profil de Belavin-Polyakov le hamiltonien ne dépend paramétriquement que du rayon. On s'attend donc à obtenir une image physique finale, après perturbation, dans laquelle tous les croisements sont évités, et où on a ainsi un groupe d'états liés issus de la bande de valence et un autre bien distinct issu de la bande de conduction. On se propose maintenant de regarder ça de plus près, en analysant notamment quels sont les termes perturbatifs pouvant être à l'origine de ces croisements évités.

4.5 Théorie des perturbations pour les croisements

Cherchons maintenant à évaluer proprement si, dans la zone $R \lesssim R^*$ où il y a de nombreux croisements entre les niveaux d'énergie d'états liés issus de la bande de valence et de la bande de conduction, il y a des croisements évités, et quelle est la largeur des écarts ouverts. A l'ordre zéro traité précédemment, on a observé que les états propres de conduction étaient polarisés $|+\rangle_{\mathbf{e}_\sigma}$. On en déduit, dans la base de spin prise relativement à \mathbf{e}_σ , que les états d'énergie nulle s'écrivent comme

$$\Psi_i^c = \begin{pmatrix} \phi_i \\ 0 \\ \psi_i \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_i^v = \begin{pmatrix} 0 \\ -\psi_i \\ 0 \\ \phi_i \end{pmatrix}. \quad (4.35)$$

L'indice i indique ici le nombre de 0 de la fonction d'onde pour le degré de liberté lent x . On peut considérer en première approximation que

$$\phi_i(x, y) \simeq \phi(y)\langle x|i\rangle, \quad \psi_i(x, y) \simeq \psi(y)\langle x|i\rangle, \quad (4.36)$$

avec $|i\rangle$ les états propres de l'oscillateur harmonique 1D, la fonction ϕ la solution de l'équation (4.15) et $\psi \simeq \frac{\gamma_-^0}{\Delta + \gamma_+^0} \phi$ avec γ_\pm^0 les termes dominants des opérateurs γ_\pm , définis selon (4.7). On a un hamiltonien complet qui s'écrit

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \gamma_+ + \Delta & \gamma_- \\ \gamma_- & \gamma_+ - \Delta \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

avec

$$\begin{aligned} \gamma_+ &= v \mathbf{A}_y^\parallel \cdot \boldsymbol{\sigma} + \sum_{i=x,y} \frac{1}{2m_i} \left[(\hat{p}_i + A_i^z \sigma^z)^2 + (A_i^\parallel)^2 \right], \\ \gamma_- &= v (\hat{p}_y + A_y^z \sigma^z) + \frac{1}{2m_i} \{ \hat{p}_i, \mathbf{A}_i^\parallel \cdot \boldsymbol{\sigma} \}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Jusqu'ici on n'a considéré que les termes proportionnels à v , et fixé x à 0 pour obtenir les expressions simplifiées de ces opérateurs (4.15), qui ont conduit aux états propres (4.35). Les termes négligés jusque là et qui vont agir comme des perturbations sont donc le terme linéaire $v A_y^z \sigma^z$ ainsi que les termes de masse, dont les composantes dominantes sont proportionnelles à m_y^{-1} ,

$$\begin{aligned} \gamma_+^{(1)} &= \frac{1}{2m_y} \left[\hat{p}_y^2 + (A_y^\parallel)^2 \right], \\ \gamma_-^{(1)} &= \frac{1}{2m_y} \{ \hat{p}_y, \mathbf{A}_y^\parallel \cdot \boldsymbol{\sigma} \}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Les termes d'ordre m_x^{-1} étant petits devant les termes du premier ordre ci dessus, on peut, à cet ordre aussi, fixer le degré de liberté lent à sa valeur moyenne 0 et ainsi

oublier le terme linéaire $vA_y^z\sigma^z$. Les états propres (4.35) du hamiltonien d'ordre 0 sont exprimés dans la base de spin associée à la direction portée par \mathbf{A}_y^\parallel , dans cette base on considère ainsi la perturbation

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \gamma_+^{(1)} & \gamma_-^{(1)}\sigma^z \\ \gamma_-^{(1)}\sigma^z & \gamma_+^{(1)} \end{pmatrix}. \quad (4.40)$$

On s'intéresse aux points de croisements entre niveaux, qui se produisent nécessairement pour des niveaux issus de bandes différentes. Ces points de croisement sont ceux pour lesquels deux énergies E_i^v et E_j^c obtenues en appliquant le hamiltonien² (4.37) aux états respectifs Ψ_i^v et Ψ_j^c sont égales. En ces points on peut montrer[39] que le couplage \mathbf{V} , considéré comme une perturbation, engendre l'apparition de deux sous niveaux d'énergie

$$E_\pm^i = \frac{1}{2} (V_{ii}^{vv} + V_{jj}^{cc} \pm \Delta_i^*) \quad (4.41)$$

associés au gap

$$\Delta_i^* = \sqrt{(V_{ii}^{vv} - V_{jj}^{cc})^2 + 4|V_{ij}^{vc}|^2}. \quad (4.42)$$

Afin d'obtenir l'expression des énergies perturbées on doit donc calculer les élément de matrice V_{ii}^{vv} , V_{jj}^{cc} , et $V_{ij}^{cv} = \langle \Psi_i^c | \mathbf{V} | \Psi_j^v \rangle$. On a

$$\begin{aligned} V_{ii}^{vv} &= \int d^2r \left(\phi_i^* \gamma_+^{(1)} \phi_i + \psi_i^* \gamma_+^{(1)} \psi_i + \phi_i^* \gamma_-^{(1)} \psi_i + \psi_i^* \gamma_-^{(1)} \phi_i \right), \\ V_{jj}^{cc} &= \int d^2r \left(\phi_j^* \gamma_+^{(1)} \phi_j + \psi_j^* \gamma_+^{(1)} \psi_j + \phi_j^* \gamma_-^{(1)} \psi_j + \psi_j^* \gamma_-^{(1)} \phi_j \right), \end{aligned} \quad (4.43)$$

et $V_{ij}^{vc} = V_{ij}^{cv} = 0$ puisque \mathbf{V} ne contient que des termes diagonaux par blocs. On peut noter que dans le cadre de l'approximation présente où le degré de liberté lent x a été fixé à 0, les deux intégrales V_{ii}^{vv} et V_{jj}^{cc} sont égales puisque l'intégrale sur x ne conduit qu'à de simples produits scalaires entre états normés. On en déduit qu'à cet ordre il n'y a pas de levée de dégénérescence due aux couplages des deux états dégénérés puisque \mathbf{V} est diagonal par blocs. Cette perturbation ne change donc que peu la physique, le point de croisement existe toujours mais se fait à une énergie non nulle désormais,

$$E_i \simeq V_{ii}^{vv} \sim \int dy \left(\phi_i^* \gamma_+^{(1)} \phi_i + \psi_i^* \gamma_+^{(1)} \psi_i \right) \sim \Delta \frac{a\xi}{(R^*)^2} \sim \Delta \frac{a}{\xi} \ll \Delta \quad (4.44)$$

brisant ainsi légèrement la symétrie particule-trou.

Afin d'obtenir une levée de dégénérescence on voit qu'il faut aller à un ordre tel que la perturbation \mathbf{V} ne soit plus diagonale par blocs. Il faut donc un terme de la forme³

$$A_i^z \sigma^x \quad (4.45)$$

2. On applique ce hamiltonien en prenant γ_\pm au premier ordre, c'est à dire en prenant les termes linéaires en impulsion, et le plus petit opérateur portant sur le degré de liberté lent.

3. On a considéré ici que $\mathbf{A}_y^\parallel \cdot \boldsymbol{\sigma}$ était diagonalisé via une rotation qui envoie \mathbf{e}_σ sur \mathbf{e}_z . On peut ainsi toujours choisir la rotation qui envoie dans le même temps \mathbf{e}_z sur \mathbf{e}_x .

dans la base de spin relative à \mathbf{e}_σ . Pour cela il faut donc réintroduire le degré de liberté lent x et donc regarder le couplage entre états dégénérés induits par les termes en m_x^{-1} . Le hamiltonien associé $\mathbf{V}^{(2)}$ va dépendre de

$$\begin{aligned}\gamma_+^{(2)} &= \frac{1}{2m_x} \left[(\hat{p}_x + A_x^z \sigma^x)^2 + (A_x^\parallel)^2 \right] + \frac{\{\hat{p}_y, A_y^z \sigma^x\} + (A_y^z)^2}{2m_y}, \\ \gamma_-^{(2)} &= v A_y^z \sigma^x + \frac{1}{2m_x} \left\{ \hat{p}_x, A_x^\parallel \sigma^z \right\}.\end{aligned}\quad (4.46)$$

On considère que le terme diagonal dominant $\frac{\hat{p}_x^2}{2m_x}$ associé au terme de potentiel dominant $v A_y^\parallel \sigma^z$ produit une structure harmonique pour les premiers états associés au degré de liberté lent x . On peut alors se permettre de ne considérer que la perturbation hors diagonale dominante

$$\mathbf{W} = v A_y^z \begin{pmatrix} 0 & \sigma^x \\ \sigma^x & 0 \end{pmatrix}.\quad (4.47)$$

On a alors

$$\begin{aligned}W_{jj}^{cc} &= W_{ii}^{vv} = 0, \\ W_{ij}^{vc} &= (W_{ji}^{cv})^* = v \int dx dy A_y^z (\phi_i^* \phi_j - \psi_i^* \psi_j).\end{aligned}\quad (4.48)$$

On sait que A_y^z est une fonction paire selon y mais impaire selon x , on aura donc un couplage W_{ij}^{vc} non nul uniquement entre états de parités différentes. On fait ici l'approximation $A_y^z \sim \frac{\tilde{x}}{1+\tilde{x}^2} \frac{1}{1+\tilde{y}^2}$, afin de découpler les variables. On approxime de même les fonctions d'onde comme séparables et on peut ainsi traiter séparément les intégrales portant sur les degrés de liberté \tilde{x} et \tilde{y} . On peut montrer numériquement que les intégrales sur le degré de liberté rapide se comportent comme⁴

$$\int d\tilde{y} \frac{|\phi|^2 - |\psi|^2}{1+\tilde{y}^2} \sim \int d\tilde{y} \frac{|\phi|^2 - |\phi'|^2}{1+\tilde{y}^2} \sim \frac{1}{2},\quad (4.49)$$

en utilisant la normalisation

$$\langle \Psi_i^v | \Psi_i^v \rangle = \int d\tilde{y} (|\phi|^2 + |\psi|^2) \simeq \int (|\phi|^2 + |\phi'|^2) = 1.\quad (4.50)$$

On a ainsi

$$W_{ij}^{vc} \simeq \Delta \frac{\xi}{2R^2} \langle n | \frac{\hat{x}}{1+\hat{x}^2/R^2} | m \rangle \simeq \Delta \frac{\xi}{2R^2} \langle n | \hat{x} | m \rangle\quad (4.51)$$

puisque les premières fonctions propres de l'oscillateur harmonique sont localisées au fond du puits de potentiel. On utilise maintenant la propriété des polynômes d'Hermite qui stipule que, en notant ψ_n les fonctions propres de l'oscillateur harmonique,

$$x \psi_n(x) = \sqrt{\frac{\hbar}{m_x \omega_x}} \left(\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right).\quad (4.52)$$

4. Puisque $\psi \simeq \frac{\gamma_-^0}{\Delta + \gamma_+^0} \phi$ et que $\gamma_-^0 \sim \Delta \frac{\xi}{R} \partial_{\tilde{y}}$ on a $\psi \sim \partial_{\tilde{y}} \phi$ pour $R \sim \xi$.

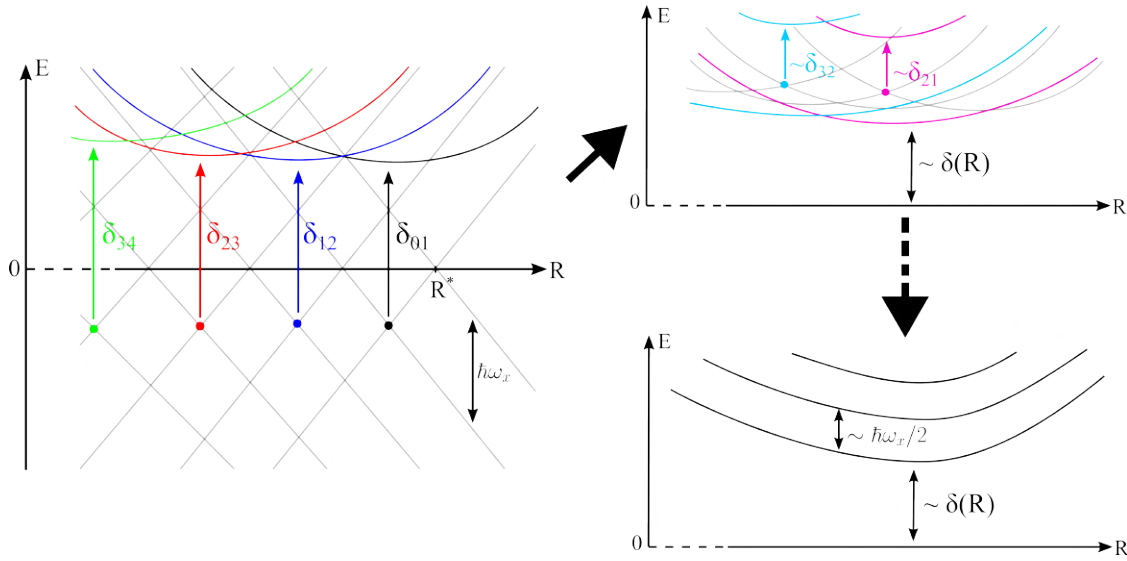


FIGURE 4.4 – Schéma représentant la structure énergétique des états liés pour $R \lesssim R^*$. Le terme hors diagonal $A_y^z \sigma^z$ ouvre un gap, dont l'expression est donnée par (4.54), entre les niveaux ayant des parités différentes selon x . L'écart entre niveaux excités est de l'ordre de $\hbar\omega_x$, cette fréquence pouvant être approchée suivant un modèle harmonique par l'expression (4.29). On peut commencer par appliquer la perturbation aux points de croisements représentés en couleur sur la figure gauche. On observe que cela conduit à l'apparition de nouvelles intersections pour lesquelles on peut réitérer le même raisonnement, conduisant à la figure en haut à droite. Les différentes itérations de ce raisonnement finiront par conduire petit à petit à supprimer tous les croisements pré-existants, comme représenté sur la figure en bas à droite. L'écart final attendu entre les niveaux est de l'ordre de $\hbar\omega_x/2$ puisque ces niveaux résultent de l'interaction entre deux bandes ayant des densité d'états $(\hbar\omega_x)^{-1}$.

On en déduit que

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{x}|m\rangle &= 0 \text{ pour } |n-m| \neq 1 \\ \langle n|\hat{x}|n+1\rangle &= \sqrt{\frac{n+1}{2}} \sqrt{\frac{\hbar}{m_x \omega_x}} = \frac{\sqrt{n+1}}{2} \left(\frac{m_y a}{m_x R}\right)^{1/4} \frac{R}{\left(1 + \frac{\xi}{2R}\right)^{1/4}}. \end{aligned} \quad (4.53)$$

On constate donc que dans cette approximation, un écart d'énergie n'est ouvert qu'aux points de croisement entre niveaux successifs, et que cet écart sera de l'ordre de

$$\delta_{n,n+1} = 2W_{ij}^{vc} \simeq \Delta \frac{\xi}{R} \frac{\sqrt{n+1}}{2} \left(\frac{m_y a}{m_x R}\right)^{1/4} \frac{1}{\left(1 + \frac{\xi}{2R}\right)^{1/4}}. \quad (4.54)$$

En réalité A_y^z n'est pas une fonction séparable, et les fonctions d'onde des différents niveaux excités sont plus complexes que celles de l'oscillateur harmonique 1D. On peut

cependant argumenter que leur parité est une propriété robuste, tout comme le caractère impaire de la fonction A_y^z . Cela implique qu'il ne peut y avoir des croisements évités qu'entre niveaux de différentes symétries spatiales (de différentes parités), et que le gap ouvert en ces points sera de l'ordre de $\delta_{0,1}$ ou plus petit. Il faut maintenant comprendre ce que signifie ce résultat. On a notamment un ratio

$$\frac{\delta_{01}}{\hbar\omega_x} \simeq \frac{1}{2} \left[\epsilon \frac{\xi}{R} \left(1 + \frac{\xi}{2R} \right)^3 \right]^{-1/4} \quad (4.55)$$

qui est grand devant l'unité pour $R \leq R^*$ puisque $\epsilon \ll 1$. Cela signifie que si on ne considère que les croisements proches du centre du gap on va avoir une suppression effective des croisements entre niveaux de mêmes symétries spatiales, comme représenté sur la gauche de la figure 4.4. Au voisinage de ces croisements évités les nouveaux états propres sont de la forme

$$\Psi_i^\pm(R) = \alpha_\pm(\delta R)\Psi_i^c(R) \pm \beta_\pm(\delta R)\Psi_{i+1}^v(R) \quad (4.56)$$

où $\delta R = R - R_\times$ où R_\times est l'abscisse du point de croisement évité. On a $\alpha_\pm^2 + \beta_\pm^2 = 1$, et $\alpha_\pm(0) = \beta_\pm(0) = 1/\sqrt{2}$ [39]. Lors du croisement d'états effectifs associés aux états propres Ψ_i^+ et Ψ_{i+2}^+ on voit que l'on va avoir un couplage entre les sous états Ψ_i^c et Ψ_{i+3}^v ainsi que Ψ_{i+1}^v et Ψ_{i+2}^c . On aura donc là encore des croisements évités, voir le schéma en haut à droite de la figure 4.4. En réitérant ce raisonnement de manière itérative on en déduit que les croisements vont successivement disparaître pour finalement générer une structure analogue à celle présentée sur le schéma en bas à droite de la figure 4.4. On peut noter que l'ordre de grandeur entre l'écart des deux niveaux dont l'énergie est la plus petite en norme devrait être de l'ordre de grandeur de δ_{01} . Ce raisonnement est aussi illustré à une échelle structurelle globale sur la figure 4.5, qui montre comment se transforme la structure globale prédite par les termes dominants lorsqu'on applique les termes correctifs (en particulier $A_y^z\sigma^z$) comme perturbations.

La structure finalement obtenue est en excellent accord avec l'argument qualitatif de la molécule diatomique présenté dans la section 4.4 qui prédit ici que puisque le hamiltonien dépend paramétriquement du rayon R seulement, alors il ne peut y avoir de croisement entre les états liés qui sont états propres de ce hamiltonien.

On peut noter qu'il existe un autre terme hors diagonal proportionnel à A_x^z , qui est donc cette fois une fonction impaire de y . La figure 4.1 révèle cependant qu'il n'y a pas en première approximation de croisement entre états ayant des symétries différentes selon y , l'étude de ce terme n'est donc pas pertinente.

Fort de cette connaissance de la structure détaillée des états liés pour $R \lesssim R^*$, on veut maintenant compléter l'image physique donnant la structure des états pour tous les rayons.

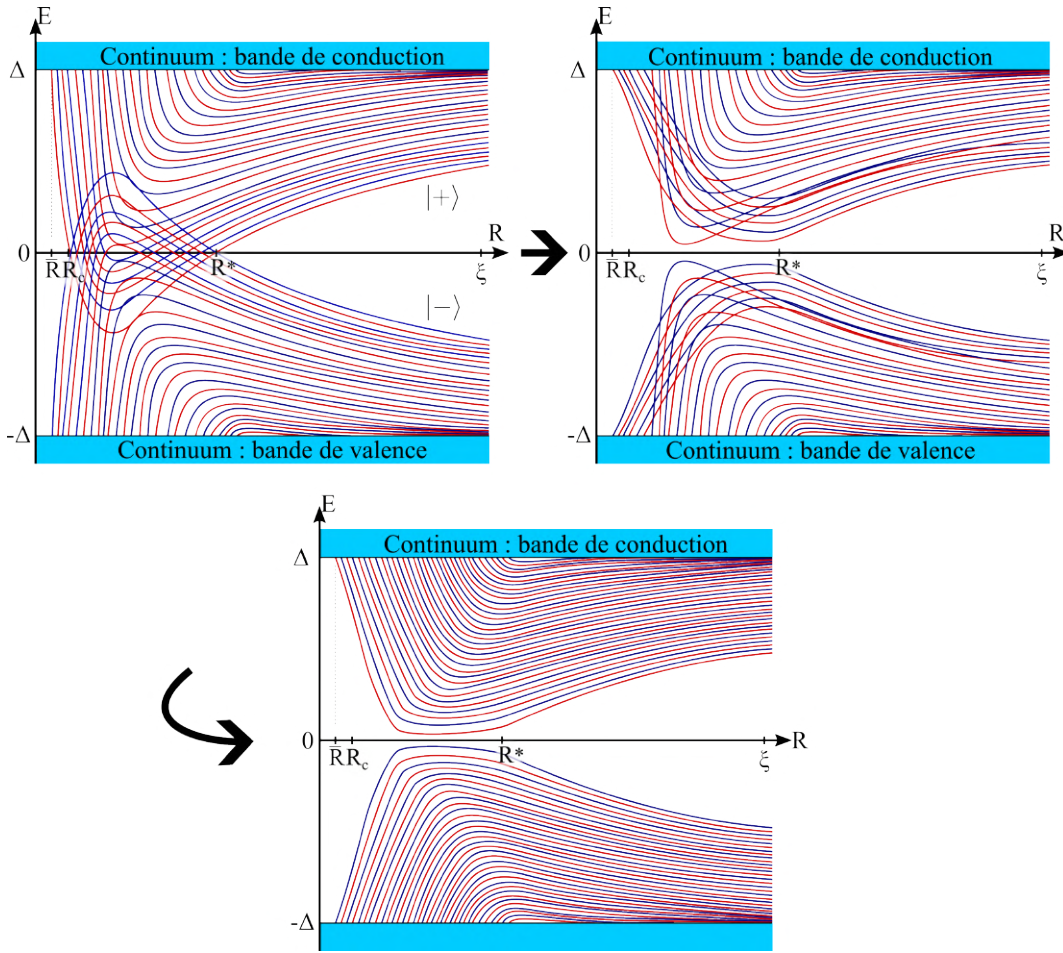


FIGURE 4.5 – Le terme perturbatif $A_y^z \sigma^z$ couple les états ayant des symétries spatiales différentes ainsi que des polarisations opposées. On a représenté en rouge les états paires selon x et ayant une polarisation $|+\rangle$, ainsi que les états de polarisation $|-\rangle$ étant impaires selon x . De cette manière seuls les états de même couleur interagissent entre eux via le terme perturbatif $A_y^z \sigma^z$, qui ouvre donc un écart à chaque croisement, produisant à chaque fois deux états de polarisations superposées. Les énergies des nouveaux niveaux ainsi produits sont représentées sur la figure de droite. Il semble alors demeurer des croisements apparents mais ces croisements vont être évités pour les mêmes raisons, conduisant à la situation représentée schématiquement dans la troisième vignette, où il ne demeure aucun croisement. On pourra noter que pour cette dernière image la polarisation des niveaux n'est plus selon $|+\rangle$ ou $|-\rangle$ mais selon une superposition des deux pour $R \lesssim R^*$.

4.6 Image physique

On commence maintenant à avoir une vision claire de la structure des états liés pour la région $R \lesssim R^*$, cherchons pour quel rayon $R_c \ll \xi$ cette image devient fautive. Cela

correspond au point où, soit l'écart d'énergie $\hbar\omega_x$, soit la taille caractéristique $\delta \equiv \delta_{01}$ des écarts, devient comparable à l'épaisseur du gap Δ , et où les considérations ci dessus deviennent donc caduques. Si on suppose $R_c \ll \xi$ alors on doit résoudre

$$\hbar\omega_x \simeq \Delta\sqrt{\epsilon} \left(\frac{\xi}{R_c} \right)^2 = \Delta \quad (4.57)$$

soit

$$R_c \sim \epsilon^{1/4}\xi. \quad (4.58)$$

On a de même que l'écart caractéristique ouvert aux points de croisement

$$\delta \simeq \Delta \frac{\xi}{R} \epsilon^{1/4} \quad (4.59)$$

devient comparable à l'épaisseur du gap d'énergie Δ pour $R \sim R_c$. On en déduit ainsi que dans la limite $R \rightarrow R_c$ tous les calculs et raisonnement utilisés jusque là deviennent caduques. On voit donc ici que pour que ces discussions aient un sens, il faut une forte anisotropie couplée à une grande longueur de cohérence, afin de minimiser $\epsilon = \frac{m_y a}{m_x \xi}$, de telle sorte à ce que le rayon critique R_c demeure petit devant R^* . Dans ce cas les considérations de la section précédente amènent finalement à schématiser la structure qualitative générale des états liés comme sur la figure 4.6 qui synthétise les résultats de ce chapitre.

Cette image physique est valable pour un skyrmion de Belavin-Polyakov de charge $Q = 1$. Il est légitime de se demander si elle peut se généraliser au cas d'un skyrmion de charge $Q \neq 1$, et à d'autres profils de skyrmion. On se propose de commencer par adresser la première question afin de conclure les chapitres sur le profil de Belavin-Polyakov.

4.7 Cas d'un skyrmion de charge quelconque

4.7.1 Nouveau champ de jauge

Considérons maintenant le cas général d'un skyrmion de charge topologique quelconque $Q \neq 1$ afin de généraliser les résultats précédemment obtenus pour un skyrmion de charge 1. On peut généraliser dans ce cas le profil de Belavin-Polyakov comme celui satisfaisant l'équation

$$Q \frac{\sin \theta}{r} = \frac{d\theta}{dr}. \quad (4.60)$$

Cela permet, tout comme dans le cas d'un skyrmion de Belavin-Polyakov de charge 1, de considérablement simplifier les composantes dans le plan \mathbf{A}_i^{\parallel} du champ de jauge. Dans ce cas le terme de potentiel dominant devient

$$v \mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \Delta Q \frac{\xi}{R} \frac{1}{1+z^2} \mathbf{e}_{\sigma}^Q \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (4.61)$$

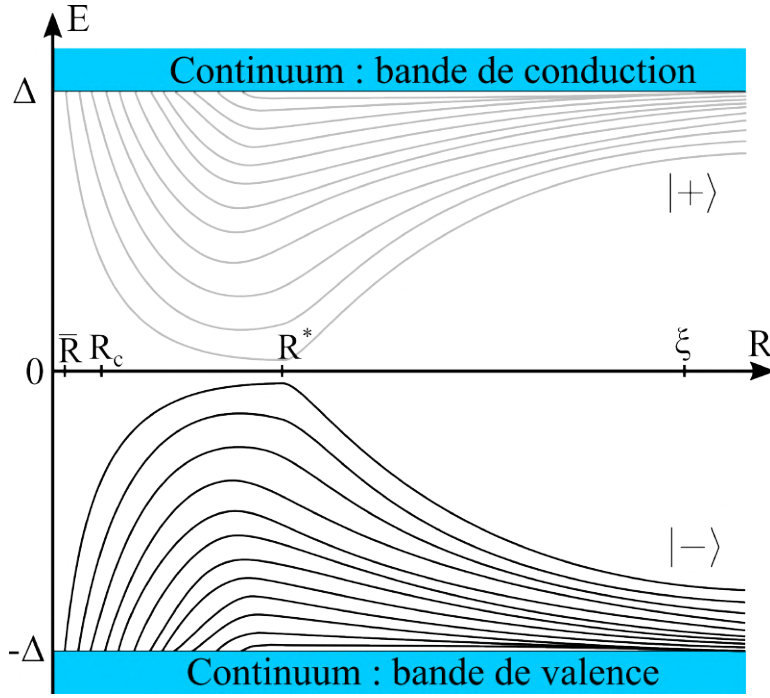


FIGURE 4.6 – Représentation schématique de la structure énergétique des états liés pour le profil de Belavin-Polyakov. On observe que pour $R \geq \xi$ les états liés se rapprochent de leurs bande respectives, obéissant au comportement asymptotique harmonique (3.17). Si on réduit le rayon on observe un premier croisement pour $R = R^*$, en dessous duquel on observe la structure complexe de la figure 4.4. Cette description devient caduque pour $R \lesssim R_c$, avant que les derniers états liés ne disparaissent pour $R = \bar{R}$.

avec

$$\mathbf{e}_\sigma^Q = \begin{pmatrix} \cos [\gamma + (Q - 1)\alpha] \\ \sin [\gamma + (Q - 1)\alpha] \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.62)$$

On observe d'une part que la norme du potentiel prend un facteur Q , impliquant à priori des états liés plus profonds que dans le cas $Q = 1$. On observe de plus que la direction de ce potentiel dans l'espace de spin n'est plus fixée, mais dépend de la coordonnée angulaire du plan $\alpha = \arctan \frac{y}{x}$. Cela signifie que pour diagonaliser ce terme on va devoir appliquer au hamiltonien un opérateur $P(\alpha)$ qui dépend lui même de α . On va alors assister, de manière similaire au cas de l'application de l'opérateur U , à l'apparition d'un nouveau champ de jauge effectif

$$\mathcal{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} = -i P^\dagger \partial_i P. \quad (4.63)$$

On se propose de faire le choix suivant pour P

$$P(\alpha) = \frac{1 - i \mathbf{e}_\perp \cdot \boldsymbol{\sigma}}{\sqrt{2}} \quad (4.64)$$

avec

$$\mathbf{e}_\perp = \begin{pmatrix} \sin[\gamma + (Q-1)\alpha] \\ -\cos[\gamma + (Q-1)\alpha] \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.65)$$

Cela correspond à une rotation d'angle $\frac{\pi}{2}$ autour du vecteur \mathbf{e}_\perp , qui appartient au plan Oxy et est orthogonal à \mathbf{e}_σ^Q . On peut noter que

$$\partial_\alpha \mathbf{e}_\perp = (Q-1)\mathbf{e}_\sigma^Q. \quad (4.66)$$

On en déduit que dans cette jauge le champ \mathcal{A}_i^α s'exprime comme

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} &= -\frac{i}{2} (1 + i\mathbf{e}_\perp \cdot \boldsymbol{\sigma}) \left(-i(Q-1)\partial_i \alpha \mathbf{e}_\sigma^Q \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) \\ &= -\frac{(Q-1)}{2} \partial_i \alpha \left(\mathbf{e}_\sigma^Q \cdot \boldsymbol{\sigma} + \sigma^z \right). \end{aligned} \quad (4.67)$$

Le hamiltonien devient sous cette transformation

$$H_Q = P^\dagger H P = \frac{1}{2m_i^*} \left(\hat{p}_i + A_i^z \left(-\mathbf{e}_\sigma^Q \cdot \boldsymbol{\sigma} \right) + \mathcal{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} \right)^2 + \Delta Q \frac{\xi}{R} \frac{1}{1+z^2} \sigma^z. \quad (4.68)$$

Pour $R \gg \xi$, le nouveau champ de jauge peut être négligé pour les mêmes raisons que celles avancées pour négliger les puissances de A_i^z . L'image physique reste donc la même, bien que les états liés soient plus profonds et plus espacés puisque le potentiel attractif est Q fois plus profond. On voit cependant que pour les petits rayons ce champ de jauge additionnel va jouer un rôle important, modifiant potentiellement le rayon de disparition \bar{R} du dernier état lié. Afin d'étudier cet effet on va se placer dans le cadre du modèle jouet isotrope, plus élégant et plus sobre d'un point de vue calculatoire.

4.7.2 Cas modèle isotrope

On se place dans le cas isotrope, en prenant $m_i^* = m^* = \sqrt{m_x^* m_y^*}$. On utilise que

$$\partial_x \alpha = -\frac{\sin \alpha}{r} = -\frac{y}{r^2}, \quad \partial_y \alpha = \frac{\cos \alpha}{r} = \frac{x}{r^2}, \quad (4.69)$$

pour obtenir l'expression des différents termes de potentiel. On a tout d'abord un terme répulsif

$$\sum_i \|\mathcal{A}_i\|^2 = \frac{(Q-1)^2}{2r^2} = \frac{1}{R^2} \frac{(Q-1)^2}{2z^2}. \quad (4.70)$$

On a de même le terme $\hat{p}_i (\mathcal{A}_i^\alpha \sigma^\alpha)$, pour lequel on utilise

$$\partial_x^2 \alpha = \frac{2xy}{r^4} = -\partial_y^2 \alpha, \quad \sum_{i=x,y} (\partial_i \alpha)^2 = \frac{1}{r^2} \quad (4.71)$$

pour obtenir

$$\hat{p}_i(\mathcal{A}_i^\alpha \sigma^\alpha) = -i \frac{(Q-1)^2}{2} \frac{1}{r^2} \mathbf{e}_\perp \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.72)$$

Ce terme est hors diagonal et doit donc peu jouer au premier ordre. Le dernier terme de potentiel est

$$\{-A_i^z \mathbf{e}_\sigma^Q \cdot \boldsymbol{\sigma}, \mathcal{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}\} = -2A_i^z \mathcal{A}_i^\parallel = \frac{1}{2}(Q-1) \frac{1 - \cos \theta}{r^2} = \frac{1}{R^2} \frac{Q-1}{1+z^2}. \quad (4.73)$$

Les deux termes diagonaux (4.70) et (4.73) sont indépendants de α , et les termes restants $\mathcal{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} \hat{p}_i$ et $A_i^z \hat{p}_i$ sont proportionnels à ∂_α . On en déduit que les variables angulaires et radiales sont séparables, et que les valeurs propres l du moment cinétique sont de bon nombres quantiques. On considère alors le cas $l = 0$ pour obtenir un hamiltonien ne dépendant que de la variable radiale z , dont la partie potentielle s'écrit comme

$$U_{eff}^\uparrow = \frac{\sqrt{\epsilon} \Delta}{2} \frac{\xi^2}{R^2} \left(\frac{Q^2 z^2}{(1+z^2)^2} + \frac{(Q-1)^2}{2z^2} + \frac{Q-1}{1+z^2} \right) - \Delta \frac{\xi}{R} \frac{Q}{1+z^2} \quad (4.74)$$

lorsqu'on le projette sur la composante $|\uparrow\rangle_{\mathbf{e}_\sigma^Q}$ de la fonction d'onde. On peut réaliser une inspection de ce potentiel suivant la même méthode que dans la section 3.3.1 sur le modèle jouet isotrope pour un skyrmion de charge 1. On regarde ainsi pour quelle valeur du rayon les termes répulsifs vont commencer à l'emporter sur l'unique terme attractif en jeu. On voit ici que le rayon de disparition du dernier état lié sera toujours de l'ordre de $\sqrt{\epsilon} \xi$, bien que le coefficient (de l'ordre de l'unité pour $Q = 2$) soit une fonction croissante de Q . On peut notamment observer que le terme (4.70) diverge au centre du skyrmion et devient donc pour $Q \neq 1$ le terme répulsif dominant. On en déduit qu'augmenter la charge d'un skyrmion produit des termes de potentiel répulsifs, conduisant à une disparition prématurée des états liés, mais que cette perturbation ne semble pas modifier l'aspect qualitatif de l'image physique obtenue sur la figure 4.6 pour un skyrmion Belavin-Polyakov de charge 1. On peut tout de même noter que puisque le rayon de disparition \bar{R} augmente avec la charge topologique Q , et que la profondeur des niveaux d'énergie pour un rayon donné augmente aussi avec Q , il est vraisemblable que d'un point de vue global augmenter la charge Q corresponde à translater l'image physique dans le sens des rayons croissants.

On ne s'attardera pas plus sur une étude détaillée du cas d'un skyrmion de charge $Q \neq 1$, puisque l'existence d'un tel skyrmion dans un matériau réel apparaît à ce jour peu vraisemblable, le coût énergétique d'un skyrmion isolé variant en première approximation linéairement avec le module de sa charge.

4.7.3 Synthèse

On a pu établir la structure énergétique et spatiale les états liés pour les différentes valeurs du rayon d'un skyrmion, et ainsi obtenir une image qualitative satisfaisante du problème. Ce résultat est cependant attaché aux propriétés spécifiques du profil de

Belavin-Polyakov, qui nous ont permis de beaucoup simplifier le problème. On peut noter de plus que le profil de Belavin-Polyakov, bien qu'apparaissant naturellement dans le cas d'un matériau parfaitement isotrope, n'est pas un bon candidat pour le cas d'un skyrmion pré-existant isolé, stabilisé par des interactions intrinsèques au matériau. On a en effet vu en introduction que pour rendre un skyrmion stable [6] il faut mettre en oeuvre des interactions de type Dzyaloshinskii-Moriya [40, 41] associé à un terme d'anisotropie. Dans un tel contexte les profils favorisés ne sont plus similaires à celui de Belavin-Polyakov, mais plutôt en paroi de domaine [42]. On se propose donc d'étudier un tel profil dans le chapitre suivant.

5

Profil en paroi de domaine

On se penchera dans ce chapitre sur le cas d'un profil de skyrmion plus réaliste, analogue de symétrie circulaire d'une paroi de domaine rectiligne. On commencera par étudier le régime des basses énergies, avant de résoudre le hamiltonien complet de manière similaire à ce que l'on a fait pour le profil de Belavin-Polyakov aux deux chapitres précédents. On verra ainsi que la structure des états liés varie qualitativement d'un profil à l'autre, révélant une très forte dépendance de la structure spatiale et énergétique des états liés vis à vis du profil du skyrmion qui les génère. On finira par traiter l'interaction d'électrons avec une paroi de domaine rectiligne, ce cas étant analytiquement solvable de manière exacte, et révélant là encore l'existence d'états liés.

Contenu du chapitre

| | | |
|------------|---|-----------|
| 5.1 | Définition et propriétés du profil | 72 |
| 5.2 | États liés peu profonds | 75 |
| 5.2.1 | Mise en forme du problème | 75 |
| 5.2.2 | Développement harmonique | 77 |
| 5.2.3 | Interaction possible entre les puits | 79 |
| 5.3 | États liés profonds | 79 |
| 5.3.1 | Image physique | 81 |
| 5.4 | Paroi de domaine rectiligne | 83 |
| 5.4.1 | Position du problème | 83 |
| 5.4.2 | Régime harmonique | 85 |
| 5.4.3 | En dehors de l'approximation harmonique | 86 |

5.1 Définition et propriétés du profil

On s'intéresse dans ce chapitre à l'interaction entre un électron et un skyrmion décrit par un profil en paroi de domaine. Cette étude est naturelle puisque ce type de profil est le plus énergétiquement favorable pour un skyrmion isolé dans un matériau magnétique. On a en effet vu dans le chapitre introductif que pour un matériau magnétique présentant des interactions de type anisotropie d'axe simple et Dzyaloshinskii-Moriya, il existe une transition entre deux états fondamentaux : la configuration uniforme et la phase spirale. Or au voisinage de cette transition l'énergie d'un skyrmion tend vers 0 (cet objet demeurant un état métastable au sein de la phase uniforme), ce dernier adoptant un profil en forme de paroi de domaine. On peut aussi noter que lors de cette transition le rayon des skyrmions diverge, ce qui est assez naturel puisque qu'un skyrmion de rayon infini est en un sens analogue à une paroi de domaine rectiligne.

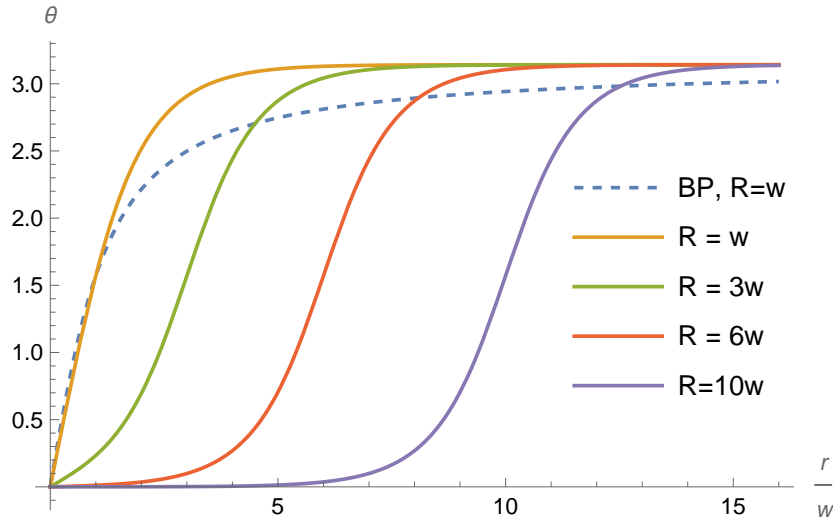


FIGURE 5.1 – Tracé de l'angle orbital $\theta(r)$ pour différentes valeurs du ratio R/w , en fonction de la coordonnée adimensionnée r/w . On voit que ce profil décrit à proprement parler une paroi de domaine seulement pour $R \geq 5w$. On a tracé en pointillés le profil de Belavin-Polyakov avec un rayon $R = w$ à guise de comparaison pour appuyer le constat que le profil en paroi de domaine est, dans la limite $R \rightarrow w$, analogue au profil de Belavin-Polyakov.

Considérons le cas d'un skyrmion de charge 1 et d'hélicité quelconque γ , décrit en coordonnées sphériques par les angles $\theta(r)$ et $\phi = \alpha + \gamma$, où $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ et $\alpha = \arctan \frac{y}{x}$ sont les coordonnées polaires repérant la position dans l'espace réel. On considère maintenant le profil d'un skyrmion en paroi de domaine défini par

$$\theta(r) = \pi - 2 \arctan \left(\frac{\sinh(R/w)}{\sinh(r/w)} \right) \quad (5.1)$$

avec par conséquent $\theta(0) = 0$ et $\theta(\infty) = \pi$. Ce profil est caractérisé par deux paramètres, le rayon du skyrmion R , et l'épaisseur de paroi w , qui est à priori de l'ordre de la longueur caractéristique de paroi de domaine $l_w = \sqrt{\frac{A}{K}}$ [42], avec A l'élasticité et K l'anisotropie, voir chapitre introductif 1.2. On a tracé le profil radial $\theta(r)$ pour différentes valeurs du ratio R/w sur la figure 5.1. On y compare aussi le cas limite $R \rightarrow w$ au profil de Belavin-Polyakov pour lequel il n'existe qu'un unique paramètre. On constate alors que localement, au centre du skyrmion, les deux profils sont assez similaires. L'exploration de la limite $R \rightarrow w$ dans le cas du profil en paroi de domaine serait donc redondante, en plus d'être éloignée des profils effectivement favorisés énergétiquement pour lesquels $R \gg w$.

On s'intéresse ici tout particulièrement au cas d'un skyrmion préformé dont l'énergie est très faible devant $4\pi A$, et qui correspond par conséquent au cas où le rayon du skyrmion R est très grand devant l'épaisseur de paroi w [42]. On peut alors utiliser la propriété suivante,

$$\theta'(r) \simeq \frac{1}{w \cosh\left(\frac{R-r}{w}\right)} = \frac{1}{w} \sin\left(2 \arctan\left(e^{(R-r)/w}\right)\right) \simeq \frac{\sin \theta}{w}, \quad (5.2)$$

valable pour $R \gg w$. On voit graphiquement sur la figure 5.2 que cette approximation est déjà excellente pour $R \gtrsim 5w$. Cela signifie que cette approximation est bien valable pour un profil ayant vraiment une allure de paroi de domaine, voir figure 5.1. On peut de plus argumenter que l'analyse va se porter principalement sur le voisinage du minimum du potentiel effectif généré par le skyrmion, correspondant à se concentrer sur le voisinage du maximum de la fonction $\theta'(r)$, secteur où l'approximation est vraiment excellente.

Au vu des deux chapitres précédents, on se propose de commencer par caractériser la composante $\mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ du potentiel vecteur qui joue un rôle prédominant dans la formation d'un état lié électron-skyrmion. On a, de manière générale, pour un skyrmion de charge $Q = 1$ et d'hélicité γ ,

$$\begin{aligned} A_y^x &= -\frac{1}{2} \left[\cos \gamma \left(\sin^2 \alpha \theta' + \cos^2 \alpha \frac{\sin \theta}{r} \right) + \sin \gamma \cos \alpha \sin \alpha \left(\theta' - \frac{\sin \theta}{r} \right) \right], \\ A_y^y &= \frac{1}{2} \left[\cos \gamma \cos \alpha \sin \alpha \left(\theta' - \frac{\sin \theta}{r} \right) - \sin \gamma \left(\sin^2 \alpha \theta' + \cos^2 \alpha \frac{\sin \theta}{r} \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.3)$$

On peut donc, dans la limite $R \gg w$, utiliser la propriété (5.2) pour faire l'approximation

$$\begin{aligned} A_y^x &\simeq -\frac{\sin \theta}{2w} \left[\cos \gamma \sin^2 \alpha + \sin \gamma \cos \alpha \sin \alpha \right], \\ A_y^y &\simeq \frac{\sin \theta}{2w} \left[\cos \gamma \cos \alpha \sin \alpha - \sin \gamma \sin^2 \alpha \right]. \end{aligned} \quad (5.4)$$

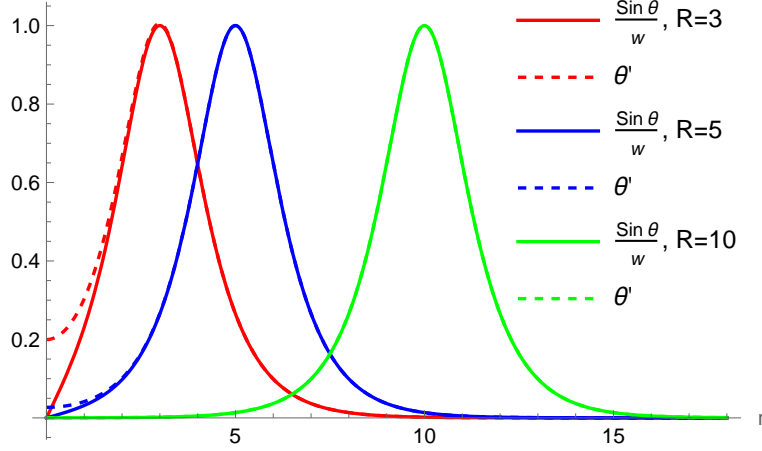


FIGURE 5.2 – Tracé de $\frac{\sin \theta}{w}$ et θ' en fonction de r pour différentes valeurs de R , dans le cadre du profil en paroi de domaine défini via l'équation (5.1). L'unité de longueur utilisée est w . On observe que pour un rayon R valant plus de cinq fois l'épaisseur de paroi w les deux fonctions $\frac{\sin \theta}{w}$ et θ' sont très proches.

On a utilisé le fait que $\sin \theta$ est une fonction prenant des valeurs significatives uniquement au voisinage de $r = R$, et que par conséquent

$$\frac{\sin \theta}{r} \sim \frac{\sin \theta}{R} \ll \frac{\sin \theta}{w} \simeq \theta' \quad (5.5)$$

pour négliger les termes en $\frac{\sin \theta}{r}$ par rapport aux termes proportionnels à θ' . On peut ainsi finalement écrire¹

$$v \mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} \simeq -\Delta \frac{\xi}{2w} \sin \theta \sin \alpha \mathbf{e}_{\sigma}^{DW} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (5.6)$$

avec $\mathbf{e}_{\sigma}^{DW} = (\sin(\alpha + \gamma), -\cos(\alpha + \gamma), 0)^t$. On constate alors que l'hélicité semble jouer un rôle similaire à celui joué pour le profil de Belavin-Polyakov : elle détermine la direction dans l'espace de spin du terme de potentiel dominant. On en déduit qu'elle fixera là encore la polarisation des états liés. Dans le cas d'un skyrmion de Néel on aura un état polarisé selon $\mathbf{e}_{\sigma}^N = (\sin(\alpha), -\cos(\alpha), 0)^t$ tandis que pour un skyrmion de Bloch ce sera selon $\mathbf{e}_{\sigma}^B = (-\cos(\alpha), -\sin(\alpha), 0)^t$. Il est intéressant de noter ici, que contrairement au cas particulier du profil de Belavin-Polyakov, la direction du potentiel, fixée par \mathbf{e}_{σ}^{DW} , dépend de la coordonnée angulaire α du plan.

Ce potentiel est non trivial et anisotrope, comme on peut le voir sur la figure 5.3. Il existe ainsi deux minimums de potentiels situés aux points $(x, y) = (0, \pm R)$ qui ont des polarisations opposées relativement à \mathbf{e}_{σ}^{DW} . On peut cependant noter que localement les polarisations sont identiques, voir schéma 5.4.

1. Cela correspond en fait à négliger les variations de ϕ par rapport à celles de θ et à ne garder ainsi que le premier vecteur dans la définition (2.44) du champ de jauge.

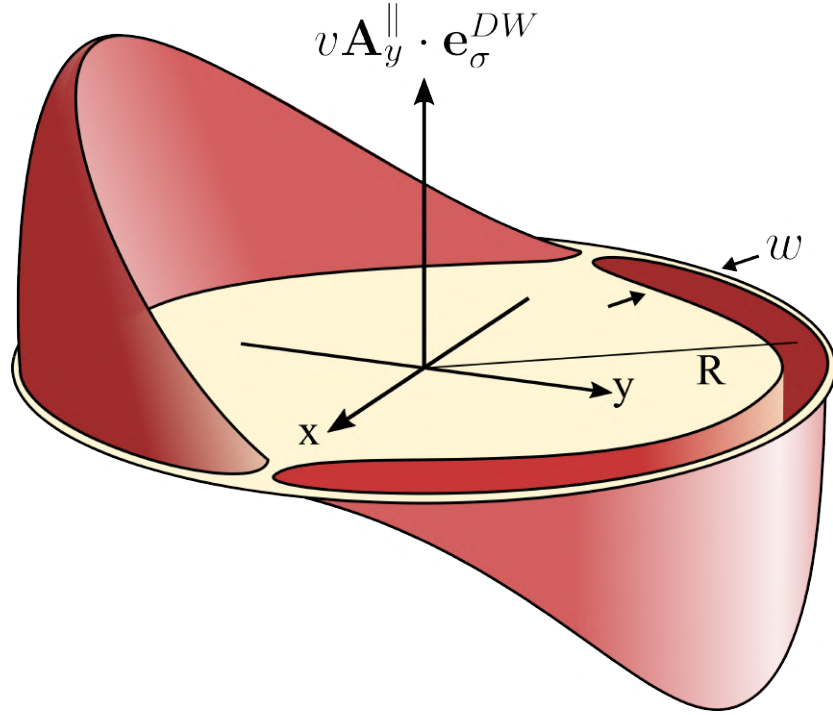


FIGURE 5.3 – Représentation schématique du potentiel dominant projeté selon \mathbf{e}_σ^{DW} , c'est à dire $v\mathbf{A}_y^\parallel \cdot \mathbf{e}_\sigma^{DW}$. On voit distinctement le minimum de potentiel situé au point $(x, y) = (0, R)$, et le maximum situé en $(0, -R)$.

On constate que, puisque $A_y^i \propto w^{-1}$, l'amplitude caractéristique du terme $v\mathbf{A}_y^\parallel \cdot \boldsymbol{\sigma}$ va être cette fois $\Delta \frac{\xi}{w}$. C'est donc l'épaisseur de paroi de domaine w qui a pris la place occupée par le rayon dans le cas du profil de Belavin-Polyakov : c'est la longueur caractéristique sur laquelle varie le paramètre d'ordre Néel qui gouverne l'énergie de l'état lié électron-skyrmion. Cette remarque nous montre que tout comme dans le cas du profil de Belavin-Polyakov, les différents régimes de l'interaction électron-skyrmion vont être indexés en fonction du rapport $\frac{\xi}{w}$. On se propose de commencer par traiter le cas des basses énergies, correspondant à $w \gg \xi$.

5.2 États liés peu profonds

5.2.1 Mise en forme du problème

Commençons par nous placer dans le cas où l'épaisseur de paroi w est grande devant la longueur de cohérence ξ , afin de voir si on peut obtenir un résultat analytique tout comme dans le cas du profil de Belavin-Polyakov. On va pour cela étudier le hamiltonien de basse énergie (2.39) valable dans cette limite.

Le terme de potentiel dominant (5.6) se découple bien dans le système de coor-

données polaires. La composante radiale $\sin \theta$ est ici une fonction ayant un maximum bien piqué sur une largeur de l'ordre de w et atteint pour $r = R$. En étudiant la partie angulaire $\sin \alpha$ on voit que ce potentiel possède deux extremums situés aux angles $\alpha = \pm \frac{\pi}{2}$, et donc symétriques par rapport au centre du skyrmion. On voit de plus que ces deux minimums de potentiel vont avoir des polarisations localement similaires puisque $\mathbf{e}_\sigma^{DW} \left(\alpha = \frac{\pi}{2} \right) = -\mathbf{e}_\sigma^{DW} \left(\alpha = -\frac{\pi}{2} \right)$.

Regardons maintenant le terme cinétique, on a

$$A_x^z = -\sin \alpha \frac{1 - \cos \theta}{2r}, \quad A_y^z = \cos \alpha \frac{1 - \cos \theta}{2r} \quad (5.7)$$

où dans le cadre de l'approximation (5.2) on a $\cos \theta \simeq \tanh \frac{R-r}{w}$. Au voisinage des points $(r, \alpha) = \left(R, \pm \frac{\pi}{2} \right)$ on a, puisque $R \gg w \gg \xi$,

$$\frac{(A_y^z)^2}{2m_y^*} \sim \Delta \frac{\xi^2}{8R^2} \left(\alpha \mp \frac{\pi}{2} \right)^2 \ll \Delta \frac{\xi}{2w} \quad \text{et} \quad \frac{(A_x^z)^2}{2m_x} \sim \Delta \frac{\epsilon \xi^2}{4R^2} \lll \Delta \frac{\xi}{2w}, \quad (5.8)$$

avec toujours $\epsilon = \frac{m_y a}{m_x \xi} \ll 1$. On en déduit que ces termes de potentiel répulsifs vont donc pouvoir être négligés pour une plage de longueurs w encore plus large à l'échelle de ξ que pour le profil de Belavin-Polyakov, on les ignorera donc pour le reste de cette section. Les anticommutateurs $\{\hat{p}_i, A_i^z\} \sigma^z$ vont eux aussi être petits comparé au terme de potentiel dominant $v \mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, et sont de plus hors diagonaux (et n'interviennent donc qu'à l'ordre 2 de la théorie des perturbations) et peuvent donc être négligés eux aussi. L'unique terme de potentiel à prendre en compte dans la limite $w \gg \xi$ est donc le terme (5.6), comme c'était déjà le cas pour le profil de Belavin-Polyakov.

Afin de pouvoir maintenant étudier la structure des états liés associés à ce potentiel effectif, il faut tout d'abord le diagonaliser. Ce terme pointe dans la direction $\mathbf{e}_\sigma^{DW} = (\sin(\phi), -\cos(\phi), 0)^t$ dans l'espace de spin, il peut donc être diagonalisé via une rotation d'angle $\frac{\pi}{2}$ autour de $\mathbf{e}_r = (\cos \phi, \sin \phi, 0)^t$. On définit ainsi

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - i \mathbf{e}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (5.9)$$

tel que

$$\begin{aligned} P^\dagger \mathbf{e}_\sigma \cdot \boldsymbol{\sigma} P &= \frac{1}{\sqrt{2}} P^\dagger \mathbf{e}_\sigma \cdot \boldsymbol{\sigma} (1 - i \mathbf{e}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) \\ &= \frac{1}{2} (1 + i \mathbf{e}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) (\mathbf{e}_\sigma \cdot \boldsymbol{\sigma} + \sigma^z) \\ &= \sigma^z \end{aligned} \quad (5.10)$$

où on a utilisé que $(\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + i(\mathbf{u} \times \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$. On doit maintenant faire attention au fait que P dépend de α et donc de x et de y . Cela signifie que l'application

de cette rotation va là encore engendrer un substitution de Pierls et l'apparition d'un autre champ de jauge

$$\begin{aligned}
\mathbb{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} &= P^\dagger (-i\partial_i) P \\
&= -\frac{i}{2} (1 + i\mathbf{e}_r \cdot \boldsymbol{\sigma}) i(\mathbf{e}_\sigma \cdot \boldsymbol{\sigma}) \partial_i \alpha \\
&= \frac{\mathbf{e}_\sigma \cdot \boldsymbol{\sigma} + \sigma^z}{2} \partial_i \alpha.
\end{aligned} \tag{5.11}$$

Sachant que

$$\partial_x \alpha = -\frac{\sin \alpha}{r} \quad \text{et} \quad \partial_y \alpha = \frac{\cos \alpha}{r} \tag{5.12}$$

on voit que au voisinage des minimas de potentiel $(x, y) = (0, \pm R)$ ces termes vont être de l'ordre de grandeur de $\frac{1}{R}$. On peut donc négliger les termes dus à ce champ de jauge exactement pour les mêmes raisons que celles qui nous ont conduit à négliger les termes dépendant des composantes A_i^z du champ de jauge "original".

Maintenant que nous avons diagonalisé le potentiel, nous allons pouvoir réaliser un développement harmonique afin de connaître la structure des états liés situés au fond du puits de potentiel.

5.2.2 Développement harmonique

Bien que le potentiel se découple naturellement en coordonnées polaires, la forte anisotropie $m_y^* \ll m_x^*$ ne nous permet pas de bénéficier de cette propriété. On se placera donc en coordonnées cartésiennes pour réaliser le développement harmonique suivant. Le potentiel peut être localement développé autour du point $(x, y) = (0, R)$ comme

$$-\sin(\alpha) \operatorname{sech} \frac{r-R}{w} = -1 + \frac{\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2}{2} + \mathcal{O}(\tilde{x}^3, \tilde{y}^3) \tag{5.13}$$

avec $\tilde{x} = \frac{x}{R}$ et $\tilde{y} = \frac{y-R}{w}$. On voit que de par la forme du potentiel, les longueurs caractéristiques selon lesquelles varie les deux degrés de liberté sont très différentes. On a ainsi une double anisotropie, à la fois pour les masses effectives et le potentiel. Cela rend le degré de liberté x vraiment très lent comparé à y , une situation qui est très propice à l'application de l'approximation de Born-Oppenheimer. On commence donc par traiter le degré de liberté rapide \tilde{y} , qui obéit à l'équation

$$-\frac{\xi^2}{2w^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} \psi^\uparrow + \frac{\xi}{2w} \left(-1 + \frac{\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2}{2} \right) \psi^\uparrow = \frac{\varepsilon}{\Delta} \psi^\uparrow. \tag{5.14}$$

La notation ψ^\uparrow signifie que l'on considère la composante de la fonction d'onde spinorielle polarisée \uparrow selon l'axe donné par \mathbf{e}_σ^{DW} . Traiter cette équation comme un oscillateur harmonique unidimensionnel mène aux énergies propres

$$\frac{\varepsilon_x^n}{\Delta} = \frac{\xi}{2w} \left(-1 + \frac{\tilde{x}^2}{2} + \left(\frac{1}{2} + n \right) \sqrt{\frac{2\xi}{w}} \right), \tag{5.15}$$

dépendant paramétriquement du degré de liberté lent \tilde{x} . On considère alors ces énergies comme des potentiel effectifs pour \tilde{x} , et on réintroduit l'opérateur différentiel portant sur \tilde{x} . Cela mène après résolution aux énergies propres

$$\frac{\varepsilon_m^n}{\Delta} = -\frac{\xi}{2w} + 2\left(\frac{1}{2} + n\right) \left(\frac{\xi}{2w}\right)^{3/2} + \left(\frac{1}{2} + m\right) \frac{\xi}{2R} \sqrt{\epsilon \frac{\xi}{w}}, \quad (5.16)$$

avec toujours $\epsilon = \frac{m_y a}{m_x \xi} \ll 1$. On observe ici que l'écart

$$\hbar\omega_x = \Delta \frac{\xi}{2R} \sqrt{\epsilon \frac{\xi}{w}} \quad (5.17)$$

entre les niveaux d'énergie liés au degré de liberté lent est bien plus petit relativement à $\hbar\omega_y$ que dans le cas du profil de Belavin-Polyakov, à cause du fait que le potentiel est ici localement anisotrope. La forme de la fonction d'onde pour l'état fondamental est représentée sur la figure 5.4. On peut estimer les dimensions caractéristiques de la fonction d'onde pour l'état fondamental en prenant les racines carrées des écart types selon les deux directions. On obtient alors

$$\frac{L_x}{R} \sim \left(\epsilon \frac{w\xi}{R^2}\right)^{1/4} \quad \text{et} \quad \frac{L_y}{w} \sim \left(\frac{\xi}{w}\right)^{1/4}. \quad (5.18)$$

On voit ainsi que l'étalement de la fonction le long de la paroi du skyrmion dépend fortement du ratio $\frac{w}{R}$ qui gouverne l'anisotropie du potentiel, mais aussi du paramètre ϵ qui gouverne quant à lui l'anisotropie des masses effectives.

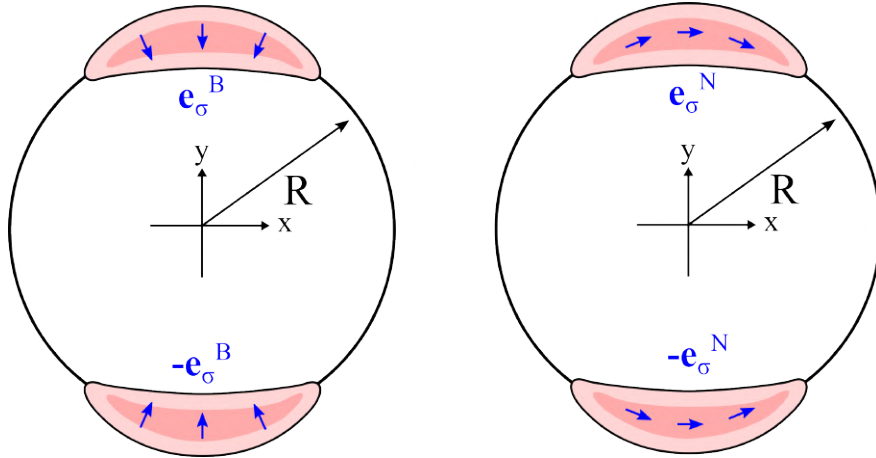


FIGURE 5.4 – Représentations schématiques des fonction d'onde des états liés fondamentaux pour deux hélicités caractéristiques, l'une $\gamma = \frac{\pi}{2}$ correspondant à un skyrmion de Bloch à gauche, et l'autre $\gamma = 0$ correspondant à un skyrmion de Néel à droite. On observe que la polarisation des deux puits est toujours localement identique.

5.2.3 Interaction possible entre les puits

Le développement réalisé ci dessus peut être mené à l'identique pour le puits de potentiel situé en $(x, y) = (0, -R)$, il suffit pour cela de projeter cette fois selon $-\mathbf{e}_\sigma^{DW}$. On peut alors légitimement se poser la question d'une interaction possible entre les deux puits, pouvant modifier les énergies propres. On peut argumenter que dans la limite harmonique les fonctions d'onde sont très localisées autour des minimums de chacun des deux puits. L'étendue caractéristique de la fonction d'onde le long de l'axe Oy est notamment petite devant w , voir (5.18). Puisque les deux puits de potentiels sont distants de $2R \gg w$ on en déduit qu'il ne peut y avoir qu'un très faible recouvrement entre les fonctions d'onde de deux puits séparés. Cela signifie qu'il n'y a pas d'interaction entre les deux puits dans la limite $R \gg w$.

On se tourne maintenant vers la recherche d'états liés profonds, afin d'établir, comme dans le cas du profil de Belavin-Polyakov, une image physique complète pour les énergies des états liés.

5.3 États liés profonds

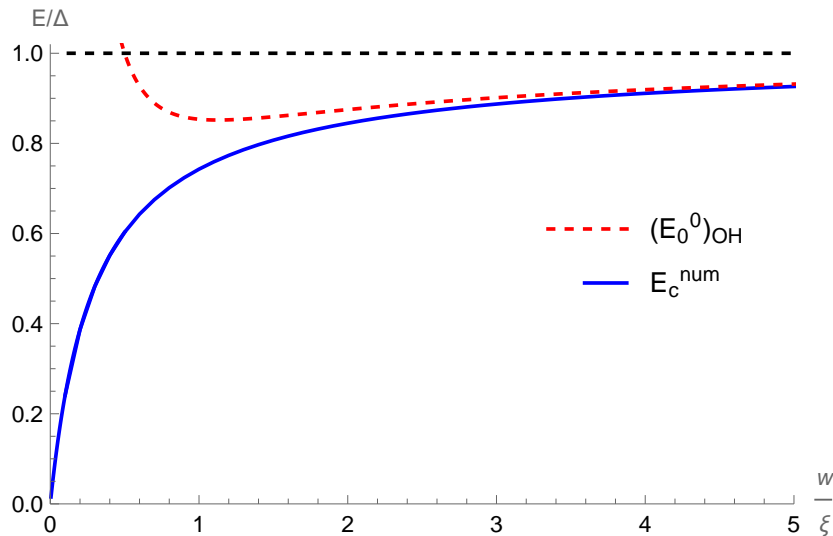


FIGURE 5.5 – Tracé en bleu de l'énergie (en unité de Δ) de l'état fondamental issu de la bande de conduction, en fonction du paramètre w (en unité de ξ). Elle est obtenue par résolution numérique de l'équation différentielle (5.20). On constate que l'accord avec le résultat analytique obtenu dans la limite $w \gg \xi$, décrit par l'expression (5.16) et tracé en pointillés rouges, est excellent pour $w \geq 3\xi$.

Tout comme dans le cas de l'étude du profil de Belavin-Polyakov, on peut maintenant se tourner vers la région $w \lesssim \xi$ de l'espace des paramètres, pour laquelle le hamiltonien

de basse énergie et l'approximation harmonique ne tiennent plus.

On peut dans cette optique utiliser le développement général effectué dans le chapitre précédent et ainsi utiliser l'équation différentielle (4.27) en y injectant l'expression spécifique du potentiel γ_+ dans le cas d'un skyrmion du type paroi de domaine. On peut par ailleurs noter que l'approximation consistant à négliger le terme vA_y^z est meilleure dans le cas présent grâce à l'anisotropie du potentiel autour du minimum du potentiel dominant.

On a ici

$$\gamma_-^2 \simeq -\Delta^2 \frac{\xi^2}{w^2} \frac{d^2}{d\tilde{y}^2}, \quad \gamma_+ \simeq \Delta \frac{\xi}{2w} \text{sech}(\tilde{y}), \quad \tilde{y} \equiv \frac{y-R}{w}, \quad (5.19)$$

où on a fixé le degré de liberté lent x à 0. On est donc amené à résoudre numériquement l'équation unidimensionnelle

$$-\frac{\xi^2}{w^2} \frac{d^2\phi}{d\tilde{y}^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\xi}{w} \right)^3 \frac{\tanh(\tilde{y})\text{sech}(\tilde{y})}{1 + \frac{E}{\Delta} + \frac{\xi}{2w}\text{sech}(\tilde{y})} \frac{d\phi}{d\tilde{y}} + \left(1 - \left[\frac{\xi}{2w}\text{sech}(\tilde{y}) + \frac{E}{\Delta} \right]^2 \right) \phi = 0 \quad (5.20)$$

où tout comme dans le cas du profil de Belavin-Polyakov il émerge un rapport naturel de longueurs $\frac{w}{\xi}$. La résolution numérique de cette équation conduit tout comme dans le cas du profil de Belavin-Polyakov aux énergies propres $E^i(w)$ du hamiltonien complet, mais où le degré de liberté lent a été ignoré. L'énergie de l'état fondamental est tracée en bleu sur la figure 5.5. On la compare au résultat obtenu dans le cadre de l'approximation harmonique pour $w \gg \xi$, tracé en pointillés, l'accord est bon pour $w \geq 3\xi$. On constate que contrairement au cas du profil de Belavin-Polyakov l'énergie de l'état fondamental ne s'annule jamais. Cela signifie que l'on n'aura pas ici de croisement entre états liés issus des bandes de valence et de conduction, et donc pas besoin de mettre en œuvre de théorie des perturbations comme on l'a fait pour le profil de Belavin-Polyakov.

On a tracé sur la figure 5.6 les énergies des états excités en fonction de l'épaisseur de paroi w . La structure observée est similaire à celle que l'on avait obtenue pour Belavin-Polyakov, bien que l'on puisse noter que ces énergies, prises relativement à la bande de conduction, sont plus petites que dans le cas du profil de Belavin-Polyakov.

Il ne faut pas oublier que, comme c'était le cas pour le profil de Belavin-Polyakov, la dynamique du degré de liberté lent produit une collection d'énergies attachées à chacune des énergies propres identifiées ici. Là encore on pourra considérer en première approximation que ces énergies seront séparées de

$$\hbar\omega_x = \Delta \frac{\xi}{2R} \sqrt{\epsilon \frac{\xi}{w}}. \quad (5.21)$$

Sachant ça on va maintenant pouvoir compléter l'image physique décrivant les énergies des états liés dans le cas d'un profil en paroi de domaine.

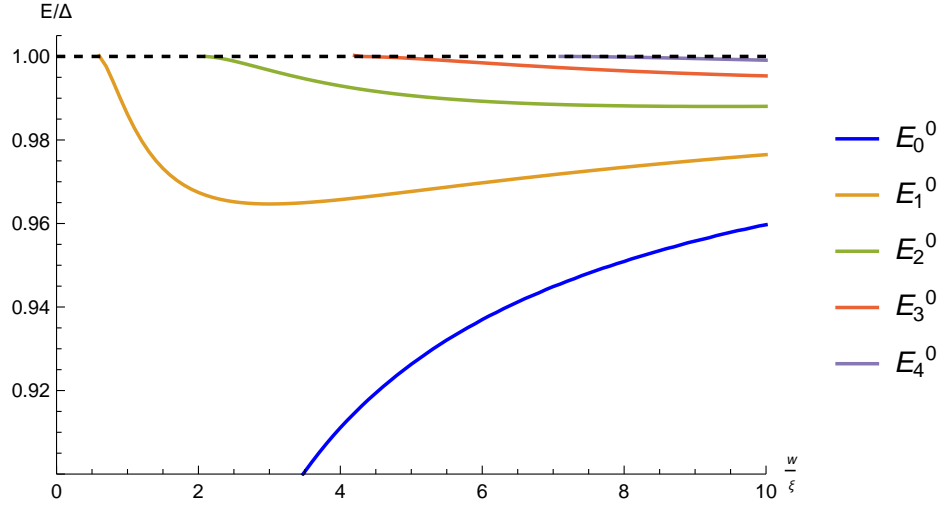


FIGURE 5.6 – Tracé des énergies des états excités (en unité de Δ) obtenues par résolution de l'équation (5.20) avec conditions aux bords. L'indice n des énergies E_n^0 correspond aux nombres de zéros de la fonction d'onde associée selon y . L'indice 0 réfère quant à lui au fait que pour chacun de ces états le comportement de la fonction d'onde selon x à été ignoré. On a donc une bonne approximation des énergies des états dont la fonction d'onde ne possède pas de zéro selon x , d'où la notation E_n^0 .

5.3.1 Image physique

On observe ici que la situation est assez différente du cas du profil de Belavin-Polyakov. En effet cette fois il n'y a pas de croisement entre les niveaux issus de la bande de conduction et ceux issus de la bande de valence, puisque l'énergie de l'état fondamental $E_0^0(w)$ ne s'annule jamais, si ce n'est dans la limite $w \rightarrow 0$ dans laquelle le modèle continu devient caduque. Cela simplifie beaucoup la structure des états liés. On peut aussi noter que l'écart entre les niveaux d'énergie liés au degré de liberté lent \tilde{x} , $\hbar\omega_x$, demeure petit devant Δ pour une plage de valeurs de w plus large que dans le cas de Belavin-Polyakov. On a en effet

$$\frac{\hbar\omega_x}{\Delta} = \frac{\xi}{2R} \sqrt{\epsilon \frac{\xi}{w}} \quad (5.22)$$

qui devient de l'ordre de l'unité pour

$$w_c = \frac{m_y}{m_x} \frac{\xi^2}{4R^2} a. \quad (5.23)$$

On en déduit que pour $R \geq \sqrt{\frac{m_y}{m_x}} \xi$ on a que $\hbar\omega_x$ demeure petit devant Δ sur tout le domaine de validité de l'approximation continue.

On peut maintenant se poser la question de savoir, si, comme dans le cas du profil de Belavin-Polyakov, on va assister ici aussi à la disparition des états liés pour w suffisamment petit.

Disparition de l'état lié

On cherche ici à estimer pour quelle épaisseur de paroi \bar{w} le dernier état lié disparaît, afin de compléter l'image physique. On avait, dans le cas de Belavin-Polyakov, que l'état lié disparaissait lorsque l'amplitude du terme $\frac{(A_y^z)^2}{2m_y^*}$ devenait comparable à celle du potentiel dominant jusqu'alors, à savoir vA_y^x . Faisons la même estimation ici, on voit, que dans le cadre de l'approximation harmonique on a pour le degré de liberté lent \tilde{x} un écart type

$$\sigma_{\tilde{x}} \simeq \sqrt{\epsilon \frac{w\xi}{R^2}}. \quad (5.24)$$

On a ainsi, dans l'état fondamental, en considérant que la description harmonique tient encore pour le degré de liberté lent,

$$\left\langle \frac{(A_y^z)^2}{2m_y^*} \right\rangle \sim \Delta \frac{\xi^2}{R^2} \langle \tilde{x}^2 \rangle \sim \Delta \frac{\xi^2}{R^2} \sqrt{\epsilon \frac{w\xi}{R^2}} \sim \Delta \frac{\xi^3}{R^3} \sqrt{\epsilon \frac{w}{\xi}}. \quad (5.25)$$

On voit que dans la limite $R \gg w$, ce terme ne peut jamais devenir comparable au potentiel dominant qui est de l'ordre de $\Delta \frac{\xi}{2w}$.

Cela signifie que pour un profil en paroi de domaine il n'y a pas de point (accessible par un modèle continu) pour lequel les états liés disparaissent.

Image physique complète

On a donc en main tous les éléments permettant de construire l'image physique décrivant la structure énergétique des états liés pour un profil en paroi de domaine. Ces éléments sont synthétisés sur la figure 5.7. Il n'y a pas, dans le cas présent, de disparition des états liés. La structure harmonique est valable pour $w \gg w_c$, au delà l'approximation harmonique devient caduque pour le degré de liberté lent. Cela implique une image physique plus simple, la polarisation est bien définie pour toute valeur de la paroi de domaine, et où les états liés issus des deux bandes demeurent bien distincts en tout point.

Maintenant que l'étude du profil en paroi de domaine est terminée, on se propose d'explorer le cas limite d'une paroi de domaine rectiligne, analogue à priori au cas d'un skyrmion de rayon infini. On va voir que ce cas modèle permet une résolution directe mettant en oeuvre très peu d'approximations. Les résultats obtenus seront de plus très pertinents pour le chapitre suivant.

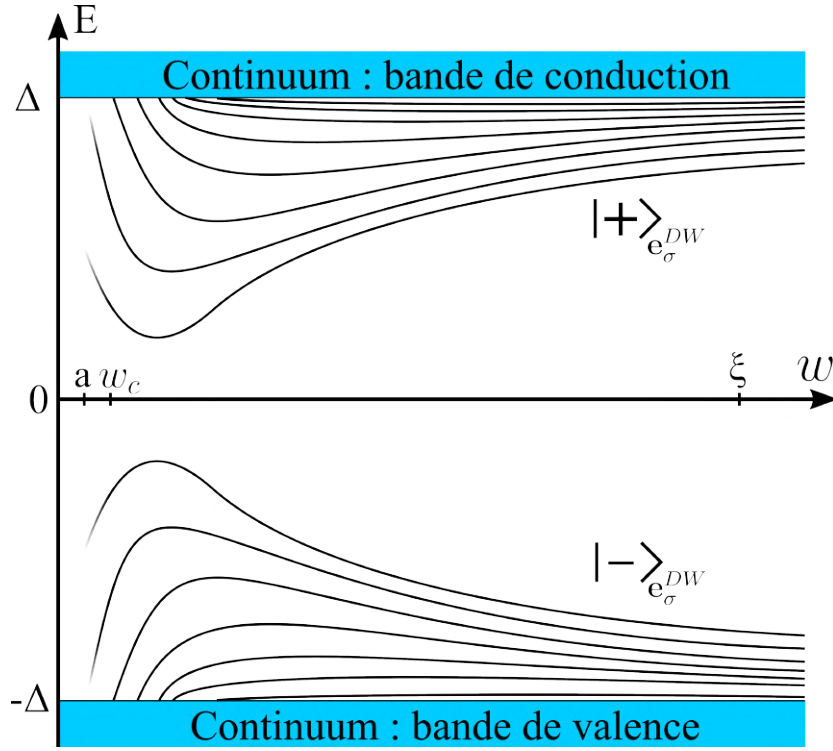


FIGURE 5.7 – Représentation schématique de la structure énergétique des états liés dans le cas d’un profil en paroi de domaine. L’abscisse est la longueur caractéristique sur laquelle varie le paramètre d’ordre Néel \mathbf{n} , qui est ici l’épaisseur de paroi w . En réalité l’écart entre niveaux successifs, de l’ordre de $\hbar\omega_x$, est bien plus faible que sur ce schéma, cette représentation grossière ne faisant donner que l’allure attendue des différents niveaux. On peut noter de même que les valeurs caractéristiques de a et w_c ne sont pas représentées à l’échelle, fixée ici par la longueur de cohérence ξ .

5.4 Paroi de domaine rectiligne

5.4.1 Position du problème

Il est légitime de se poser la question de l’interaction possible entre un électron et une paroi de domaine rectiligne. Cela correspond d’une part à la limite $R \rightarrow \infty$ pour un skyrmion en paroi de domaine et permet une résolution analytique exacte. D’autre part cet objet se forme spontanément[6] dans la phase dite spirale, observée dans les matériaux pour lesquels l’amplitude de l’interaction de Dzyaloshinskii-Moriya excède une valeur critique D_c fonction de l’élasticité et de l’anisotropie².

2. On a vu dans le chapitre introductif 1.2 que cette phase apparaissait pour $\epsilon > \frac{2}{\pi}$.

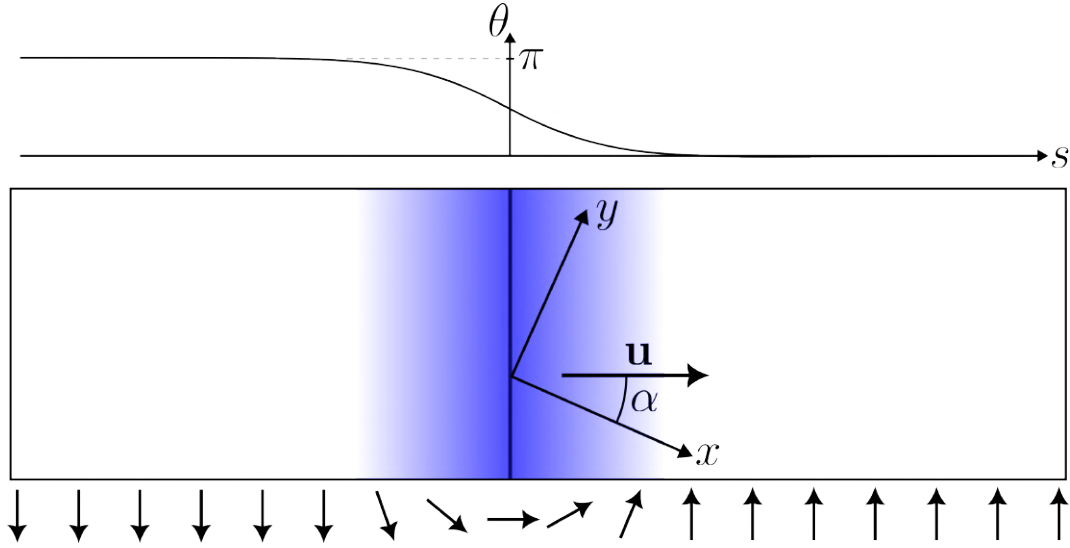


FIGURE 5.8 – Paroi de domaine rectiligne, définition des notations. Le paramètre d'ordre Néel varie selon la direction portée par le vecteur unitaire \mathbf{u} . L'angle $\theta(s)$ est fonction de la variable $s \equiv \frac{\cos(\alpha)x + \sin(\alpha)y}{w}$, et va de $\theta(-\infty) = \pi$ à $\theta(\infty) = 0$. Ce système est unidimensionnel.

On considère une paramétrisation sphérique pour le paramètre d'ordre Néel

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (5.26)$$

On a alors que pour une texture unidimensionnelle du type paroi de domaine seul l'angle orbital $\theta(x, y)$ varie. L'angle azimutal ϕ est quant à lui fixé. Cela signifie qu'on peut écrire

$$\frac{\nabla \theta}{\|\nabla \theta\|} = \mathbf{u} = \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

avec \mathbf{u} indépendant de \mathbf{r} , et $\alpha + \frac{\pi}{2}$ l'angle qui définit l'axe le long duquel se trouve la paroi de domaine. On a ainsi, au vu de l'expression générale (2.44),

$$\mathbf{A}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2} \partial_i \theta \mathbf{e}_\sigma \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (5.28)$$

avec $\mathbf{e}_\sigma = (-\sin \phi, \cos \phi, 0)$ et où $\phi = \alpha + \gamma$. γ est l'analogue de l'hélicité pour les skyrmions, on a $\gamma = 0$ pour une paroi du type Néel et $\gamma = \frac{\pi}{2}$ pour une paroi de Bloch. On en déduit que le terme de potentiel attractif va prendre la forme

$$v \mathbf{A}_y^\parallel \cdot \boldsymbol{\sigma} = \Delta \frac{\xi}{2} \frac{\partial \theta}{\partial y} \mathbf{e}_\sigma \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (5.29)$$

La variable pertinente (qui remplace la coordonnée radiale r que l'on avait dans le cas d'un skyrmion) va ici être celle prise le long du vecteur \mathbf{u} . On l'adimensionne pour la simplicité, et on la note

$$s \equiv \frac{\cos \alpha x + \sin \alpha y}{w}. \quad (5.30)$$

On peut, afin d'être cohérent avec le skyrmion en paroi de domaine précédemment traité, considérer le profil

$$\theta(x, y) = \theta(s) = 2 \arctan \left(e^{-s} \right) \quad (5.31)$$

pour une paroi de domaine rectiligne. On en déduit

$$\frac{\partial \theta}{\partial y} = -\frac{\sin \alpha}{w} \operatorname{sech} s \quad (5.32)$$

et ainsi l'expression du potentiel

$$v \mathbf{A}_y \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{\Delta \xi}{2 w} \sin \alpha \operatorname{sech} s \mathbf{e}_\sigma \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (5.33)$$

On observe immédiatement que pour $\mathbf{u} = \mathbf{e}_x$, c'est à dire $\alpha = 0$, on n'a pas de potentiel attractif, quelle que soit la valeur de l'hélicité γ . Pour $\alpha \neq 0$ on aura des états liés polarisés³ $|\downarrow\rangle$ selon \mathbf{e}_σ .

Dans la limite où la longueur caractéristique w sur laquelle varie $\theta(s)$ est grande devant la longueur de cohérence ξ on peut partiellement appliquer les résultats obtenus dans la même limite pour un skyrmion en paroi de domaine. On s'attend dans cette limite à avoir un état localisé sur une largeur inférieure à w selon la direction \mathbf{u} , et délocalisé selon le long de la paroi de domaine. Ce résultat est naturel puisque le système est invariant par translation selon la direction de la paroi.

5.4.2 Régime harmonique

On se propose d'établir les différents niveaux d'énergie des états liés selon l'approximation harmonique. On note

$$q = \frac{-\sin \alpha x + \cos \alpha y}{w} \quad (5.34)$$

la variable naturelle (adimensionnée) prise le long de la paroi. On a ainsi

$$\begin{aligned} w^2 \partial_x^2 &= \cos^2 \alpha \partial_s^2 + \sin^2 \alpha \partial_q^2 - \sin 2\alpha \partial_s \partial_q, \\ w^2 \partial_y^2 &= \sin^2 \alpha \partial_s^2 + \cos^2 \alpha \partial_q^2 + \sin 2\alpha \partial_s \partial_q. \end{aligned} \quad (5.35)$$

3. Si on considère une paroi de domaine pour laquelle θ varie de $\theta(-\infty) = 0$ à $\theta(+\infty) = \pi$ on aura la polarisation inverse $|\uparrow\rangle_{\mathbf{e}_\sigma}$.

On peut alors définir les masses effectives

$$\frac{1}{m_s} = \frac{\cos^2 \alpha}{m_x} + \frac{\sin^2 \alpha}{m_y^*}, \quad \frac{1}{m_q} = \frac{\sin^2 \alpha}{m_x} + \frac{\cos^2 \alpha}{m_y^*}, \quad (5.36)$$

et

$$\frac{1}{M} = \sin 2\alpha \left(\frac{1}{m_y^*} - \frac{1}{m_x} \right). \quad (5.37)$$

On obtient ainsi, en prenant la fonction d'onde sous la forme $\Psi^\dagger = \psi(s)e^{ikq}$, l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m_s} \frac{\psi''}{w^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_q} \frac{\psi}{w^2} - \frac{\hbar^2}{2Mw^2} ik\psi' - \Delta \frac{\xi}{w} \sin \alpha \operatorname{sech} s \psi = \varepsilon_k \psi. \quad (5.38)$$

On utilise que

$$\frac{\hat{p}_s^2}{2m_s} + \frac{\hbar k}{w} \frac{\hat{p}_s}{2M} = \frac{1}{2m_s} \left(\hat{p}_s + \frac{\hbar k m_s}{2w M} \right)^2 - \frac{m_s}{8M^2} \frac{\hbar^2 k^2}{w^2} \quad (5.39)$$

avec $\hat{p}_s = -\frac{i\hbar}{w} \partial_s$ pour faire la transformation suivante pour la fonction d'onde

$$\psi = \exp \left[-i \frac{k m_s}{2 M} s \right] \tilde{\psi}. \quad (5.40)$$

On obtient ainsi

$$\frac{\hat{p}_s^2}{2m_s} \tilde{\psi} - \Delta \frac{\xi}{w} \sin \alpha \operatorname{sech} s \tilde{\psi} = \left(\varepsilon_k + \frac{m_s}{8M^2} \frac{\hbar^2 k^2}{w^2} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_q} \frac{1}{w^2} \right) \tilde{\psi}, \quad (5.41)$$

une équation qui se prête à un développement harmonique direct. On obtient alors les énergies propres

$$\varepsilon_k^n = -\Delta \frac{\xi}{w} \sin \alpha + \left(\frac{1}{2} + n \right) \frac{\hbar}{w} \sqrt{\frac{\Delta \xi \sin \alpha}{m_s w}} + \left(\frac{1}{2m_q} - \frac{m_s}{8M^2} \right) \frac{\hbar^2 k^2}{w^2}. \quad (5.42)$$

On observe qu'il existe des niveaux discrets dus au potentiel effectif généré par la paroi de domaine, associés à un continuum d'états dus au caractère invariant par translation de la paroi de domaine. Voyons maintenant ce que l'on peut dire en dehors de l'approximation harmonique.

5.4.3 En dehors de l'approximation harmonique

Pour $w \leq \xi$, on peut obtenir les niveaux d'énergie numériquement pour le degré de liberté s . On a en effet $A_i^z = 0$ et on peut donc utiliser l'équation (4.27) qui est ici

exacte, avec γ_+ décrit par (5.29). On est alors amené à résoudre l'équation

$$\begin{aligned}
& -\frac{\xi^2}{w^2} \left[\sin^2 \alpha \partial_s^2 + \cos^2 \alpha \partial_q^2 + \sin 2\alpha \partial_s \partial_q \right] \phi \\
& - \frac{1}{2} \frac{\xi^3}{w^3} \frac{\sin^2 \alpha \tanh(s) \operatorname{sech}(s)}{1 + \frac{\xi}{2w} \sin \alpha \operatorname{sech}(s) + \frac{E}{\Delta}} (\sin \alpha \partial_s + \cos \alpha \partial_q) \phi \\
& + \left[1 - \left(\frac{\xi}{2w} \sin \alpha \operatorname{sech}(s) + \frac{E}{\Delta} \right)^2 \right] \phi = 0.
\end{aligned} \tag{5.43}$$

On constate que pour $\alpha = \frac{\pi}{2}$ on retrouve l'équation obtenue pour un skyrmion en paroi de domaine. C'est dû au fait que dans le cas d'un skyrmion le minimum de potentiel se trouve forcément au point où $\partial_y \theta$ est maximum. On se retrouve donc toujours dans une situation analogue à celle où la paroi de domaine est orthogonale à l'axe Oy .

On assume, puisque le système est invariant par translation selon q , que la fonction d'onde est séparable, et que la composante qui dépend de q est là encore une onde plane. On fait alors la transformation

$$\phi = e^{-ik \cotan(\alpha)s} e^{-ikq} \tilde{\phi}(s) \tag{5.44}$$

pour obtenir

$$\begin{aligned}
& -\frac{\xi^2}{w^2} \sin^2 \alpha \tilde{\phi}'' - \frac{1}{2} \frac{\xi^3}{w^3} \frac{\sin^3 \alpha \tanh(s) \operatorname{sech}(s)}{1 + \frac{\xi}{2w} \sin \alpha \operatorname{sech}(s) + \frac{E}{\Delta}} \tilde{\phi}' \\
& + \left[1 - \left(\frac{\xi}{2w} \sin \alpha \operatorname{sech}(s) + \frac{E}{\Delta} \right)^2 \right] \tilde{\phi} = 0.
\end{aligned} \tag{5.45}$$

On remarque maintenant que si on renormalise l'épaisseur de paroi comme $w = \tilde{w} \sin \alpha$ on obtient une équation analogue au cas $\alpha = \frac{\pi}{2}$, correspondant à un skyrmion en paroi de domaine. On aura donc les mêmes solutions numériques que dans le cas d'un skyrmion, mais avec une échelle de longueur $\xi \sin \alpha$ et non plus ξ .

On a des images physiques similaires dans les cas d'une paroi de domaine rectiligne et d'un skyrmion de paroi de domaine. La différence majeure se trouve dans le fait que cette fois la densité d'état des bandes attachées aux énergies propres du degré de liberté lent n'est plus

$$\nu^s \simeq \frac{1}{\hbar \omega_x} \tag{5.46}$$

mais la densité d'état d'un électron libre à une dimension.

Toutes les considérations de ce chapitre nous ont permis de se faire une idée claire de la structure énergétique des états liés pour un profil réaliste en paroi de domaine. On se tourne maintenant vers les conséquences que vont avoir ces états liés sur le coût énergétique effectif total d'un skyrmion antiferromagnétique.

6

Coût énergétique total d'un skyrmion

Ce chapitre se concentre sur l'une des conséquences les plus dramatiques de l'existence d'états liés électron-skyrmion, à savoir l'implication d'un coût énergétique effectif associé au skyrmion, à cause de l'occupation d'états électronique ayant un coût énergétique supérieur à la situation sans skyrmion. On traitera ainsi le cas d'un skyrmion ayant un profil de Belavin-polyakov, avant de se pencher sur le cas d'un skyrmion en paroi de domaine. On terminera par le cas d'une paroi de domaine rectiligne, dont le traitement révèle que l'existence d'états liés électron-paroi de domaine aura des conséquences dramatiques sur la transition de phase uniforme vers phase spirale.

Contenu du chapitre

| | | |
|------------|---|------------|
| 6.1 | Position du problème | 89 |
| 6.2 | Coût énergétique d'un skyrmion de Belavin-Polyakov | 91 |
| 6.2.1 | Limite harmonique | 91 |
| 6.2.2 | États quasi classiques | 93 |
| 6.2.3 | Avant la zone de croisement | 94 |
| 6.2.4 | Région de croisement | 95 |
| 6.2.5 | Aux petits rayons | 97 |
| 6.3 | Coût énergétique d'un skyrmion en paroi de domaine | 98 |
| 6.3.1 | Régime harmonique | 98 |
| 6.3.2 | Pour $w \gtrsim \xi$ | 99 |
| 6.3.3 | Région $w \leq \xi$ | 100 |
| 6.4 | Coût énergétique d'une paroi de domaine | 101 |
| 6.4.1 | Régime harmonique | 101 |
| 6.4.2 | En dehors du régime harmonique | 103 |
| 6.A | Calcul du coût énergétique des états liés quasi-classiques | 104 |

6.1 Position du problème

On a pu voir lors des traitements de deux profils de skyrmion différents que la présence d'un skyrmion produit la formation d'états liés. L'occupation de ces états liés, issus de la bande de valence et de la bande de conduction, va provoquer une différence d'énergie entre les cas avec et sans skyrmion. On veut dans ce chapitre estimer le coût énergétique d'un skyrmion lorsqu'il se forme dans un matériau à demi rempli, c'est à dire un matériau pour le quel chaque site atomique fournit un unique électron, ne remplissant ainsi que la bande de valence. Pour estimer ce coût il va falloir d'une part considérer les états liés produits par le skyrmion, mais aussi les états de Bloch appartenant à la bande de valence, trop faiblement perturbés pour se lier au skyrmion.

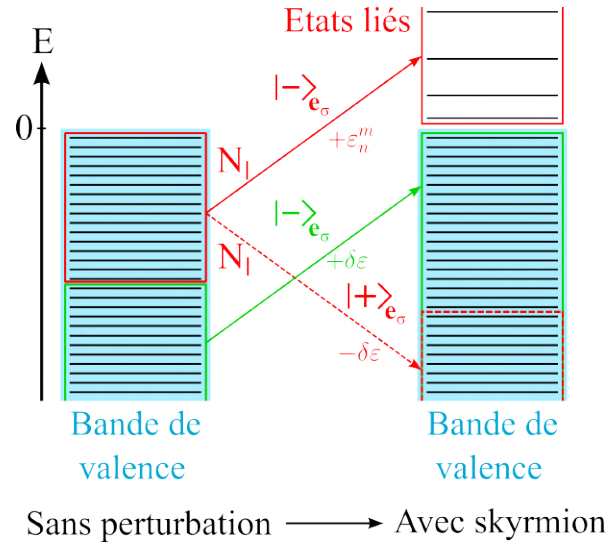
On définit le coût énergétique d'un skyrmion, comme la somme des énergies des états électroniques occupés, comptées relativement au cas où il n'y a pas de skyrmion. Cela se traduit mathématiquement comme

$$E_T = \sum_i \underbrace{(E_i^v)^{\text{Bloch}} + (E_i^v)^{\text{liés}}}_{\text{avec skyrmion}} - \underbrace{(E_i^v)^{\text{Bloch}}}_{\text{sans skyrmion}}, \quad (6.1)$$

la somme se faisant uniquement sur les états occupés. Pour calculer cette somme il faut donc d'une part calculer la somme des énergies associées aux états liés, et d'autre part estimer l'impact du skyrmion sur les états internes de la bande de valence.

Commençons par essayer de comprendre comment les énergies des états faiblement perturbés, qui demeurent dans la bande de valence, vont être modifiées par la présence d'un skyrmion. On considère un des quatre bassins de validité Σ_i du développement quadratique en impulsion (2.30). Cette vallée abrite un nombre N d'états électroniques,

parmi lesquels il existe un nombre N_l d'états polarisés $|-\rangle_{e_\sigma}$ qui subissent une perturbation suffisamment intense pour qu'ils se transforment en états liés. On a vu dans le chapitre 2 que les états appartenant à la bande de valence étaient dégénérés en polarisation. Les états de Bloch n'ayant donc pas de polarisation privilégiée, il existe en contrepartie N_l états polarisés $|+\rangle_{e_\sigma}$ qui vont eux sentir une répulsion de la part du skyrmion, et ainsi voir leur énergie abaissée, signifiant qu'ils s'enfoncent dans la bande de valence. Si on ne considère que le terme de potentiel dominant, responsable de la formation des états liés, on peut estimer le décalage éner-



gétique subi par ces états comme valant

$$\delta\varepsilon_i \sim v \int d^2r A_y^{\parallel} |u_i|^2 \sim v \int d^2r A_y^{\parallel} |u_0|^2 \quad (6.2)$$

avec $u_0 \sim \frac{1}{L}$ la fonction de Bloch associé à l'état dont l'énergie correspond au maximum de la bande de valence¹. L correspond à la taille caractéristique du système. On a utilisé ici le fait que seul un nombre microscopique N_l d'états est considéré. On peut donc supposer que tous ces états, situés très proches du maximum de la bande de valence, sont décrits par des fonctions de Bloch similaires. Cette approximation est analogue à celle faite dans le cadre de la démonstration du théorème de bande rigide [36]. On a ainsi en première approximation un unique décalage d'énergie

$$\delta\varepsilon = \Delta \frac{\xi}{L^2 R} R^2 \int_0^{L/R} \frac{z}{1+z^2} dz \simeq \Delta \frac{\xi}{L} \frac{R}{L} \ln \frac{L}{R}, \quad (6.3)$$

qui est donc infinitésimal dans la limite thermodynamique $L \gg \xi, R$. Si on compare le coût énergétique des N_l états liés au coût des N_l états polarisés $|+\rangle_{\mathbf{e}_\sigma}$ qui s'enfoncent dans la bande de valence, on constate donc que ce dernier est négligeable. Le nombre d'états de part et d'autre est en effet identique, tandis que le coût énergétique d'un état de Bloch est négligeable devant celui d'un état lié.

Il faut maintenant considérer les $N - 2N_l$ états restants, parmi lesquels les états liés polarisés $|-\rangle_{\mathbf{e}_\sigma}$ ne sont pas assez perturbés pour devenir des états liés, mais subissent simplement un décalage de leur énergie similaire à celui (6.3) des états polarisés $|+\rangle_{\mathbf{e}_\sigma}$, mais de signe opposé. Ces états, puisque dégénérés selon les deux polarisations dans le cas non perturbé, vont donc subir des perturbations opposées qui vont par conséquent se compenser. On pourra ainsi négliger leur contribution énergétique. On voit donc finalement que dans la limite thermodynamique $L \gg \xi, R$ le gain d'énergie associé aux états intra-bande est négligeable devant le coût énergétique dû aux états liés. Le coût énergétique total d'un skyrmion se résume ainsi à une somme sur les états liés occupés

$$E_T \simeq \sum_i E_i^{\text{liés}} \quad (6.4)$$

les états occupés étant ceux issus de la bande de valence.

Interactions électron-électron

Cette discussion est l'occasion d'aborder l'effet des interactions électron-électron qui existent a priori entre les électrons occupant les états liés, ces derniers ayant a priori un fort recouvrement. On peut donc s'attendre à ce que l'occupation des premiers états liés entraîne un coût supplémentaire à payer pour chaque état lié additionnel que l'on souhaiterait peupler. On peut cependant noter que, comme mentionné ci dessus, les

1. L'impulsion de cet état correspond à la coordonnée dans la zone de Brillouin du point Σ_i considéré.

états de Bloch de la bande de valence ayant la polarisation $|+\rangle_{\mathbf{e}_\sigma}$ sentent quant à eux un potentiel répulsif d'amplitude vA_y^{\parallel} , localisé sur le skyrmion, qui va avoir pour effet de chasser les électrons concernés du cœur du skyrmion. Autrement dit on s'attend, si on ne regarde que les états de Bloch appartenant à la bande de valence, à avoir une densité de charge plus faible au cœur du skyrmion. Il est ainsi naturel de penser qu'en première approximation la surdensité de charge due aux états liés va être compensée par la déplétion locale de charges associée aux états de Bloch de polarisation $|+\rangle_{\mathbf{e}_\sigma}$. Dans cette situation il n'y aura pas de modification de la densité de charge due au skyrmion, et pas de coût énergétique dû aux interactions électron-électron associé au remplissage des états liés.

Cette discussion n'est cependant valable que pour les états liés issus de la bande de valence, les états de Bloch de polarisation complémentaire étant occupés. Ce n'est pas le cas si on discute le remplissage des états liés issus de la bande de conduction en considérant par exemple le cas d'un matériau dopé. Dans ce cas il est probable que le nombre d'états liés issu de la bande de conduction soit limité par les interactions électron-électron. En effet pour le n ième état lié, si le gain d'énergie ε_n dû à l'interaction avec le skyrmion est plus faible que le coût de l'interaction répulsive avec les $n - 1$ électrons occupant les états liés de plus basse énergie, alors il est vraisemblable que cet état lié soit détruit par les interactions coulombiennes, limitant le nombre effectif d'états liés à $n - 1$. Une étude précise des interactions électroniques dans le contexte de l'interaction avec un skyrmion n'est pas l'objet de ce manuscrit, et est donc laissée de côté en vue d'une étude future. On considérera pour la suite du chapitre que la structure énergétique obtenue pour les états liés dans le contexte des profils de Belavin-Polyakov et en paroi de domaine est donc valable, au moins pour les états liés issus de la bande de valence lorsque la bande de valence est complètement remplie.

On se propose maintenant de calculer le coût énergétique dû aux états liés pour les deux profils étudiés jusque là.

6.2 Coût énergétique d'un skyrmion de Belavin-Polyakov

6.2.1 Limite harmonique

On a obtenu dans le chapitre 3 une expression analytique pour les niveaux de plus haute énergie issus de la bande de valence. Les états de plus basse énergie n'ont plus de structure harmonique, mais ont plutôt une structure quasi classique. On se propose de traiter la contribution de ces deux types d'états successivement. En comptant à partir du maximum de la bande de valence, on peut écrire les niveaux d'énergie harmoniques comme

$$\varepsilon_m^n = \varepsilon_0 - \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_x - \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_y, \quad (6.5)$$

où

$$\varepsilon_0 = \Delta \frac{\xi}{R}, \quad \hbar\omega_x \simeq \Delta\sqrt{2\varepsilon} \left(\frac{\xi}{R}\right)^{3/2} \quad \text{et} \quad \hbar\omega_y = \sqrt{2}\Delta \left(\frac{\xi}{R}\right)^{3/2}. \quad (6.6)$$

Suivant ces notations le coût énergétique total d'un skyrmion dû aux états harmoniques s'écrit comme

$$E_T = \sum_{m,n} \varepsilon_n^m = \sum_n \sum_{m=0}^{N_n} \left(\varepsilon_n^0 - \left(\frac{1}{2} + m\right) \hbar\omega_x \right) \quad (6.7)$$

avec $N_n \simeq \frac{\varepsilon_n^0}{\hbar\omega_x}$. Cela mène à

$$\begin{aligned} E_T &= \sum_n N_n \left(\varepsilon_n^0 - \left(\frac{1}{2} + \frac{N_n}{2}\right) \hbar\omega_x \right) \\ &\simeq \frac{1}{2\hbar\omega_x} \sum_n (\varepsilon_n^0)^2 \\ &\simeq \frac{1}{2\hbar\omega_x} \sum_n (\varepsilon_0 - n\hbar\omega_y)^2 \end{aligned} \quad (6.8)$$

La somme sur n se fait sur le nombre de bandes d'états liés qui vaut grossièrement $N_y = \varepsilon_0/\hbar\omega_y$. On utilise que

$$\sum_{n=0}^N n^2 = \frac{N}{6} + \frac{N^2}{2} + \frac{N^3}{3} \quad (6.9)$$

pour finalement obtenir que

$$\begin{aligned} E_T &\simeq \frac{1}{2\hbar\omega_x} \left[N_y \varepsilon_0^2 - 2\varepsilon_0 \frac{N_y^2}{2} \hbar\omega_y + \frac{N_y^3}{3} \hbar^2 \omega_y^2 + \mathcal{O}((\varepsilon_0)^2) \right] \\ &\simeq \frac{\varepsilon_0^3}{6\hbar^2 \omega_x \omega_y}. \end{aligned} \quad (6.10)$$

On peut alors utiliser les expressions (6.6) pour en déduire que le ratio ci dessus ne dépend pas du rayon, on a ainsi

$$\lim_{R \rightarrow \infty} E_T(R) = E_0, \quad (6.11)$$

avec $E_0 \equiv \frac{\Delta}{12\sqrt{\varepsilon}}$ l'échelle d'énergie naturelle pour E_T (avec toujours $\varepsilon = \frac{m_y a}{m_x \xi}$). On voit ici que, contrairement à ce que pourrait laisser penser une première intuition, cette énergie est indépendante du rayon. On peut de plus noter que l'énergie obtenue ici correspond à une borne inférieure pour le coût énergétique total dû aux états liés, puisqu'en considérant la structure énergétique comme étant harmonique on surestime l'écart entre les niveaux d'énergie associés aux états liés. Le résultat (6.11) donne donc l'ordre de grandeur du coût énergétique d'un skyrmion pour les grands rayons en fournissant une valeur minimum pour cette énergie.

On se tourne maintenant vers l'étude de la contribution des états quasi-classiques.

6.2.2 États quasi classiques

Tâchons de prendre en compte les états quasiclassiques pour $R \gg \xi$, afin de voir si ils impactent ou non le coût énergétique total d'un skyrmion. Commençons par raisonner à une dimension pour plus de simplicité. Les états quasi-classiques sont tels que le nombre n de zéros de la fonction d'onde, constituant un bon nombre quantique, correspond à la moitié du nombre de longueurs d'onde de la fonction d'onde contenue dans la région de l'espace accessible classiquement. Cette région est constituée par le domaine pour lequel l'énergie de l'état considéré est supérieure à l'énergie potentielle,

$$E_n \geq U(x). \quad (6.12)$$

Dans cette situation on peut ainsi obtenir la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld[39]

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \oint p(x) dx = \frac{1}{2} + n \quad (6.13)$$

avec $p(x)$ l'impulsion classique définie comme

$$p(x) = \sqrt{2m(U(x) - E_n)}. \quad (6.14)$$

L'intégrale se fait sur un aller-retour de la particule, qui va d'un point d'arrêt x_c tel que $U(x_c) = E_n$ jusqu'au second point d'arrêt, avant de revenir au point de départ.

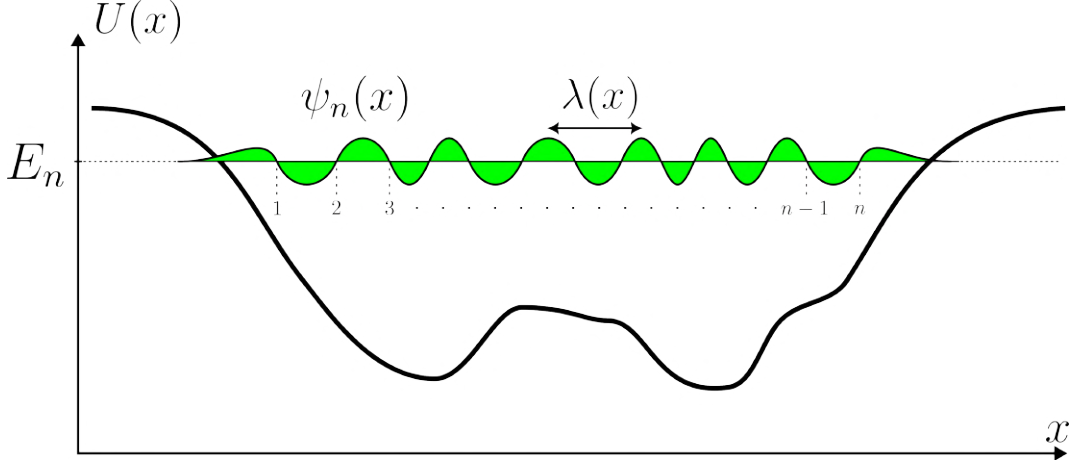


FIGURE 6.1 – Représentation schématique d'un état quasi-classique pour un potentiel quelconque unidimensionnel $U(x)$. Le nombre n de zéros de la fonction d'onde $\psi_n(x)$ peut être relié au nombre de longueurs d'onde contenues dans la largeur du potentiel, en demandant que la particule interfère constructivement avec elle même après s'être réfléchi sur les deux parois du puits de potentiel. Cela amène à la relation de quantification de Bohr-Sommerfeld (6.13).

Cette règle de quantification peut être comprise classiquement de la même manière que l'apparition de fréquences de résonance pour une cavité optique. Les seuls états

permis sont ceux pour lesquelles l'onde capturée dans la cavité interfère constructivement avec elle même après un aller-retour complet au sein de la cavité. Cette situation est schématisée sur la figure 6.1. On aura ainsi pour une cavité idéale correspondant à un puits de potentiel carré de taille L ,

$$\frac{2L}{\lambda} = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint p = n \quad (6.15)$$

avec $p = 2\pi\frac{\hbar}{\lambda}$ l'impulsion de de Broglie associée à la particule considérée. Le terme additionnel $\frac{1}{2}$ peut être interprété comme étant dû à un déphasage produit par la réflexion de l'onde sur les parois de la cavité. La relation exacte (6.13) peut être obtenue rigoureusement en déterminant la fonction d'onde de la particule dans le puits, et en jointant cette dernière à la fonction d'onde d'une onde evanescente au niveau du point de réflexion (ou point de retour) de la particule [39].

Dans le cas présent on est à deux dimensions, mais la physique reste la même. On va notamment pouvoir se rattacher au cas unidimensionnel en considérant à nouveau le modèle jouet isotrope discuté à la section 3.3.1. Le traitement qui suit a pour but de déterminer les énergies des états quasi classiques, avant de sommer ces dernières pour en déduire l'ordre de grandeur de leur contribution au coût énergétique effectif d'un skyrmion E_T . Ce traitement, bien que ne présentant pas de difficultés techniques particulière, est long et fastidieux, c'est pourquoi il est présenté dans l'appendice 6.A. Ce calcul conduit à la structure

$$\varepsilon_n^l \sim -\Delta \frac{\xi}{R} \left(1 - \frac{l^2}{L^2}\right) \exp \left[-\frac{\pi n}{2\sqrt{L^2 - l^2}} \right]. \quad (6.16)$$

pour les états quasi classiques, avec n le nombre de zéros radiaux de la fonction d'onde, l le moment cinétique de l'état associé, et $L = \sqrt{\frac{2R}{\sqrt{\varepsilon\xi}}}$ la valeur maximale du moment cinétique d'un état lié. La sommation de ces niveaux d'énergie montre que le coût énergétique des états liés quasi-classiques est lui aussi constant à grands rayons, et de l'ordre de l'énergie caractéristique E_0 .

On va maintenant s'intéresser à la région intermédiaire dans laquelle la structure énergétique des états lié devient plus complexe.

6.2.3 Avant la zone de croisement

On s'intéresse maintenant à la région intermédiaire $R \geq R^*$, où la structure énergétique des états liés demeure similaire à la région asymptotique $R \gg \xi$, bien que l'expression analytique des niveaux d'énergie ne soit plus connue. On va utiliser les résultats du chapitre 4 pour estimer le coût énergétique associé à cette région. On considère ainsi les niveaux d'énergie associés au degré de liberté lent x comme harmoniques, avec une unique fréquence de transition ω_x dépendant seulement du rayon R .

On a ainsi, en utilisant le résultat intermédiaire (6.8) que

$$E_T \sim \frac{1}{2\hbar\omega_x} \sum_n (\varepsilon_0^n)^2. \quad (6.17)$$

L'expression des énergies $\varepsilon_n^0(R)$ liées au degré de liberté rapide y n'est pas connue analytiquement, mais peut être obtenue numériquement. On peut noter ici que l'expression de la fréquence ω_x du degré de liberté lent amène à tracer numériquement

$$\frac{E_T(R)}{E_0} = 3\sqrt{2} \left(\frac{R}{\xi}\right)^{3/2} \left(1 + \frac{\xi}{2R}\right)^{-1/2} \sum_n \left(\frac{\varepsilon_0^n}{\Delta}\right)^2 \quad (6.18)$$

avec E_0 l'unité naturelle d'énergie introduite par la fréquence ω_x . Cela permet ainsi d'obtenir le comportement général de $E_T(R)$ dans la région $R \geq R^*$. On a tracé le résultat en orange sur la figure 6.2. On observe que pour $R \gg \xi$, $E(R)$ semble constant, environ égal à

$$\lim_{R \rightarrow \infty} E_T(R) \simeq 1.34 E_0, \quad (6.19)$$

en accord avec le résultat obtenu à l'aide de l'approximation harmonique. On rappelle que cette dernière ne permettait que de fournir une borne inférieure pour E_T , qui est donc en bon accord avec le résultat présent. L'impact des états quasi-classiques dans cette région n'a quant à lui aucune raison d'être qualitativement différent. On peut noter que l'échelle d'énergie naturelle qui émerge, E_0 , grande devant Δ , est induite par le caractère lent du degré de liberté x dans la limite $R \gg \bar{R}$.

On se tourne maintenant vers la région $R \leq R^*$ pour laquelle le gap d'énergie est rempli d'états liés.

6.2.4 Région de croisement

On traite maintenant la région intermédiaire $R_c \leq R \leq R^*$. On rappelle que R^* est l'abscisse du point de croisement entre les états fondamentaux issus de la bande de valence et de conduction, observé en utilisant seulement les termes dominants du hamiltonien. R_c est quant à lui le rayon pour lequel l'écart entre les niveaux d'énergie devient comparable à Δ . Dans cette région les états issus de la bande de valence se mélangent avec ceux issus de la bande de conduction, produisant de nombreux croisements finalement évités, conduisant à l'image physique décrite dans la figure 4.4.

Ici on cherche seulement à calculer le coût énergétique associé à ces niveaux. On va donc se contenter pour se faire d'une schématisation plus simple, où on ignore la structure précise des niveaux d'énergies, représentée sur la figure 6.3. On considère que les niveaux remplis sont ceux dont l'énergie est inférieure ou égale à l'énergie de milieu de gap, correspondant toujours au cas d'un matériau demi-rempli. On fait ici l'approximation que chaque niveau d'énergie $\varepsilon_n^{c,v}$ indexé par le nombre n de zéros de la fonction d'onde selon le degré de liberté rapide y est associé à une collection de sous

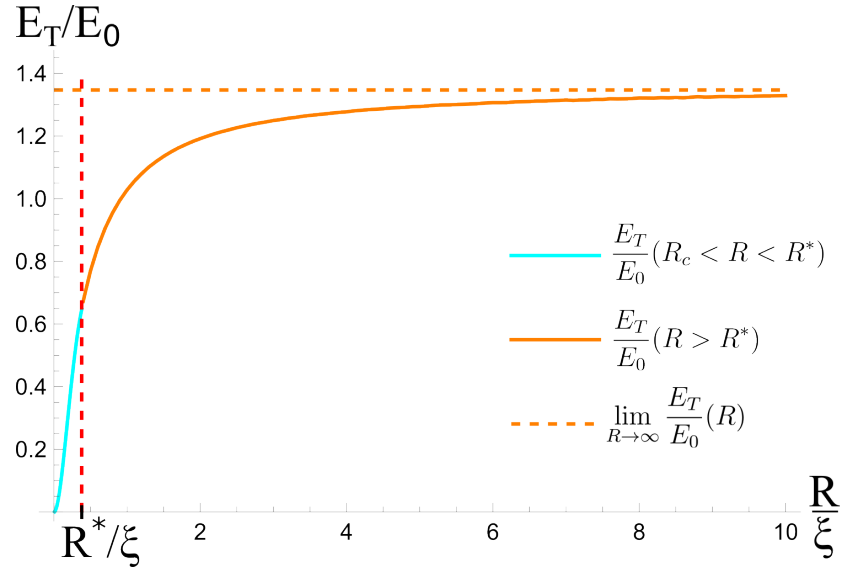


FIGURE 6.2 – Tracé numérique du coût énergétique total $E_T(R)$ d'un skyrmion dû aux états liés, en unité de $E_0 = \frac{\Delta}{12\sqrt{\epsilon}}$. On a tracé en orange le résultat obtenu pour la région $R \geq R^*$, correspondant à une estimation numérique de la somme (6.17). On a tracé en bleu le résultat associé à l'expression (6.21), valable pour $R_c < R < R^*$.

niveaux successivement séparés d'une fréquence constante ω_x . Ces niveaux forment alors des "bandes" d'énergies associées à une densité d'état

$$\nu(R) = \frac{1}{\hbar\omega_x} = \frac{3\sqrt{2} E_0}{2 \Delta^2} \left(\frac{R}{\xi}\right)^{3/2} \left(1 + \frac{\xi}{2R}\right)^{-1/2}. \quad (6.20)$$

On regarde maintenant quelles sont les "bandes" d'énergie $\varepsilon_n^{c,v}$ remplies. Puisque le rayon pour lequel la bande ε_2^v disparaît dans la bande de valence est plus grand que R^* , la seule bande totalement remplie est la bande ε_1^v . Les bandes ε_0^v et ε_0^c ne sont remplies que jusqu'au seuil $\varepsilon_0^{v,c} = \Delta$ (en comptant à partir du maximum de la bande de valence). on a ainsi

$$\begin{aligned} E_T &\simeq \frac{\nu}{2} (\varepsilon_0^1)^2 + \nu \int_0^\Delta \varepsilon d\varepsilon + \nu \int_{2\Delta - \varepsilon_0^0}^\Delta \varepsilon d\varepsilon \\ &= \frac{\nu}{2} (\varepsilon_0^1)^2 + \nu \Delta^2 \left(-1 + 2 \frac{\varepsilon_0^0}{\Delta} - \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_0^0}{\Delta}\right)^2 \right). \end{aligned} \quad (6.21)$$

On a tracé en bleu sur la figure 6.2 le résultat obtenu après calcul numérique des énergies ε_0^0 et ε_1^0 . On observe que l'énergie totale E_T semble tendre vers zéro aux petits rayons, et que le résultat concorde avec le tracé précédent en $R = R^*$.

On rappelle que ce résultat n'a de sens que dans la limite $R \gg R_c$ où l'approximation harmonique pour le degré de liberté lent garde un sens.

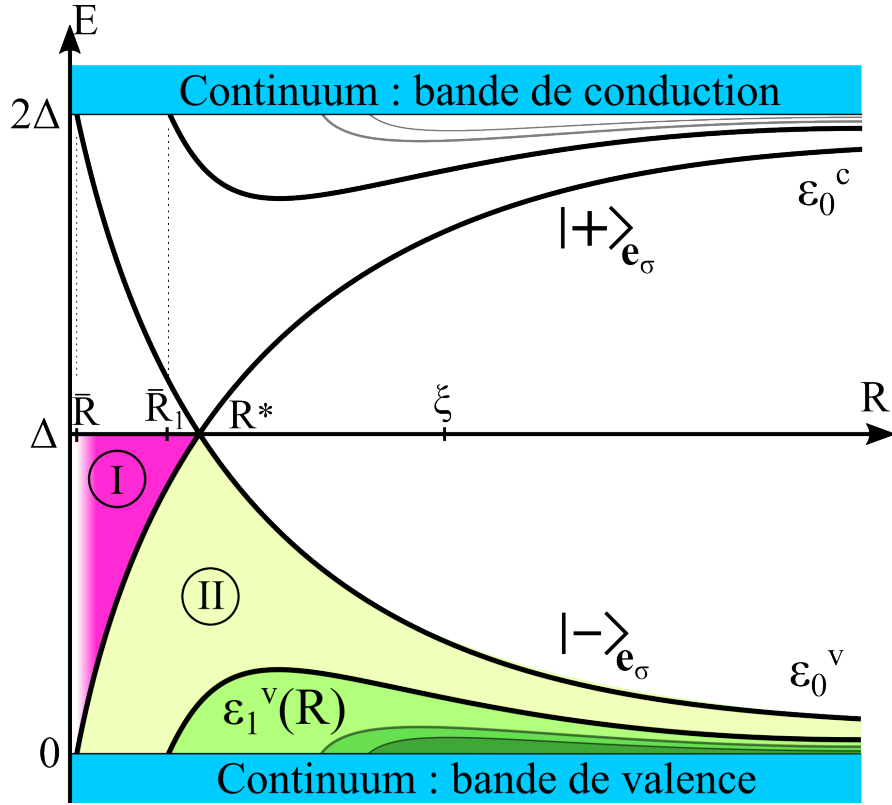


FIGURE 6.3 – Représentation schématique des états occupés pour un matériau où la moitié des états électroniques sont remplis. On a représenté les bandes remplies en couleur, afin d’illustrer la présence de sous niveaux occupés. La région **II** contient des états séparés par la fréquence caractéristique ω_x . Dans la région **I** les deux bandes d’énergie ε_0^v et ε_0^c se chevauchent, impliquant une densité d’état valant approximativement $2\omega_x^{-1}$. Le rayon critique R_c n’est pas représenté, car ce dernier est extrêmement proche de zéro relativement à la longueur de cohérence ξ , il est ainsi confondu avec \bar{R} .

6.2.5 Aux petits rayons

On peut ajouter aux résultats ci dessus le fait que pour $R \sim R_c$ où $\hbar\omega_x \sim \delta \sim \Delta$, il n’y aura que quelques états liés occupés, impliquant un coût énergétique E_T de l’ordre de Δ . Pour un rayon R tendant vers le rayon de disparition \bar{R} on doit ensuite avoir une disparition progressive des états liés, jusqu’à ce que pour $R < \bar{R}$ il n’y ait plus aucuns états liés. On aura donc à priori, pour $R < \bar{R}$ un coût énergétique nul² associé au skyrmion. Ces considérations amènent à conclure que le tracé pertinent pour le coût énergétique d’un skyrmion $E_T(R)$ est celui représenté schématiquement sur la figure 6.4.

On possède donc finalement une image satisfaisante de l’allure du coût énergétique

2. Il peut exister un coût énergétique non nul dû à l’effet du skyrmion sur les états de Bloch notamment mais il sera négligeable devant Δ , et donc encore plus devant E_0 .

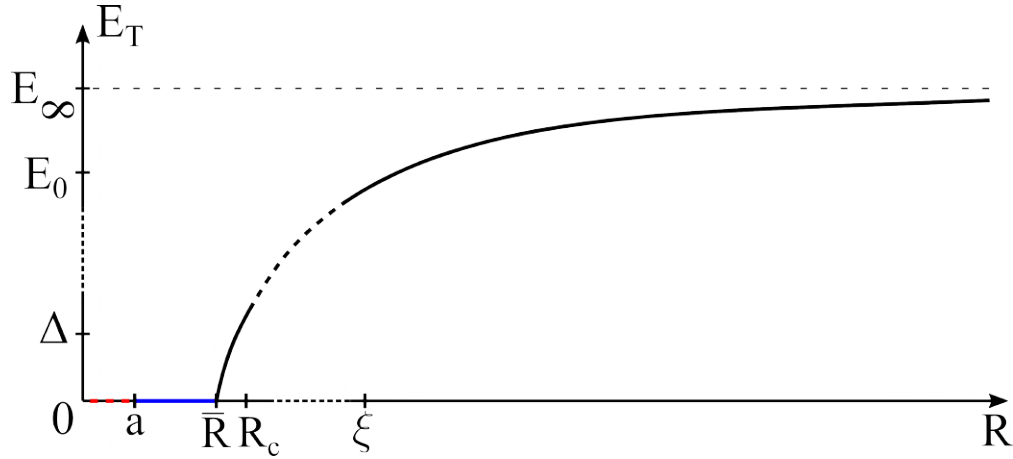


FIGURE 6.4 – Schématisation du coût énergétique total E_T d'un skyrmion. Pour $R \leq a$, le modèle continu n'est pas valable et on ne peut rien dire à priori. Pour $a \leq R \leq \bar{R}$ il semble naturel de stipuler que E_T soit nul puisqu'il n'y a pas d'état lié. Pour $\bar{R} \leq R \leq R_c$ il n'y a que quelques états liés, impliquant $E_T \sim \Delta$. Pour $R \geq R_c$ les calculs réalisés plus haut donnent une énergie qui croît jusqu'à une valeur limite de l'ordre de $E_0 = \frac{\Delta}{12\sqrt{\epsilon}}$. Les zones en pointillés sur les axes traduisent que le schéma n'est pas à l'échelle, en réalité $E_0 \gg \Delta$ et $\xi \gg R_c \gg \bar{R} \gg a$.

d'un skyrmion de Belavin-Polyakov. Ce coût énergétique possède une valeur asymptotique constante de l'ordre de $E_0 = \frac{\Delta}{12\sqrt{\epsilon}}$ aux grands rayons, et un coût nul au deçà du rayon critique \bar{R} .

On se tourne maintenant vers l'étude énergétique d'un skyrmion en paroi de domaine.

6.3 Coût énergétique d'un skyrmion en paroi de domaine

On veut maintenant établir le coût énergétique total de la formation d'un skyrmion en paroi de domaine. On se base sur les raisonnements et calculs effectués pour le profil de Belavin-Polyakov, la dérivation présente sera donc plus concise.

6.3.1 Régime harmonique

Dans le cas d'un skyrmion en paroi de domaine, on a aux grandes épaisseurs de domaine $w \gg \xi$ une structure harmonique 2D pour les états excités. Réitérons donc le même calcul que celui effectué pour le profil de Belavin-Polyakov, en se concentrant sur un des deux puits de potentiel effectifs générés par un skyrmion en paroi de domaine.

On a ici

$$\frac{\hbar\omega_y}{\Delta} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\xi}{w} \right)^{3/2} \quad \text{et} \quad \frac{\hbar\omega_x}{\Delta} = \frac{\xi}{R} \sqrt{\frac{\epsilon}{2} \frac{\xi}{w}}. \quad (6.22)$$

On en déduit donc, selon (6.10) que dans la limite harmonique

$$E_T \sim \frac{\varepsilon_0^3}{6\hbar^2\omega_x\omega_y} = \frac{E_0}{2} \frac{R}{w} \quad (6.23)$$

où on a noté, comme pour Belavin-Polyakov, $E_0 = \frac{\Delta}{12\sqrt{\epsilon}}$. On voit alors que contrairement au cas de Belavin-Polyakov, l'énergie semble diminuer aux grandes épaisseurs de paroi. On peut néanmoins noter que ce résultat n'est valable que pour $w \ll R$, et qu'il y a donc une valeur limite pour l'énergie qui dépend du rayon,

$$E_T \underset{w \rightarrow R}{\rightsquigarrow} \frac{E_0}{2}. \quad (6.24)$$

Puisque cela ne vaut que pour un des deux groupes d'états liés générés par un skyrmion en paroi de domaine, ce résultat doit être multiplié par deux, on voit alors que le coût asymptotique $R \rightarrow \infty$ d'un skyrmion en paroi de domaine est égal à celui d'un skyrmion de Belavin-Polyakov. On observe par ailleurs que le coût énergétique total semble proportionnel au rayon du skyrmion R . Regardons maintenant ce que l'on obtient lorsque l'épaisseur de paroi devient comparable à la longueur de cohérence.

6.3.2 Pour $w \gtrsim \xi$

On peut, dans la région $w \gtrsim \xi$, considérer que la structure harmonique est toujours valable pour le degré de liberté lent x et utiliser les résultats numériques pour les niveaux d'énergie associés au degré de liberté rapide y . On utilise alors la relation, toujours pour un des deux puits de potentiel générés par le skyrmion,

$$E_T \sim \frac{1}{2\hbar\omega_x} \sum_n (\varepsilon_0^n)^2 \quad (6.25)$$

mise sous la forme

$$\frac{E_T}{E_0} \sim 6\sqrt{2} \frac{R}{\xi} \sqrt{\frac{w}{\xi}} \sum_n \left(\frac{\varepsilon_0^n}{\Delta} \right)^2. \quad (6.26)$$

pour tracer numériquement l'énergie. Puisque en première approximation les fonctions ε_n^0 sont indépendantes du paramètre R , l'échelle d'énergie caractéristique est en réalité ici proportionnelle au rayon. On tracera ainsi

$$\frac{\xi}{R} \frac{E_T}{E_0} \quad (6.27)$$

en fonction de l'épaisseur de paroi x . Le résultat est donné sur la figure 6.5, on observe bien une décroissance en $\frac{1}{w}$ pour $w \geq \xi$ comme attendue avec le modèle harmonique.

6.3.3 Région $w \leq \xi$

On peut noter que puisqu'il n'y a pas de croisement évité entre les états fondamentaux issus des deux bandes dans le cas d'un skyrmion en paroi de domaine, la formule (6.26) tient toujours pour $w \leq \xi$. Le résultat numérique présenté sur la figure 6.5 est donc valable tant que la description harmonique du degré de liberté lent tient.

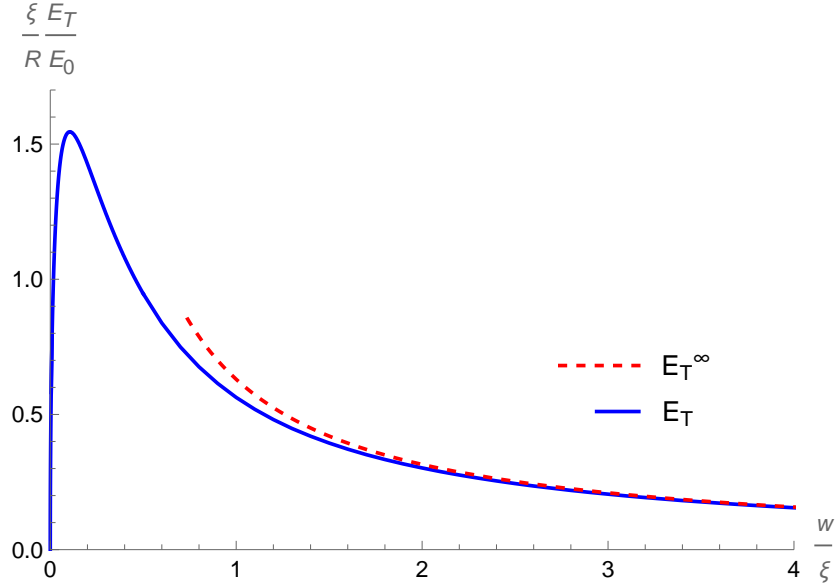


FIGURE 6.5 – Tracé de l'énergie totale en fonction de l'épaisseur de paroi w , en unité naturelle d'énergie, $\frac{R}{\xi} E_0$. Aux grandes épaisseur de paroi on observe bien un comportement en $1/w$ pour l'énergie totale, comme prédit dans la limite harmonique.

On peut noter que pour $w \ll \xi$ le niveau d'énergie ε_0^0 se comporte linéairement comme $\varepsilon_0^0 \simeq 3\Delta \frac{w}{\xi}$, tandis que de son côté $\varepsilon_1^0 \sim 1$. On en déduit que (en comptant depuis la bande de valence)

$$\frac{E_T}{E_0} \frac{\xi}{R} \underset{w \ll \xi}{\simeq} 2\sqrt{\frac{w}{\xi}}. \quad (6.28)$$

On observe donc que contrairement au cas du profil de Belavin-Polyakov il n'existe pas de paramètre critique \bar{w} pour lequel le coût énergétique E_T s'annule. Il semble de plus que l'énergie diminue linéairement avec le rayon de skyrmion, favorisant ainsi les petits skyrmions.

On rappelle qu'il existe un facteur 2 à prendre en compte pour E_T dans les tracés précédents, qui vient du fait que dans le cas d'un skyrmion en paroi de domaine on a non pas un mais deux puits de potentiels. On a donc deux "collections" d'états liés, qui vont toutes deux contribuer de la même manière au coût énergétique total d'un skyrmion. Cela ne change évidemment pas la structure qualitative de $E_T(R, w)$.

Le fait le plus surprenant ici est que E_T semble diverger lorsque le rayon du skyrmion diverge. Or on sait que dans le cadre de la transition de l'état uniforme vers l'état spiral[6] le rayon d'un skyrmion diverge [42]. Cela signifie que le mécanisme électronique présenté dans ce manuscrit pourrait prohiber cette transition de phase. Afin de confirmer ce résultat on se propose maintenant d'étudier le coût énergétique d'une paroi de domaine rectiligne. C'est en effet l'existence de cet objet en tant que structure stable qui définit la phase spirale. L'interaction avec des électrons modifiant le coût énergétique de cet objet, il pourrait ainsi devenir métastable, signifiant que la phase spirale n'est plus l'état fondamental du système. Dans ce cas la transition de phase uniforme vers spirale n'existerait plus à température nulle.

6.4 Coût énergétique d'une paroi de domaine

On se propose de suivre les mêmes étapes que celles suivies pour établir le coût énergétique d'un skyrmion, à savoir d'abord l'étude des états de faible énergie, avant de se tourner vers les états liés profonds.

6.4.1 Régime harmonique

On utilise les résultats de la section 5.4. On a montré que puisque la structure est invariante par translation le long de la paroi, les niveaux d'énergies sont indexés d'une part par le nombre de zéros n de la fonction d'onde le long de la direction transverse au mur, et d'autre part par le vecteur d'onde $\frac{k}{w}$ de l'onde plane se propageant le long du mur. On a ainsi

$$E_T = - \sum_n \int_0^{\varepsilon_0^n} \nu(\varepsilon) \varepsilon d\varepsilon \quad (6.29)$$

avec $\nu(\varepsilon)$ la densité d'état associée aux états délocalisés le long du mur. On peut la calculer en utilisant que le nombre d'états occupés s'écrit à une dimension comme

$$\Omega(k) = 2 \frac{k}{w} \frac{L}{2\pi} \quad (6.30)$$

avec L la longueur de la paroi. On en déduit, en utilisant

$$k = \sqrt{\frac{|\varepsilon_0^n| + \varepsilon_k^n}{A}} \quad (6.31)$$

avec

$$A = \left(\frac{1}{2m_q} - \frac{m_s}{8M^2} \right) \frac{\hbar^2}{w^2} = \frac{1}{m_x \sin^2 \alpha + m_y^* \cos^2 \alpha} \frac{\hbar^2}{2w^2}, \quad (6.32)$$

que

$$\nu(\varepsilon) = \frac{d\Omega(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{L}{2\pi w} \frac{1}{\sqrt{A}} \frac{1}{\sqrt{|\varepsilon_0^n| + \varepsilon}}. \quad (6.33)$$

En notant

$$B = \frac{L}{2\pi w} \frac{1}{\sqrt{A}} = \frac{L}{2\pi\hbar} \sqrt{2 \left(m_x \sin^2 \alpha + m_y^* \cos^2 \alpha \right)} \quad (6.34)$$

on déduit que

$$E_T = -B \sum_n \int_0^{\varepsilon_0^n} \frac{\varepsilon}{\sqrt{|\varepsilon_0^n| + \varepsilon}} d\varepsilon. \quad (6.35)$$

On peut alors faire le changement de variable $\chi = |\varepsilon_0^n| + \varepsilon$, menant à

$$\begin{aligned} E_T &= B \sum_n \int_0^{|\varepsilon_0^n|} \frac{\chi - \varepsilon_0^n}{\sqrt{\chi}} d\chi \\ &= \frac{4}{3} B \sum_n |\varepsilon_0^n|^{3/2}. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Dans le cadre de l'approximation harmonique, pour $\hbar\omega_s \ll \varepsilon_0^0$ cela mène à

$$E_T \simeq \frac{4}{3} B \sum_{n=0}^N \left(\varepsilon_0^0 - \hbar\omega_s n \right)^{3/2} \quad (6.37)$$

avec un nombre de bandes occupées valant

$$N \simeq \frac{\varepsilon_0^0}{\hbar\omega_s} = \sqrt{\sin \alpha \Delta \frac{m_s w \xi}{\hbar^2}}. \quad (6.38)$$

On en déduit l'expression du coût énergétique d'une paroi de domaine

$$\begin{aligned} E_T &\simeq \frac{4}{3} B \int_0^N \left(|\varepsilon_0^0| - \hbar\omega_s x \right)^{3/2} dx \\ &\simeq \frac{4}{3\hbar\omega_s} B \int_0^{|\varepsilon_0^0|} X^{3/2} dX \\ &\simeq \frac{4}{3\hbar\omega_s} B \frac{2}{5} |\varepsilon_0^0|^{5/2}, \end{aligned} \quad (6.39)$$

on utilise alors l'expression de B (6.34) pour obtenir

$$E_T \simeq \frac{32\sqrt{2}}{5\pi} E_0 \sin^2 \alpha \frac{L}{w} \sim E_0 \sin^2 \alpha \frac{L}{w}. \quad (6.40)$$

On voit ainsi que dans la limite thermodynamique le coût énergétique d'une paroi de domaine diverge. On peut noter que l'échelle caractéristique d'énergie est la même que celle obtenue pour un skyrmion en paroi de domaine, comme attendu puisqu'on est dans une situation analogue à celle d'un skyrmion en paroi de domaine dont le rayon diverge. Pour $\alpha = 0$ on a un coût énergétique nul comme prévu puisqu'alors le skyrmion n'impacte alors pas le potentiel vecteur.

6.4.2 En dehors du régime harmonique

On voit donc ici qu'on peut réutiliser les résultats obtenus pour un skyrmion en paroi de domaine, mais avec cette fois une densité d'état macroscopique. Puisqu'on a vu que dans le cas d'un skyrmion en paroi de domaine il n'existe pas d'épaisseur de paroi pour laquelle les états liés disparaissent, cela veut dire que le coût énergétique d'une paroi de domaine est toujours macroscopique. Cela signifie que pour un système macroscopique bidimensionnel de taille $L \times L$ l'apparition de parois de domaine est prohibée par le mécanisme ici présenté.

On peut cependant noter que dans le cas d'un matériau quasi unidimensionnel de dimensions $L \times l$, $L \gg l$, le mécanisme ici présenté va favoriser l'apparition de parois de domaine s'étalant le long de la petite dimension l .

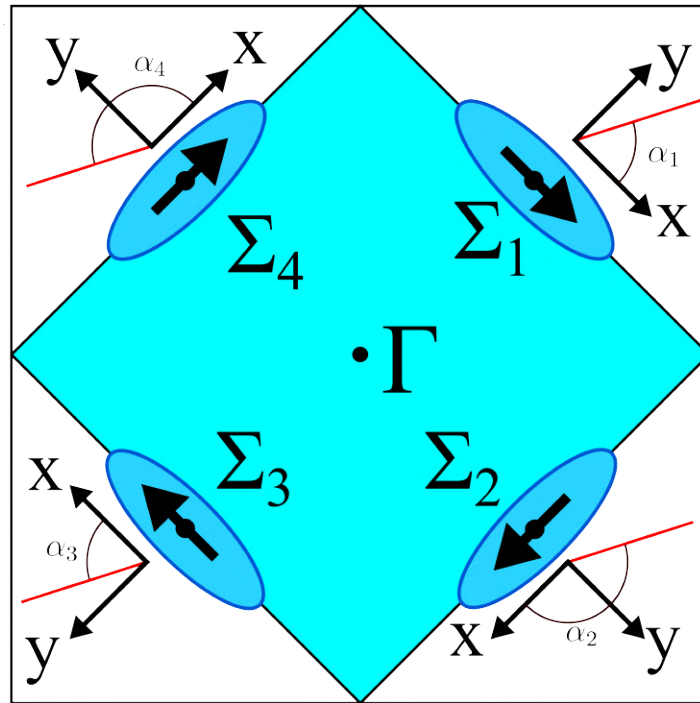


FIGURE 6.6 – Représentation des angles relatifs α_i formés entre l'axe de la paroi de domaine considérée, en rouge, et le système de coordonnées naturelles de la vallée Σ_i considérée. On voit que l'on a bien $\alpha_{i+1} = \alpha_i + \frac{\pi}{2}$, avec les angles α_i définis modulo π .

On vient de voir que le coût énergétique d'une paroi semble être nul pour l'orientation spécifique $\alpha = 0$. Pourtant, le réseau sous-jacent considéré étant carré, il n'y a aucune raison physique que le coût d'une paroi de domaine orientée selon $\alpha = \frac{\pi}{2}$ soit différent de celui d'une paroi orientée à $\alpha = 0$. Ce petit paradoxe est levé en se souvenant que les mêmes calculs et raisonnement peuvent être réalisés pour chacune des

quatre vallées Σ_i . L'orientation des axes x et y devra alors être redéfinie relativement à chaque vallée pour que les résultats puissent être transposés directement. On aura alors, en réindexant les points Σ_i dans le sens horaire, un angle réel α_{i+1} pour la vallée Σ_{i+1} correspondant à $\alpha_i + \frac{\pi}{2}$, comme représenté sur la figure 6.6. On voit alors qu'en considérant les quatre vallées ensemble, on aura une dépendance de E_T en α de la forme

$$E_T \propto \sin^2(\alpha) + \sin^2\left(\alpha + \frac{\pi}{2}\right) = 1, \quad (6.41)$$

il n'existe donc pas de dépendance réelle de E_T en α . Physiquement cela signifie qu'il n'y a pas de direction de paroi de domaine privilégiée par l'interaction avec les électrons de valence dans un matériau isotrope.

6.A Calcul du coût énergétique des états liés quasi-classiques

Cet appendice est dédié au calcul du coût énergétique des états liés ayant une structure quasi-classique. On se place pour effectuer ce calcul dans le cadre du modèle jouet isotrope discuté à la section 3.3.1. On rappelle que dans cette situation les valeurs propres l du moment cinétique constituent de bons nombres quantiques. On peut ainsi écrire l'équation de Schrödinger comme³

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \left(\frac{1}{z} \frac{d}{dz} \left(z \frac{d\psi_z^\dagger}{dz} \right) - \frac{l^2}{z^2} \psi_z^\dagger \right) - \Delta \frac{\xi}{R} \frac{\psi_z^\dagger}{1+z^2} = \varepsilon_l \psi_z^\dagger \quad (6.42)$$

avec $z = \frac{r}{R} = \frac{\sqrt{x^2+y^2}}{R}$. On peut alors transformer la fonction d'onde comme

$$\psi_z^\dagger = \frac{\phi(z)}{\sqrt{z}} \quad (6.43)$$

afin de s'affranchir de la dérivée première, menant à

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*R^2} \left[\frac{d^2\phi}{dz^2} - \frac{\phi}{z} - \frac{l^2}{z^2} \right] - \Delta \frac{\xi}{R} \frac{\phi}{1+z^2} = \varepsilon_l \phi. \quad (6.44)$$

Cette équation correspond à une particule 1d oscillant dans un potentiel effectif⁴

$$U_l(z) = \Delta \frac{\xi}{R} \left[-\frac{1}{1+z^2} + \sqrt{\epsilon} \frac{\xi}{2R} \left(\frac{l^2}{z^2} + \frac{1}{z} \right) \right]. \quad (6.45)$$

3. On a omis les termes faisant intervenir A_i^z qui sont négligeables dans la limite $R \gg \xi$. On a conservé le terme en l^2/z^2 qui sera lui important pour les grandes valeurs de l .

4. On fixe, tout comme on l'avait fait précédemment dans le cadre de la disparition des états liés, la masse effective comme $m^* = \sqrt{m_x^* m_y^*}$ afin de conserver la même densité d'états que dans le problème anisotrope original.

On peut noter que ce potentiel ne permet l'existence d'états liés que pour l inférieur à

$$L = \sqrt{\frac{2R}{\sqrt{\epsilon}\xi}} \gg 1. \quad (6.46)$$

Cela signifie simplement qu'il ne peut y avoir d'états liés ayant un moment cinétique supérieur à L . Dans cette situation on peut ainsi appliquer la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld sous la forme suivante

$$\frac{2R}{\pi\hbar} \int_{z_0}^{z_t} p(z) dz = \frac{1}{2} + n \quad (6.47)$$

avec l'impulsion $p(z)$ définie à partir du potentiel effectif $U_l(z)$. z_0 et z_t sont les deux points de retour, pour lesquels $U_l(z) = \varepsilon_l$. z_0 peut être approximé comme le point où le terme centrifuge compense la composante attractive du potentiel, empêchant la particule de s'approcher du centre du skyrmion. En réécrivant naturellement le potentiel comme

$$U_l(z) = \Delta \frac{\xi}{R} \left[-\frac{1}{1+z^2} + \frac{1}{L^2} \left(\frac{l^2}{z^2} + \frac{1}{z} \right) \right]. \quad (6.48)$$

on a ainsi

$$z_0^l = \frac{l}{L} \frac{1}{\sqrt{1-l^2/L^2}} \underset{l \ll L}{\sim} \frac{l}{L}. \quad (6.49)$$

On constate donc que pour $l < L$ on a $z_0^l < 1$. On peut noter que pour $l = 0$, la répulsion de l'électron sera due au terme en $1/z$, conduisant à $z_0^0 \simeq 1/L^2$. L'expression de l'autre point de retour s'obtient cette fois en regardant pour quelle valeur de z grande devant l'unité on vérifie

$$\Delta \frac{\xi}{R} \left[-\frac{1}{z_t^2} + \frac{1}{L^2} \left(\frac{l^2}{z_t^2} + \frac{1}{z_t} \right) \right] \simeq \varepsilon_l. \quad (6.50)$$

Pour $l \ll L$ c'est le terme répulsif en $\frac{1}{z}$ qui domine. On trouve alors

$$z_t \sim \frac{\Delta}{|\varepsilon_l|} \frac{\xi}{2R} \left(\sqrt{4 \frac{|\varepsilon_l| R}{\Delta \xi} + \frac{1}{L^4}} - \frac{1}{L^2} \right) \quad (6.51)$$

ce qui implique notamment qu'on a bien $z_t \gg 1$. Pour les premiers niveaux, les plus profonds, on peut considérer que le terme répulsif, uniquement ressenti à longue portée, va peu jouer. On peut alors utiliser le fait que le potentiel attractif a une extension finie pour ε_l non nulle pour obtenir

$$z_t \simeq \sqrt{\frac{\Delta \xi}{|\varepsilon_l| R}}. \quad (6.52)$$

Pour les niveaux les plus hauts tels que

$$4 \frac{|\varepsilon_l| R}{\Delta \xi} \ll \frac{1}{L^4}, \quad (6.53)$$

peu importe leur énergie, le point de retour pourra être approximé comme celui où le potentiel cesse d'être attractif. On aura alors

$$z_t \simeq L^2. \quad (6.54)$$

Pour de plus grandes valeurs du moment cinétique $l \lesssim L$ le terme répulsif dominant sera celui en $\frac{l^2}{z^2}$. On aura donc cette fois

$$z_t \simeq \sqrt{\frac{\Delta}{|\varepsilon_l|} \frac{\xi}{R}} \sqrt{1 - \frac{l^2}{L^2}}. \quad (6.55)$$

On va maintenant calculer l'intégrale de l'impulsion (6.47) dans les différentes limites que l'on vient d'identifier.

Pour $l \ll L$ et ε_l^n satisfaisant la condition (6.53) on a

$$\int_{z_0}^{z_t} p(z) dz \simeq \sqrt{2m^*} \int_{z_0}^{z_t} dz \sqrt{\varepsilon - \Delta \frac{\xi}{R} \left[-\frac{1}{1+z^2} + \frac{1}{z_t z} \right]}, \quad (6.56)$$

on considère alors que le terme répulsif ne fait, en première approximation, que déterminer le domaine d'intégration. On développe ensuite la racine au premier ordre en considérant l'énergie comme étant petite devant la profondeur du potentiel. On obtient ainsi

$$\begin{aligned} \int_{z_0}^{z_t} p(z) dz &\sim \sqrt{2m^* \Delta \frac{\xi}{R}} \left(\int_0^{z_t} dz \frac{1}{\sqrt{1+z^2}} - \frac{1}{2} \int_0^{z_t} dz \frac{R|\varepsilon|}{\xi \Delta} \sqrt{(1+z^2)} \right) \\ &\sim \sqrt{2m^* \Delta \frac{\xi}{R}} \left(\ln 2z_t - \frac{R|\varepsilon| z_t^2}{\xi \Delta 4} \right). \end{aligned} \quad (6.57)$$

On utilise maintenant la règle de quantification (6.47) en considérant n grand pour obtenir

$$\frac{2}{\pi} L \left[\ln(2L^2) - \left(\frac{R}{\xi} \right)^3 \frac{1}{\epsilon \Delta} \right] = n \quad (6.58)$$

ou

$$\frac{\varepsilon_n}{\Delta} = -\epsilon \left(\frac{\xi}{R} \right)^3 \left[\ln 2L^2 - \frac{\pi}{2L} n \right]. \quad (6.59)$$

On voit alors que le terme répulsif en $\frac{1}{z}$ limite le nombre d'états quasi classiques en majorant le nombre de zéro (radiaux) de la fonction d'onde n par

$$N = \frac{2}{\pi} L \ln 2L^2 \gg 1. \quad (6.60)$$

On regarde maintenant le cas pour lequel on a toujours $l \ll L$ mais où cette fois n est plus petit, tel que la condition (6.53) ne soit plus satisfaite. Puisque dans ce cas les termes répulsifs sont négligés, on peut écrire l'impulsion comme

$$p^2(z) = 2m^* |\varepsilon| \frac{z_t^2 - z^2}{1+z^2}. \quad (6.61)$$

On a alors

$$\begin{aligned}
\int_0^{z_t} p(z) dz &\simeq \sqrt{2m^*|\varepsilon|} \int_0^{z_t} dz \sqrt{\frac{z_t^2 - z^2}{1 + z^2}} \\
&\sim \sqrt{2m^*|\varepsilon|} z_t \int_0^{z_t} dz \sqrt{\frac{1}{1 + z^2}} \\
&\sim \sqrt{2m^*|\varepsilon|} z_t \ln z_t \\
&\sim \sqrt{2m^* \Delta \frac{\xi}{R}} \ln z_t.
\end{aligned} \tag{6.62}$$

On peut alors utiliser la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld pour obtenir que

$$\frac{2R}{\pi \hbar} \sqrt{2m^* \Delta \frac{\xi}{R}} \ln z_t \simeq \frac{1}{2} + n, \tag{6.63}$$

signifiant que

$$z_t = \exp \left[\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^* R \xi \Delta}} \frac{\pi}{2} \left(\frac{1}{2} + n \right) \right] \tag{6.64}$$

ou

$$\varepsilon_n = -\Delta \frac{\xi}{R} \exp \left[-\frac{\pi}{2L} \left(\frac{1}{2} + n \right) \right]. \tag{6.65}$$

Finalement, dans le cas $l \lesssim L$ on peut écrire l'impulsion comme

$$\begin{aligned}
p^2 &= 2m^* [\varepsilon_l - U_l(z)] \\
&\simeq 2m^* |\varepsilon_l| \left[\left(\frac{z_t}{z} \right)^2 - 1 \right] \\
&= 2m^* |\varepsilon_l| \frac{z_t^2 - z^2}{z^2},
\end{aligned} \tag{6.66}$$

approximation valable pour $z \geq 1$. On en déduit, de manière similaire au cas précédent,

$$\begin{aligned}
\int_1^{z_t} p(z) dz &\simeq \sqrt{2m^* |\varepsilon_l|} z_t \ln z_t \\
&\simeq \sqrt{2m^* \Delta \frac{\xi}{R}} \sqrt{1 - \frac{l^2}{L^2}} \ln z_t.
\end{aligned} \tag{6.67}$$

Pour $z \leq 1$ on a

$$\begin{aligned}
\int_{z_0}^1 p(z) dz &\simeq \sqrt{2m^*} \int_{z_0}^1 \sqrt{\varepsilon_l - \Delta \frac{\xi}{R} \left[-\frac{1}{1 + z^2} + \frac{l^2}{L^2} \frac{1}{z^2} \right]} \\
&\sim \sqrt{2m^* \Delta \frac{\xi}{R}} \int_{z_0}^1 \sqrt{\left[1 - \left(\frac{z_0^2}{z^2} \right) \right]} \\
&\leq \sqrt{2m^* \Delta \frac{\xi}{R}},
\end{aligned} \tag{6.68}$$

ce qui signifie que puisque $z_t \gg 1$ on peut donc négliger ce morceau de l'intégrale comparé au reste de cette dernière (6.67). On obtient ainsi, en utilisant la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld que

$$\varepsilon_n^l \sim -\Delta \frac{\xi}{R} \left(1 - \frac{l^2}{L^2}\right) \exp \left[-\frac{\pi n}{2\sqrt{L^2 - l^2}} \right]. \quad (6.69)$$

On peut noter que pour $l \ll L$ on retrouve bien (6.65), on pourra donc utiliser la relation (6.69) pour tout l . On observe que ces énergies n'ont de sens que lorsque le module de l'argument de l'exponentiel est supérieur à l'unité, c'est à dire pour $n \geq n_0 = 2\frac{\sqrt{L^2 - l^2}}{\pi}$.

On peut maintenant estimer la contribution des états liés en sommant les énergies (6.69) sur l allant de 0 à L et n allant de n_0 à N . On peut noter qu'en réalité le nombre maximum de zéros de la fonction d'onde est une fonction décroissante de l , puisqu'on le majore ici par N défini selon (6.60) on va donc surestimer l'énergie des états quasi classiques. On a

$$\begin{aligned} E_T^{qc} &\simeq \sum_{l=0}^L \sum_{n=n_0}^N |\varepsilon_n^l| \\ &\sim \Delta \frac{\xi}{R} \sum_l \left(1 - \frac{l^2}{L^2}\right) \int_{n_0}^{\infty} dn e^{-n/n_0} \\ &\sim \Delta \frac{\xi}{R} \sum_{l=0}^L L \left(1 - \frac{l^2}{L^2}\right)^{3/2} \\ &\sim \Delta \frac{\xi}{R} L^2 \int_0^1 ds (1 - s^2)^{3/2} \\ &\sim \Delta \frac{\xi}{R} L^2 \end{aligned} \quad (6.70)$$

Puisque $L = \sqrt{\frac{2R}{\sqrt{\epsilon}\xi}}$ on a donc

$$E_T^{qc} \sim \frac{\Delta}{\sqrt{\epsilon}} \sim E_0 \quad (6.71)$$

avec toujours $E_0 \equiv \frac{\Delta}{12\sqrt{\epsilon}}$.

On n'a pas pris en compte ici l'expression (6.59) des états d'énergie correspondant aux petites valeurs de l et les grandes valeurs de n . Cela se justifie en faisant l'estimation

$$\begin{aligned} \delta E_{qc} &< L \sum_{n=0}^N |\varepsilon_n| = L^2 \Delta \epsilon \left(\frac{\xi}{R}\right)^3 \ln 2L^2 \sum_{n=0}^N \left(1 - \frac{n}{N}\right) \\ &< \Delta \frac{4}{6} \sqrt{\epsilon} \frac{\xi^2}{R^2} \ln^2 \left(\frac{4R}{\sqrt{\epsilon}\xi}\right) \end{aligned} \quad (6.72)$$

Cette contribution est négligeable devant l'énergie totale des états quasi classique et tend en plus vers 0 lorsque le rayon de skyrmion R diverge.

On voit donc finalement que, tout comme pour les niveaux harmoniques, la contribution des états quasi-classiques est en première approximation indépendante du rayon de skyrmion R , et du même ordre de grandeur E_0 que celle due aux états harmoniques.

7

Ce chapitre discute d'une part les limitations du modèle développé, et d'autre part les différentes conséquences de l'existence d'états liés électron-skyrmion. On discutera tout d'abord la validité de l'approximation suivie qui consiste à considérer le skyrmion comme une entrée statique du problème. On discutera ensuite des possibles transitions optiques entre les états liés, ce qui sera l'occasion de discuter de la structure des fonctions d'ondes des états liés dans l'espace réel ainsi que de leur polarisation. La question du profil optimal favorisé par l'existence des états liés sera ensuite abordée.

Contenu du chapitre

| | | |
|------------|--|------------|
| 7.1 | Condition nécessaire pour considérer un skyrmion comme statique | 110 |
| 7.2 | Transitions optiques | 113 |
| 7.2.1 | Fonctions d'ondes réelles | 113 |
| 7.2.2 | Diagonalisation générale du hamiltonien | 114 |
| 7.2.3 | Transitions induites par un champ électrique | 116 |
| 7.2.4 | Transition induite par un champ magnétique | 118 |
| 7.3 | Profil de skyrmion favorisé | 119 |
| 7.4 | Densité de charge effective | 121 |
| 7.5 | Synthèse et ouverture | 122 |

7.1 Condition nécessaire pour considérer un skyrmion comme statique

On a considéré dans les chapitres précédents le profil du skyrmion comme une entrée statique du problème. Le traitement séparé des comportements dynamiques de l'électron et du skyrmion requiert en réalité qu'il n'y ait pas d'interaction possible entre les modes propres électroniques et les modes propres du skyrmion. L'énergie de ces derniers est contrainte[43] de se trouver dans le gap d'énergie associé à la relation de dispersion

des magnons antiferromagnétiques. L'épaisseur du gap pour des magnons antiferromagnétiques peut être évaluée en étudiant les modes de précession uniformes des spins, correspondant aux magnons ayant un vecteur d'onde nulle [44, 45]. Une telle analyse montre que le spectre magnonique n'est gapé que lorsque l'anisotropie K est non nulle, et que le gap vaut

$$\hbar\Omega_0 = \sqrt{2KA + K^2} \underset{K \ll A}{\simeq} \sqrt{2AK}. \quad (7.1)$$

Cette notation correspond au cas d'un modèle continu dérivé à partir d'un modèle sur réseau, décrit par la fonctionnelle énergie magnétique

$$\mathcal{H}[\mathbf{n}] = \int d^2r \left[A \partial_i \mathbf{n} \cdot \partial_i \mathbf{n} + \frac{K}{a_0^2} (1 - n_z^2) + \frac{D}{a_0} e_{DM} \right], \quad (7.2)$$

avec a_0 le pas du réseau initial depuis lequel ce modèle continu a été dérivé. Cette fonctionnelle est l'analogue de la fonctionnelle (1.7) discutée en introduction, sauf qu'ici l'élasticité A , la constante d'anisotropie K et la constante associée à l'interaction de Dzyaloshinskii–Moriya D ont dans ce cas toutes les trois la dimension d'une énergie. Pour un tel système le paramètre d'ordre Néel va varier sur une longueur minimale $l_w = \sqrt{A/K}a_0$ appelée longueur magnétique. Dans les systèmes réels on s'attend à avoir $A \gg K$ et ainsi $l_w \gg a_0$, ce qui justifie alors la description continue adoptée ici. On se placera ainsi dans cette limite pour la suite de cette discussion.

Les modes propres des skyrmions antiferromagnétiques se décomposent en deux catégories[43]. La première contient les modes haute fréquence dont les énergies dépendent peu du rayon et se situent proches de la limite supérieure du gap

$$\Omega_i^{HF} \sim \Omega_0. \quad (7.3)$$

Les autres modes sont de basse fréquence, dont l'énergie tend à s'annuler pour les grands rayons. Leurs fréquences se comportent comme

$$\frac{\Omega_i^{BF}}{\Omega_0} \sim \alpha_i \frac{l_w^2}{R^2} \quad (7.4)$$

avec des coefficients α_i de l'ordre de l'unité et supérieurs à $\frac{1}{2}$.

Pour que le profil de skyrmion puisse être considéré comme une entrée statique du problème, il faut que la plus petite fréquence caractéristique des états liés, notée ω_x , soit grande devant la fréquence d'excitation seuil des magnons antiferromagnétiques, soit

$$\omega_x \gg \Omega_0. \quad (7.5)$$

Cela correspond physiquement à dire que la dynamique des électrons est très rapide par rapport à celles du skyrmion, et qu'à l'échelle de temps caractéristique des électrons le skyrmion est donc perçu comme immobile. On voit directement que cette condition ne peut jamais être respectée lorsqu'on traite les états quasi-classiques dans la région $R \gg \xi$ pour un skyrmion de Belavin-Polyakov, et $w \gg \xi$ pour un skyrmion en paroi de

domaine. On a cependant vu que la structure globale reposait sur les états harmoniques, et que le coût énergétique d'un skyrmion pouvait raisonnablement être estimé en ne considérant que ces derniers. On peut donc, dans le cas du profil de Belavin-Polyakov pour lequel on a

$$\hbar\omega_x \sim \Delta\sqrt{\epsilon} \left(\frac{\xi}{R}\right)^{3/2}, \quad (7.6)$$

arguer que la condition (7.5) pourra être satisfaite pour les états harmoniques pour les rayons tels que

$$\Delta\sqrt{\epsilon} \left(\frac{\xi}{R}\right)^{3/2} \gg \sqrt{AK} \quad (7.7)$$

soit

$$\frac{R}{\xi} \ll \left(\frac{\epsilon\Delta^2}{AK}\right)^{1/3}. \quad (7.8)$$

La structure fine associée à l'image physique obtenue pour le profil de Belavin-Polyakov, représentée sur la figure 4.6, est donc valable pour $R > \xi$ lorsque l'anisotropie est suffisamment faible, tel que

$$\frac{\epsilon\Delta^2}{AK} \gg 1. \quad (7.9)$$

On s'attend à avoir $A \sim \Delta$, ces constantes provenant toutes deux d'un terme d'échange. Cette inégalité ne pourra donc être satisfaite qu'à très faible anisotropie. Pour des rayons ne satisfaisant plus l'inégalité (7.8) la structure fine des états liés devrait commencer à différer de la prédiction apportée par notre modèle. On peut cependant noter que la structure énergétique grossière des états liés, associée à une fréquence propre plus grande $\omega_y \sim \Delta(\xi/R)^{3/2}$, est quant à elle valable à plus grand rayons, la condition associée étant

$$\frac{R}{\xi} \ll \left(\frac{\Delta^2}{AK}\right)^{1/3}, \quad (7.10)$$

relation toujours satisfaite à faible anisotropie $K \ll \Delta \sim A$.

Pour un skyrmion en paroi de domaine la situation est quelque peu différente car il y a deux paramètres géométriques entrant en jeu, le rayon du skyrmion R mais aussi l'épaisseur de paroi w . La fréquence caractéristique du degré de liberté lent dépend des deux paramètres, mais l'épaisseur de paroi est à priori fixée par l'anisotropie selon $w \sim l_w = \sqrt{A/K}a_0$. La condition (7.5) se traduit donc par

$$\frac{R}{\xi} \ll \frac{\Delta}{A} \sqrt{\epsilon \frac{\xi}{a_0}} \left(\frac{A}{K}\right)^{1/4}. \quad (7.11)$$

La structure des états liés ne dépend pas explicitement du rayon, mais plutôt de l'épaisseur de paroi w . On peut cependant noter que le modèle utilisé repose sur l'hypothèse

$w \ll R$, indiquant que la condition de validité de la structure fine est finalement

$$\frac{w}{\xi} \lll \frac{\Delta}{A} \sqrt{\epsilon \frac{\xi}{a_0}} \left(\frac{A}{K}\right)^{1/4}. \quad (7.12)$$

La structure grossière semble quant à elle toujours valable pour ce modèle, puisque demander que la fréquence caractéristique du degré de liberté rapide

$$\hbar\omega_y \sim \Delta \left(\frac{\xi}{w}\right)^{3/2} \sim \Delta \left(\frac{\xi}{a_0} \sqrt{\frac{K}{A}}\right)^{3/2} \quad (7.13)$$

soit grande devant le gap d'excitation des magnons revient à demander que

$$\frac{\Delta^2}{A^2} \sqrt{\frac{K}{A}} \left(\frac{\xi}{a_0}\right)^3 \gg 1, \quad (7.14)$$

condition qui semble tout à fait raisonnable pour un matériau réaliste.

On se propose maintenant de discuter brièvement les possibles transitions optiques possibles entre les états liés.

7.2 Transitions optiques

Nous nous proposons dans cette section de discuter les conséquences de l'existence des états liés en terme de transitions optiques. On peut en effet observer en regardant les images physiques obtenues pour un skyrmion de Belavin-Polyakov (figure 4.6) et en paroi de domaine (figure 5.7) que l'apparition d'états liés produit des niveaux d'énergie se situant dans le gap d'énergie. On en déduit que la formation d'un skyrmion devrait affecter le spectre d'absorption d'un matériau possédant les propriétés discutées dans le présent manuscrit, rendant la détection de skyrmions antiferromagnétiques plus simple.

On se propose maintenant d'étudier rapidement si des transitions optiques peuvent être excitées par des champs électriques et magnétiques lorsqu'on est à température nulle et à demi remplissage. Pour étudier ces transitions il faut d'abord comprendre quelle est la structure réelle des fonctions d'ondes des états liés. Cette section est donc aussi l'occasion de regarder de plus près la structure de ces fonctions d'onde, laissées à l'arrière plan dans l'étude des états liés réalisée dans ce manuscrit.

7.2.1 Fonctions d'ondes réelles

La structure exacte des fonctions d'onde des états liés s'obtient en réalisant les transformations inverses liées aux opérateurs P et U , introduits respectivement au travers des relations (2.16) et (2.9). On a effectué d'une part une rotation de l'espace de

spin U visant à rendre le paramètre d'ordre Néel \mathbf{n} artificiellement uniforme, et d'autre part une transformation du bispineur $(\Psi_{\mathbf{p}}, \Psi_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}})^t$ afin de diagonaliser le hamiltonien original au niveau des minimums de la bande de conduction¹. Il faut donc maintenant appliquer l'inverse de ces transformations aux fonctions d'ondes obtenues après avoir effectué ces transformations, afin de retrouver les fonctions d'onde réelles, qui contiennent la physique du problème.

7.2.2 Diagonalisation générale du hamiltonien

On se propose maintenant de faire une petite digression sur la formulation la plus générale possible de la transformation diagonalisant le hamiltonien au niveau des minimums de la bande de conduction situés aux points $\{\mathbf{p}_0\}$. En ces points on a le hamiltonien original (2.20) qui s'écrit comme

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \Delta\sigma^z \\ \Delta\sigma^z & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.15)$$

Ce hamiltonien admet des vecteurs propres dont la forme la plus générale peut être écrite comme

$$\mathbf{u}_{\pm} = V_z^{\pm}(\mathbf{r}) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm\sigma^z \end{pmatrix}, \quad V_z^{\pm}(\mathbf{r}) = e^{i\chi_{\pm}(\mathbf{r})\sigma^z}, \quad (7.16)$$

avec $\chi_{\pm}(\mathbf{r})$ un champ angulaire monovalué. $V_z^{\pm}(\mathbf{r})$ représente donc un opérateur quelconque produisant une rotation dans l'espace de spin d'angle $\chi_{\pm}/2$ autour de \mathbf{e}_z . On en déduit que l'opérateur qui diagonalise le hamiltonien aux points $\{\mathbf{p}_0\}$ peut être écrit généralement comme

$$\mathbf{P} = \frac{V_z}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & U_z \\ \sigma^z & -U_z\sigma^z \end{pmatrix} = \frac{V_z}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sigma^z & -\sigma^z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_z \end{pmatrix} \quad (7.17)$$

avec $V_z = V_z^+$ et $U_z = (V_z^+)^{\dagger}V_z^-$. On voit que lorsqu'on applique cet opérateur au Hamiltonien (2.20) selon

$$H \rightarrow \mathbf{P}^{\dagger}H\mathbf{P}, \quad (7.18)$$

le sandwich $V_z^{\dagger}HV_z$ correspond seulement à appliquer la transformation de jauge décrite dans la section 2.2, les effets d'une telle transformation étant bien connus on peut l'ignorer ici. On obtient ainsi, en posant $V_z \equiv 1$, le hamiltonien

$$H = \begin{pmatrix} \Delta + \gamma_+ & \gamma_-U_z \\ U_z^{\dagger}\gamma_- & -\Delta + U_z^{\dagger}\gamma_+U_z \end{pmatrix} \quad (7.19)$$

avec comme précédemment

$$\gamma_{\pm} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{p}} \pm \sigma^z \varepsilon_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} \sigma^z}{2}. \quad (7.20)$$

1. On peut ajouter qu'une rotation dans l'espace de spin a été effectuée pour diagonaliser le terme de potentiel attractif effectif. Cette rotation ne fait cependant que redéfinir le choix naturel d'axes dans l'espace de spin, et n'affecte donc pas la discussion de cette section.

Cela signifie que le hamiltonien général peut s'écrire à partir du hamiltonien "particulier"² (2.21) utilisé dans les différents chapitres selon

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_z^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta + \gamma_+ & \gamma_- \\ \gamma_- & -\Delta + \gamma_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & U_z \end{pmatrix}. \quad (7.21)$$

On en déduit que choisir U_z différent de 1 correspond à faire une transformation de jauge effective, se traduisant par une rotation relative des espaces de spin associés aux bandes de conduction et de valence. Cette rotation se fait autour de l'axe z de l'espace de spin. Le choix de jauge $U_z = 1$ utilisé tout au long de ce manuscrit correspond ainsi à prendre la même orientation pour les deux sous espaces de spin, c'est le choix le plus naturel. Quel que soit le choix de jauge effectué, la fonction d'onde réelle s'obtient en appliquant la transformation inverse correspondante, sachant que la transformation $H \rightarrow \mathbf{P}^\dagger H \mathbf{P}$ s'inverse selon

$$\Psi = \mathbf{P} \tilde{\Psi}. \quad (7.22)$$

On se propose maintenant d'effectuer cette transformation inverse pour les fonctions d'onde des états liés obtenues après transformation, afin de connaître leur structure réelle.

Transformation inverse

On applique la transformation inverse (7.22) aux états propres du hamiltonien (2.21) associés à une fonction d'onde de la forme

$$\tilde{\Psi}_v^{i,j} = \begin{pmatrix} \phi_i |-\rangle_x \\ \frac{\gamma_-}{2\Delta} \phi_{i,j} |-\rangle_x \end{pmatrix}, \quad \tilde{\Psi}_c = \begin{pmatrix} \phi_i |+\rangle_x \\ \frac{\gamma_-}{2\Delta} \phi_i |+\rangle_x \end{pmatrix} \quad (7.23)$$

suivant des notations analogues à celles de la section 4.5, où les indices i, j désignent respectivement le nombre de zéros de la fonction d'onde selon y , et x , et où l'opérateur γ_- est considéré en première approximation comme diagonal dans l'espace de spin. On obtient ainsi

$$\Psi_v^i = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \sigma^z & -\sigma^z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi |-\rangle_x \\ \frac{\gamma_-}{2\Delta} \phi |-\rangle_x \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{\gamma_-}{2\Delta}\right) \phi |-\rangle_x \\ \left(1 - \frac{\gamma_-}{2\Delta}\right) \phi |+\rangle_x \end{pmatrix} \quad (7.24)$$

qu'on notera

$$\Psi_v^i \equiv \begin{pmatrix} \phi_v^+ |-\rangle_x \\ \phi_v^- |+\rangle_x \end{pmatrix} \quad (7.25)$$

en omettant l'indice i relatif au nombre de zéros de la fonction d'onde selon la coordonnée lente x . On a de même

$$\Psi_c = \begin{pmatrix} \phi_c^+ |+\rangle_x \\ \phi_c^- |-\rangle_x \end{pmatrix}. \quad (7.26)$$

2. Ce hamiltonien correspond au choix de jauge, tout à fait valable et légitime $U_z = 1$.

On peut noter que la densité de probabilité de présence pour les états occupés s'écrit donc

$$\rho_v^\pm = \left| \left(1 \mp \frac{\hat{\gamma}_-}{2\Delta} \right) \phi \right|^2 = \frac{|\phi|^2}{2} \mp \frac{\xi}{4R} (-i\phi^* \partial_{\bar{y}} \phi + i\phi \partial_{\bar{y}} \phi^*) + \frac{\xi^2}{8R^2} (\partial_{\bar{y}} \phi)^2 \quad (7.27)$$

selon la polarisation $|\pm\rangle$. On a ainsi une densité de probabilité de présence totale qui s'exprime comme

$$\rho_v^{\text{tot}} = |\phi|^2 + \frac{\xi^2}{4R^2} (\partial_{\bar{y}} \phi)^2. \quad (7.28)$$

Notons enfin qu'on doit finalement appliquer la rotation de l'espace de spin décrite par l'opérateur $U(\mathbf{r})$ pour obtenir les fonctions d'onde réelles selon

$$\Psi_{\text{réelle}} = U(\mathbf{r})\Psi. \quad (7.29)$$

On voit cependant que cette transformation ne va agir que sur la polarisation, rendant³ cette dernière dépendante de la position. Les états seront ainsi polarisés dans l'espace réel selon $U(\mathbf{r})|\pm\rangle_{e_\sigma}$.

Maintenant que l'expression dans l'espace réel des états propres du hamiltonien original (2.2) a été établie, on peut regarder quelles sont les transitions optiques autorisées entre les états de valence et ceux de conduction.

7.2.3 Transitions induites par un champ électrique

On veut étudier les possibles transitions optiques induites via un champ électrique orienté selon \mathbf{e}_y , correspondant à la perturbation

$$\delta H_E = eyE_y e^{-i\omega_0 t}. \quad (7.30)$$

Une telle perturbation agit de la même manière sur les états réels Ψ_r que sur les états transformés $\Psi = U^\dagger(\mathbf{r})\Psi_r$ puisque δH_E est diagonal dans l'espace de spin et que donc

$$\langle \Psi_r^c | \delta H_E | \Psi_r^v \rangle = \langle \Psi^c | U^\dagger (\delta H_E) U | \Psi^v \rangle = \langle \Psi^c | \delta H_E | \Psi^v \rangle. \quad (7.31)$$

On voit qu'une excitation par un tel champ ne semble à priori pas possible puisque les polarisations des états de conduction et de valence sont opposées. On peut cependant remarquer que cela n'est valable qu'en première approximation, puisqu'on a considéré que $\hat{\gamma}_-$ était diagonal dans l'espace de spin en faisant l'approximation

$$\hat{\gamma}_- = v\hat{p}_y + vA_y^z \sigma^z + \frac{1}{2m_i} \{ \hat{p}_i, \mathbf{A}_i^\parallel \cdot \boldsymbol{\sigma} \} \simeq v\hat{p}_y. \quad (7.32)$$

3. En particulier dans le cas du profil de Belavin-Polyakov, puisque dans le cas d'un skyrmion en paroi de domaine la polarisation obtenue dépendait déjà de la coordonnée angulaire du plan. On voit maintenant que la fonction d'onde réelle dépend finalement de la position dans l'espace quelque soit le profil.

Négliger le second terme correspond ici à négliger le couplage spin-orbite, or c'est l'existence d'un tel couplage qui permet l'excitation optique via un champ électrique. On peut noter qu'on a négligé de même les effet spin-orbitaux en prenant $\hat{\gamma}_+$ comme

$$\hat{\gamma}_+ = v\mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2m_i} \left[(\hat{p}_i + A_i^z \sigma^z)^2 + (A_i^{\parallel})^2 \right] \simeq v\mathbf{A}_y^{\parallel} \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (7.33)$$

Si on réintroduit un couplage spin-orbite en prenant

$$\hat{\gamma}_- \simeq v\hat{p}_y + vA_y^z \sigma^z, \quad (7.34)$$

on aura cette fois

$$\Psi_v = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{l} \left(1 + \frac{\gamma_-}{2\Delta}\right) \phi|-\rangle_x \\ \left(1 - \frac{\gamma_-}{2\Delta}\right) \phi|+\rangle_x \end{array} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{l} \left(1 - i\frac{\xi}{2R}\partial_{\bar{y}}\right) \phi|-\rangle_x + \frac{vA_y^z}{2\Delta} \phi|+\rangle_x \\ \left(1 + i\frac{\xi}{2R}\partial_{\bar{y}}\right) \phi|+\rangle_x + \frac{vA_y^z}{2\Delta} \phi|-\rangle_x \end{array} \right) \quad (7.35)$$

et

$$\Psi_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{l} \left(1 + \frac{\gamma_-}{2\Delta}\right) \phi|+\rangle_x \\ \left(1 - \frac{\gamma_-}{2\Delta}\right) \phi|-\rangle_x \end{array} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{l} \left(1 - i\frac{\xi}{2R}\partial_{\bar{y}}\right) \phi|+\rangle_x + \frac{vA_y^z}{2\Delta} \phi|-\rangle_x \\ \left(1 + i\frac{\xi}{2R}\partial_{\bar{y}}\right) \phi|-\rangle_x + \frac{vA_y^z}{2\Delta} \phi|+\rangle_x \end{array} \right). \quad (7.36)$$

On aura alors les éléments de matrice suivant pour la perturbation par un champ électrique

$$\begin{aligned} V_{vc} &= \langle \Psi_v | \delta H_E | \Psi_c \rangle \\ &= \int d\mathbf{r} \delta H_E \left[\left(\phi_v^* + i\frac{\xi}{2R}\partial_{\bar{y}}\phi_v^* \right) \frac{vA_y^z}{2\Delta} \phi_c + \frac{vA_y^z}{2\Delta} \phi_v^* \left(\phi_c - i\frac{\xi}{2R}\partial_{\bar{y}}\phi_c \right) \right] \\ &+ \int d\mathbf{r} \delta H_E \left[\left(\phi_v^* - i\frac{\xi}{2R}\partial_{\bar{y}}\phi_v^* \right) \frac{vA_y^z}{2\Delta} \phi_c + \frac{vA_y^z}{2\Delta} \phi_v^* \left(\phi_c + i\frac{\xi}{2R}\partial_{\bar{y}}\phi_c \right) \right] \\ &= \int d\mathbf{r} \delta H_E 4 \frac{vA_y^z}{2\Delta} \phi_v^* \phi_c. \end{aligned} \quad (7.37)$$

Ces éléments de matrice ne peuvent être non nuls que pour des transitions entre des niveaux ayant des symétries différentes à la fois selon x et y puisque A_y^z est une fonction impaire de x et δH_E une fonction impaire de y . On peut noter que l'amplitude de ces termes de couplage sera notamment proportionnelle à l'intégrale du terme responsable du couple spin-orbite A_y^z , comme on pouvait s'y attendre. Ces estimations amènent donc à penser que ces transitions seront plus probables dans la limite des petits rayons puisque $\frac{vA_y^z}{\Delta}$ varie comme $\frac{\xi}{R}$. On peut noter que l'excitation par un champ électrique dirigé selon x dans l'espace réel⁴ couplera cette fois des états de mêmes symétries spatiales.

4. Cela correspond à considérer le champ (7.30) dans une autre vallée Σ_i .

7.2.4 Transition induite par un champ magnétique

On étudie maintenant le cas d'une transition induite par un champ magnétique orienté selon \mathbf{e}_z , induite par une perturbation de la forme

$$\delta H_B = \frac{e \hbar}{m 2} \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{\hbar \omega_c}{2} e^{i\omega_0 t} \mathbf{e}_B \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (7.38)$$

On constate qu'une telle perturbation va engendrer des transitions même en prenant les fonctions d'onde à l'ordre 0, puisqu'elle n'est pas diagonale dans l'espace de spin. La contrepartie est que l'application de la rotation de l'espace de spin $U(\mathbf{r})$ à une telle perturbation la rend très compliquée. On a ainsi

$$\delta \tilde{H}_B = U^\dagger(\mathbf{r}) \delta H_B U(\mathbf{r}) = \frac{\hbar \omega_c}{2} U^\dagger \sigma^z U = \frac{\hbar \omega_c}{2} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (7.39)$$

correspondant à considérer la transition entre deux états dont la polarisation est bien définie, mais où la structure spatiale du champ magnétique responsable de l'excitation est analogue à celle d'un skyrmion. Dans cette situation on a notamment

$$\langle \Psi_c | \delta \tilde{H}_B | \Psi_v \rangle \simeq \frac{\hbar \omega_c}{2} \int d^2 r \left[n_z (\bar{\phi}_v^+ \phi_c^+ + \bar{\phi}_v^- \phi_c^-) + n_x (\bar{\phi}_v^+ \phi_c^- + \bar{\phi}_v^- \phi_c^+) \right] \quad (7.40)$$

avec $\bar{\phi}$ le complexe conjugué de ϕ . Cette intégrale est généralement non nulle pour des états de mêmes symétries spatiales, on a donc bien des transitions possibles entre de tels états.

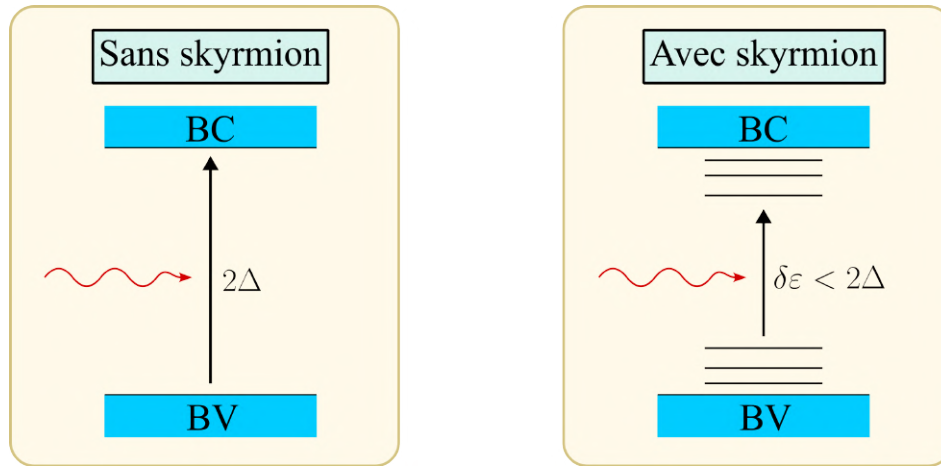


FIGURE 7.1 – Schéma de principe illustrant la différence entre le spectre énergétique d'un matériau antiferromagnétique en l'absence de skyrmion versus en présence d'un skyrmion. À demi remplissage et à température nulle on s'attend ainsi à avoir une différence qualitative entre les transitions optiques autorisées.

On peut donc conclure qu'à température nulle et à demi remplissage, la présence d'un skyrmion réduit qualitativement la fréquence caractéristique des transitions optiques. En absence de skyrmion, la plus petite fréquence excitable est égale à l'épaisseur du gap 2Δ , tandis qu'en présence d'un skyrmion, la formation d'états liés conduit à l'apparition de fréquences de transition inférieures à ce seuil 2Δ , comme illustré sur la figure 7.1. Ces transitions pourront par ailleurs être excitées par un champ électrique comme magnétique. Cela fournit donc un moyen de détecter la présence de skyrmions antiferromagnétiques, détection qui est habituellement compliquée à cause de l'absence d'aimantation nette pour de tels objets.

7.3 Profil de skyrmion favorisé

On a vu dans les chapitres précédents que l'existence d'états liés conduit à un fort coût énergétique pour un skyrmion, la présence de ce dernier impliquant la nécessité d'occuper des états défavorables énergétiquement. On a aussi vu que ce coût énergétique dépend très fortement de la géométrie.

Ce qui ressort de ces analyses est que les états liés seront localisés autour des points \mathbf{r}_i pour lesquels le paramètre d'ordre Néel \mathbf{n} varie maximale. Dans le cas d'un skyrmion, symétrique par rotation, ces points \mathbf{r}_i sont tels que la dérivée radiale du paramètre d'ordre en ce point

$$\frac{1}{l} \equiv \left\| \frac{\partial \mathbf{n}}{\partial r} \right\|_{\mathbf{r}_i} \quad (7.41)$$

est maximale, avec $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ la coordonnée radiale du plan. On a notamment $l = R$ et $\mathbf{r}_i = 0$ pour un skyrmion de Belavin-Polyakov, et $l = w$ avec $\mathbf{r}_i = \pm R\mathbf{e}_y$ pour un skyrmion en paroi de domaine.

On a vu que pour minimiser l'énergie d'un skyrmion en paroi de domaine il faut diminuer son rayon pour le rendre comparable à son épaisseur de paroi. Cela conduit alors à un profil analogue au profil de Belavin-Polyakov où le paramètre d'ordre varie maximale au centre du skyrmion. On constate de plus que ce type de profil est plus favorable puisque dans ce cas il existe une région de l'espace des paramètres pour laquelle le coût énergétique du skyrmion associé aux états liés s'annule, ce qui n'est pas le cas pour un skyrmion en paroi de domaine.

Dans le général cas d'un profil de type Belavin-Polyakov pour lequel le paramètre d'ordre varie maximale au centre du skyrmion, on aura une disparition des états liés pour l de l'ordre de $\bar{l} = \sqrt{\epsilon}\xi$. Le mécanisme des états liés favorise donc les profils de type Belavin-Polyakov pour lesquels $l \leq \bar{l}$. Puisque que pour $l \leq \bar{l}$ il n'y a plus d'états liés, la forme exacte de la queue du skyrmion n'impacte pas l'énergie associée au mécanisme électronique. C'est donc ensuite les interactions magnétiques internes du matériau qui vont déterminer la forme exacte du skyrmion. Puisqu'il existe une région de l'espace des paramètres magnétiques⁵ pour laquelle c'est le profil de Belavin-Polyakov associé à

5. Avec les notations de la première section 7.1 du chapitre, les paramètres sont l'élasticité A , la

une queue exponentiellement décroissante qui émerge[7], il est donc vraisemblable que ce soit ce profil qui soit sélectionné lorsque l'interaction skyrmion-électrons domine. Attention, dans la discussion présente, n'incluant pas de champ magnétique extérieur, on ne traite que de skyrmions métastables. La notion de profil optimal correspond ici au profil qui minimise l'énergie dans le secteur topologique associé à un nombre d'enroulement $Q = 1$. Cela n'exclut pas que cette discussion puisse un jour être élargie au cas d'un skyrmion stable, si un nouveau mécanisme permet de stabiliser des skyrmions antiferromagnétiques.

Le critère pertinent pour savoir si ce sont les interactions magnétiques internes ou l'interaction skyrmion-électrons qui domine va être la comparaison entre les échelles d'énergies caractéristiques du coût des états liés $E_0 \sim \Delta \sqrt{\frac{m_x \xi}{m_y a}}$ versus le coût caractéristique des interactions magnétiques $4\pi A$. Il existe donc deux cas de figure selon le ratio entre ces deux énergies caractéristiques. Voyons si on peut tout d'abord estimer si ce ratio est grand ou petit devant l'unité. La constante $\Delta = JM_s$ provient d'un terme d'échange liant les électrons libres aux moments magnétiques internes du matériau. L'élasticité A possède la même origine, à savoir une intégrale d'échange, et il est donc vraisemblable que A et Δ soient du même ordre de grandeur. On peut tout de même noter que si on note $S \sim M_s$ l'amplitude effective des moments magnétiques du matériau, on aura $J \propto S$ et $A \propto S^2$, puisqu'on est ici dans la limite des grands S , il est donc vraisemblable que A soit plus grand que Δ . Cela ne change pas le fait que puisque $E_0 \gg \Delta$ il est raisonnable de penser que $E_0 \gg A$. Analysons maintenant les deux cas de figure. Dans le cas le plus plausible $E_0 \gg 4\pi A$ le profil imposé sera donc vraisemblablement celui de Belavin-Polyakov⁶, avec un rayon suffisamment faible pour qu'il n'y ait pas d'états liés, et le coût énergétique associé au skyrmion sera de l'ordre de $4\pi A$. Dans le cas opposé $E_0 \ll 4\pi A$ on s'attend à avoir cette fois un profil favorisé qui sera plutôt du type paroi de domaine pour $D \leq D_c \equiv 4\sqrt{AK}/\pi$ [42]. L'épaisseur de paroi w est à priori imposée par la valeur de K selon $w \sim l_w = \sqrt{A/K}a_0$, tandis que le rayon devrait être une fonction du ratio D/\sqrt{AK} . On voit cependant que l'énergie magnétique du skyrmion $\varepsilon(A, K, D)$ décroît lorsque le rayon augmente, tandis que le coût énergétique des états liés $E_T(w, R)$ augmente linéairement avec le rayon. Cela implique qu'il va nécessairement avoir un compromis entre les deux mécanismes, qui résultera probablement dans un profil qui n'est pas en paroi de domaine, même dans la limite $4\pi A \gg E_0$. Quelle que soit la configuration observée, l'énergie caractéristique du skyrmion sera de l'ordre du maximum de $\{E_0, 4\pi A\}$, ce qui indique que la présence d'électron rend le coût énergétique d'un skyrmion toujours conséquent, si on se limite aux interactions discutées ici. Sous cet angle il apparaît donc, comme évoqué précédemment, que l'existence d'états liés empêche la potentielle stabilisation d'un skyrmion antiferromagnétique.

constante d'anisotropie K et l'intensité de l'interaction de Dzyaloshinskii–Moriya D .

6. Au moins au centre du skyrmion, puisqu'on a vu que la forme exacte de la queue du skyrmion importe peu pour les états liés.

On peut noter que la discussion effectuée dans ce manuscrit se concentre sur le cas modèle d'un skyrmion isolé, ce qui est peu pertinent d'un point de vue pratique, puisque le seul cas où des skyrmions stables peuvent être potentiellement observés est en présence d'un champ magnétique extérieur, situation dans laquelle ces derniers forment un réseau de skyrmions. On peut cependant étendre les conclusions qualitatives obtenues pour un skyrmion isolé au cas d'un skyrmion existant au sein d'un réseau de skyrmions. On a en effet vu que pour un skyrmion ayant une structure du type Belavin-Polyakov les états liés électroniques sont localisés au cœur du skyrmion, sensibles seulement à la structure géométrique du centre du skyrmion. De même pour un skyrmion en paroi de domaine les états liés sont seulement fonction de la structure de la paroi de domaine circulaire, et pas de ce qui se trouve au delà. Cela indique que toutes les conclusions obtenues à partir de ce modèle de skyrmion isolé peuvent être étendues au cas d'un réseau de skyrmions. On peut de plus avancer que la présence d'une telle structure aura tendance à entraver les modes propres d'excitation d'un skyrmion, permettant de rendre plus robuste l'approximation consistant à traiter les degrés de liberté électroniques en ignorant ces modes propres internes au skyrmion.

La discussion ci dessus indique que dans le cas d'un skyrmion, la contribution énergétique des états liés électroniques, de l'ordre de E_0 , est à priori grande devant l'énergie caractéristique d'un skyrmion due aux interactions magnétiques, fixée par l'élasticité A . Ce résultat contraste avec le cas analogue des supraconducteurs de type II, où les électrons peuvent se lier avec les vortex de phase[46]. Dans ce cas en effet il apparaît que la présence d'états liés n'affecte que peu le coût énergétique intrinsèque du vortex, associé au gradient de la phase, et n'impacte donc pas sa structure. On a donc affaire dans ce manuscrit à une situation tout à fait différente, où l'existence d'états liés électron-skyrmion va profondément impacter la structure des défauts topologiques que sont les skyrmions.

7.4 Densité de charge effective

Supposons maintenant qu'il existe un mécanisme permettant l'apparition de skyrmions stables, et que le profil généré soit tel qu'il y ait des électrons liés à ce skyrmion. Considérons de plus que le matériau considéré est dopé, impliquant que des états liés issus de la bande de conduction soient occupés. Comme on l'a vu ces états sont localisés dans le cœur du skyrmion, ce qui implique que leur occupation va produire une augmentation locale de la densité de charge. Cela implique donc que le skyrmion va devenir une entité chargée électriquement, potentiellement déplaçable via des courants électriques. On peut de plus noter que l'augmentation locale de la densité de charge doit pouvoir être détectée en utilisant de la microscopie STM. Les skyrmions antiferromagnétiques pourraient ainsi, grâce à ce mécanisme et les transitions optiques précédemment discutées, être plus facilement détectés grâce à leur interaction avec les

électrons de conduction.

7.5 Synthèse et ouverture

On a pu voir dans ce manuscrit que lorsqu'un matériau présentant un ordre anti-ferromagnétique de Néel possède d'une part des extréma de bande situés aux points Σ_i de la zone de Brillouin, et d'autre part une inhomogénéité du paramètre d'ordre Néel, alors il va exister des états liés électroniques localisés sur les inhomogénéités du paramètre d'ordre. L'existence d'états liés ne dépend que de ces deux conditions, mais leur structure, tant spatiale qu'énergétique, dépend quant à elle du défaut magnétique à l'origine de ces états liés. Le fait que pour un matériau à demi rempli seuls les états liés issus de la bande de valence soient occupés, implique que la présence de tels états entraîne un coût énergétique pour le système. Ce résultat amène à penser que lorsque les maximums de la bande de valence sont situés aux points Σ_i de la zone de Brillouin, les potentielles variations spatiales du paramètre d'ordre Néel vont être lissées à cause de l'interaction d'échange qui existe entre l'aimantation locale du matériau et le spin des électrons de valence.

Ce travail pourrait naturellement être prolongé dans différentes directions, en voici quelques unes ;

- Cette étude préalable, ignorant les degrés de libertés du skyrmion en lui-même, devrait être complétée par une étude complète traitant les degrés de liberté électroniques et skyrmioniques sur un pied d'égalité. Une telle étude permettrait ainsi de couvrir une plus large région de l'espace des paramètres, et de mieux comprendre l'impact des modes internes d'excitation du skyrmion sur les états électroniques.
- Afin de dresser une image plus précise de la structure à la fois spatiale et énergétique des états liés, en particulier ceux issus de la bande de conduction, il faut prendre en compte les interactions électron-électron entre les électrons occupant des états liés, puisque les fonctions d'onde de ces derniers possèdent un fort recouvrement. Cette étude est en particulier nécessaire parce que le matériau considéré est isolant, et qu'on s'attend donc à un faible écrantage. Ce problème semble cependant difficile à traiter, requérant probablement une étude dédiée complète pour être bien compris.
- On s'est concentré dans cette étude sur la formation d'états liés, en réalisant leur caractérisation et en explorant les conséquences de leur existence. Il serait tout à fait légitime de compléter cette étude par la caractérisation des canaux de diffusion, couplant le spin de l'électron diffusé à sa trajectoire. Une telle étude permettrait de comparer la diffusion d'un électron sur un skyrmion dans les cas

ferromagnétique et antiferromagnétique, le premier cas ayant déjà été exploré dans la littérature[27, 25, 26, 28].

- L'étude de l'interaction électron-skyrmion peut aussi être menée lorsque les extremum de bandes ne sont pas situés aux points Σ_i , mais au niveau des coins de la zone de Brillouin. Dans ce cas il n'y a pas de terme linéaire dans le développement en impulsion de la relation de dispersion du matériau parent, puisque la relation de dispersion doit être paire au bord de la zone de Brillouin paramagnétique. Cela implique que les termes de potentiel effectifs sont au moins quadratiques, et qu'il ne peut donc pas y exister de potentiel attractif, ce qui signifie à priori pas de possibilité d'existence d'états liés. L'étude du phénomène de diffusion sera quant à elle différente du cas d'un extremum de bande situé aux points Σ_i , le potentiel répulsif effectif ressenti étant différent.
- Il serait intéressant de généraliser cette étude au cas plus complexe d'un aimant antiferromagnétique défini sur un réseau qui ne serait pas carré. Ce cas de figure semble d'autant plus pertinent que des travaux récents[47] ont montrés que des réseaux de skyrmions antiferromagnétiques fractionnés pouvaient théoriquement être générés avec un réseau et des interactions se voulant réalistes.

Bibliographie

- [1] T. H. R. Skyrme and B. F. J. Schonland, “A non-linear field theory,” *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 260, no. 1300, pp. 127–138, 1961.
- [2] T. Skyrme, “A unified field theory of mesons and baryons,” *Nuclear Physics*, vol. 31, pp. 556–569, 1962.
- [3] B. Göbel, I. Mertig, and O. A. Tretiakov, “Beyond skyrmions : Review and perspectives of alternative magnetic quasiparticles,” *Physics Reports*, vol. 895, p. 1–28, Feb 2021.
- [4] R. Rajaraman, *An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory*. 1982.
- [5] A. A. Belavin and A. M. Polyakov, “Metastable states of two-dimensional isotropic ferromagnets,” *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, vol. 22, p. 245, Nov. 1975.
- [6] A. Bogdanov and A. Hubert, “Thermodynamically stable magnetic vortex states in magnetic crystals,” *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, vol. 138, no. 3, pp. 255–269, 1994.
- [7] S. Komineas, C. Melcher, and S. Venakides, “The profile of chiral skyrmions of small radius,” *Nonlinearity*, vol. 33, p. 3395–3408, May 2020.
- [8] A. N. Bogdanov, U. K. Rößler, M. Wolf, and K.-H. Müller, “Magnetic structures and reorientation transitions in noncentrosymmetric uniaxial antiferromagnets,” *Phys. Rev. B*, vol. 66, p. 214410, Dec 2002.
- [9] W. Jiang, P. Upadhyaya, W. Zhang, G. Yu, M. B. Jungfleisch, F. Y. Fradin, J. E. Pearson, Y. Tserkovnyak, K. L. Wang, O. Heinonen, S. G. E. te Velthuis, and A. Hoffmann, “Blowing magnetic skyrmion bubbles,” *Science*, vol. 349, no. 6245, pp. 283–286, 2015.
- [10] W. Jiang, G. Chen, K. Liu, J. Zang, S. G. te Velthuis, and A. Hoffmann, “Skyrmions in magnetic multilayers,” *Physics Reports*, vol. 704, pp. 1–49, 2017. Skyrmions in Magnetic Multilayers.
- [11] S. Mühlbauer, B. Binz, F. Jonietz, C. Pfleiderer, A. Rosch, A. Neubauer, R. Georgii, and P. Böni, “Skyrmion lattice in a chiral magnet,” *Science*, vol. 323, no. 5916, pp. 915–919, 2009.

- [12] C. Back, V. Cros, H. Ebert, K. Everschor-Sitte, A. Fert, M. Garst, T. Ma, S. Mankovsky, T. L. Monchesky, M. Mostovoy, N. Nagaosa, S. S. P. Parkin, C. Pfleiderer, N. Reyren, A. Rosch, Y. Taguchi, Y. Tokura, K. von Bergmann, and J. Zang, “The 2020 skyrmionics roadmap,” *Journal of Physics D : Applied Physics*, vol. 53, p. 363001, jun 2020.
- [13] S. S. P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, “Magnetic domain-wall racetrack memory,” *Science*, vol. 320, no. 5873, pp. 190–194, 2008.
- [14] S. Parkin and S.-H. Yang, “Memory on the racetrack,” *Nature Nanotechnology*, vol. 10, no. 3, pp. 195–198, 2015.
- [15] A. Fert, V. Cros, and J. Sampaio, “Skyrmions on the track,” *Nature Nanotechnology*, vol. 8, no. 3, pp. 152–156, 2013.
- [16] Y. Zhou and M. Ezawa, “A reversible conversion between a skyrmion and a domain-wall pair in a junction geometry,” *Nature Communications*, vol. 5, no. 1, p. 4652, 2014.
- [17] X. Wang, H. Yuan, and X. Wang, “A theory on skyrmion size,” *Communications Physics*, vol. 1, 07 2018.
- [18] P. F. Bessarab, D. Yudin, D. R. Gulevich, P. Wadley, M. Titov, and O. A. Tretiakov, “Stability and lifetime of antiferromagnetic skyrmions,” *Physical Review B*, vol. 99, Apr 2019.
- [19] X. Zhang, Y. Zhou, and M. Ezawa, “Antiferromagnetic skyrmion : Stability, creation and manipulation,” *Scientific Reports*, vol. 6, Apr 2016.
- [20] B. Göbel, A. Mook, J. Henk, and I. Mertig, “Antiferromagnetic skyrmion crystals : Generation, topological hall, and topological spin hall effect,” *Phys. Rev. B*, vol. 96, p. 060406, Aug 2017.
- [21] W. Legrand, D. Maccariello, F. Ajejas, S. Collin, A. Vecchiola, K. Bouzehouane, N. Reyren, V. Cros, and A. Fert, “Room-temperature stabilization of antiferromagnetic skyrmions in synthetic antiferromagnets,” *Nature Materials*, vol. 19, no. 1, pp. 34–42, 2020.
- [22] J. Barker and O. A. Tretiakov, “Static and dynamical properties of antiferromagnetic skyrmions in the presence of applied current and temperature,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 116, p. 147203, Apr 2016.
- [23] T. Dohi, S. DuttaGupta, S. Fukami, and H. Ohno, “Formation and current-induced motion of synthetic antiferromagnetic skyrmion bubbles,” *Nature Communications*, vol. 10, no. 1, p. 5153, 2019.
- [24] Y. Machida, S. Nakatsuji, Y. Maeno, T. Tayama, T. Sakakibara, and S. Onoda, “Unconventional anomalous hall effect enhanced by a noncoplanar spin texture in the frustrated kondo lattice $\text{pr}_2\text{ir}_2\text{o}_7$,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, p. 057203, Jan 2007.
- [25] K. S. Denisov, I. V. Rozhansky, M. N. Potkina, I. S. Lobanov, E. Lähderanta, and V. M. Uzdin, “Topological hall effect for electron scattering on nanoscale skyrmions in external magnetic field,” *Phys. Rev. B*, vol. 98, p. 214407, Dec 2018.

- [26] K. Denisov, I. Rozhansky, N. Averkiev, and E. Lähderanta, “General theory of the topological hall effect in systems with chiral spin textures,” *Physical Review B*, vol. 98, no. 19, p. 195439, 2018.
- [27] K. S. Denisov, I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, and E. Lähderanta, “Electron scattering on a magnetic skyrmion in the nonadiabatic approximation,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 117, p. 027202, Jul 2016.
- [28] K. S. Denisov, “Theory of an electron asymmetric scattering on skyrmion textures in two-dimensional systems,” *Journal of Physics : Condensed Matter*, vol. 32, p. 415302, Jul 2020.
- [29] E. I. Rashba, “Combined resonance in semiconductors,” *Uspekhi fizicheskikh nauk*, vol. 84, no. 4, pp. 557–578, 1964.
- [30] K. Hamamoto, M. Ezawa, and N. Nagaosa, “Quantized topological hall effect in skyrmion crystal,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, p. 115417, Sep 2015.
- [31] G. Tatara, H. Kohno, and J. Shibata, “Microscopic approach to current-driven domain wall dynamics,” *Physics Reports*, vol. 468, p. 213–301, Nov 2008.
- [32] L. Landau, E. Lifchitz, L. Pitaevskii, and B. Vladimir, *Vol 4 - Quantum Electrodynamics*. 1982.
- [33] R. Cheng and Q. Niu, “Electron dynamics in slowly varying antiferromagnetic texture,” *Phys. Rev. B*, vol. 86, p. 245118, Dec 2012.
- [34] R. Cheng and Q. Niu, “Dynamics of antiferromagnets driven by spin current,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, p. 081105, Feb 2014.
- [35] P. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors : Physics and Materials Properties*. Graduate Texts in Physics, Springer Berlin Heidelberg, 2010.
- [36] C. Kittel, *Quantum theory of solids*. New York : Wiley, 1963.
- [37] L. H. Ryder, *Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, 2 ed., June 1996.
- [38] J. C. Tully, *Perspective on "Zur Quantentheorie der Molekeln"*, pp. 173–176. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2001.
- [39] L. D. Landau and L. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics Non-Relativistic Theory, Third Edition : Volume 3*. Butterworth-Heinemann, 3 ed., Jan. 1981.
- [40] T. Moriya, “Anisotropic superexchange interaction and weak ferromagnetism,” *Phys. Rev.*, vol. 120, pp. 91–98, Oct 1960.
- [41] I. Dzyaloshinsky, “A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 4, pp. 241–255, Jan. 1958.
- [42] S. Komineas, C. Melcher, and S. Venakides, “Chiral skyrmions of large radius,” *Physica D : Nonlinear Phenomena*, vol. 418, p. 132842, 2021.
- [43] V. P. Kravchuk, O. Gomonay, D. D. Sheka, D. R. Rodrigues, K. Everschor-Sitte, J. Sinova, J. van den Brink, and Y. Gaididei, “Spin eigenexcitations of an antiferromagnetic skyrmion,” *Phys. Rev. B*, vol. 99, p. 184429, May 2019.

- [44] S. M. Rezende, A. Azevedo, and R. L. Rodríguez-Suárez, “Introduction to antiferromagnetic magnons,” *Journal of Applied Physics*, vol. 126, no. 15, p. 151101, 2019.
- [45] C. Kittel, “Theory of antiferromagnetic resonance,” *Phys. Rev.*, vol. 82, pp. 565–565, May 1951.
- [46] P.-G. De Gennes, *Superconductivity of metals and alloys*. CRC press, 2018.
- [47] S. Gao, H. D. Rosales, F. A. Gómez Albarracín, V. Tsurkan, G. Kaur, T. Fennell, P. Steffens, M. Boehm, P. Čermák, A. Schneidewind, *et al.*, “Fractional antiferromagnetic skyrmion lattice induced by anisotropic couplings,” *Nature*, vol. 586, no. 7827, pp. 37–41, 2020.

Deuxième partie

Étude combinée de familles de liquides de spin classiques

8

Liquides de spin classiques

Contenu du chapitre

| | | |
|------------|--|------------|
| 8.1 | Présentation générale | 129 |
| 8.2 | Modèles usuels | 132 |
| 8.3 | Ordre par le désordre | 134 |

8.1 Présentation générale

On s'intéresse dans ce manuscrit à un état de la matière tout particulier appelé liquide de spin. Ce nom est dû[1, 2, 3, 4] à l'analogie qui peut être faite entre un gaz et la configuration paramagnétique d'un matériau magnétique d'une part, qui correspondent tous deux à des états désordonnés et décorrélés, et entre un solide et la configuration (anti)ferromagnétique généralement adoptée par un matériau magnétique à basse température d'autre part, correspondant à un état figé fortement corrélé. Le liquide de spin correspondrait dans ce cadre à un état intermédiaire, désordonné, dans lequel les spins ne s'ordonnent pas même à très basse température. On verra que, contrairement au cas d'un vrai liquide, la longueur de corrélation associée à un tel état peut être finie mais aussi infinie (au sens où les fonctions de corrélation sont algébriques). Pour capturer l'aspect corrélé de cette phase on parlera parfois d'aimant paramagnétique coopérant ou de phase magnétique coopérante. Ces états particuliers font l'objet de beaucoup d'attention depuis quelques décennies maintenant, de par le challenge fondamental que représente la compréhension de cet état singulier de la matière, et à cause de ses potentielles applications dans la compréhension de la supraconductivité à haute température[1, 2, 4].

Commençons par regarder le cas d'un matériau magnétique usuel, caractérisé par des moments magnétiques microscopiques qui interagissent entre voisins selon un terme d'interaction associé à une amplitude caractéristique J . A haute température $T \gg J$ les fluctuations thermiques produisent un état paramagnétique complètement désordonné.

Lorsque la température du système devient comparable à l'amplitude des interactions entre les moments magnétiques $T \sim J$ on assiste alors généralement en trois dimensions à l'apparition spontanée d'un ordre (anti)ferromagnétique au sein du matériau, où les moments magnétiques s'orientent tous selon un même axe. On peut noter que dans ce cas le système est invariant par rotation autour de cet axe spontanément choisi, mais n'est plus invariant sous n'importe quelle rotation comme l'était l'état paramagnétique de haute température. On parle ainsi de brisure spontanée de symétrie lors du passage de la phase paramagnétique à la phase ordonnée, et on entre dans le cadre général de la théorie des transitions de phase de Ginzburg-Landau[2]. Les systèmes qui nous intéressent ici vont déroger à ce comportement, en refusant de s'ordonner même à des températures comparables avec l'amplitude des interactions internes entre moments magnétiques. Ce comportement est dû à l'existence de frustration au sein du matériau, cette frustration pouvant être due à une compétition entre différentes interactions, où aux propriétés intrinsèques du réseau[4]. Prenons par exemple le cas de spins de Heisenberg (de dimension 3) placés sur un réseau carré, et ayant des interactions antiferromagnétiques entre premiers et second voisins. On a dans ce cas deux types de configurations ordonnées pouvant apparaître à température nulle selon le ratio des amplitudes J_1 et J_2 des couplages entre premiers et second voisins. Dans le cas $2J_1 > J_2$ les interactions entre premier voisins dominent, imposant que les spins voisins soient orientés dans des directions opposées, voir figure 8.1 a). Dans ce cas on voit que les interactions entre second voisins sont frustrées puisque ces derniers sont toujours orientés dans la même direction. Dans le cas $2J_1 < J_2$ c'est l'inverse, ce sont les spins second voisins qui sont orientés selon des directions opposées, et la moitié des interactions entre premiers voisins sont donc frustrées, voir figure 8.1 a). Dans le cas intermédiaire $2J_1 = J_2$ ces deux types de configurations vont avoir la même énergie, et on s'attend donc ici à ce que le système ne puisse pas s'ordonner, alternant localement les différents types de configurations possibles. On peut noter ici que cette configuration requiert un paramétrage fin des deux constantes de couplage J_1 et J_2 , ce qui implique que ce type de systèmes sont peu susceptibles d'être réalisés expérimentalement.

De ce point de vue les réseaux frustrés par essence semblent des candidats plus pertinents. On peut les illustrer en regardant le cas de deux triangles partageant un sommet et abritant ainsi 5 spins de Heisenberg interagissant de manière antiferromagnétique. On voit dans ce cas que la frustration émerge de la structure du réseau en lui même, puisque les spins qui composent un triangle ne peuvent s'orienter de manière antiferromagnétique, puisque si deux de ces spins adoptent une telle configuration, le troisième est nécessairement frustré. Dans une telle situation les trois spins se mettent dans une configuration coplanaire pour laquelle ils forment deux à deux des angles de $2\pi/3$, comme illustré sur la figure 8.1 b). On voit ainsi que lorsqu'on accole deux triangles, si les trois spins de chaque triangle adoptent cette configuration en étoile, alors une rotation autour de l'axe porté par le spin central ne modifie pas la configuration locale de chaque triangle, laissant le système dans une configuration optimale. On en déduit qu'en plus de la symétrie par rotation du système complet il existe une symétrie interne qui laisse l'énergie du système inchangée. Cela signifie que la dégénérescence de

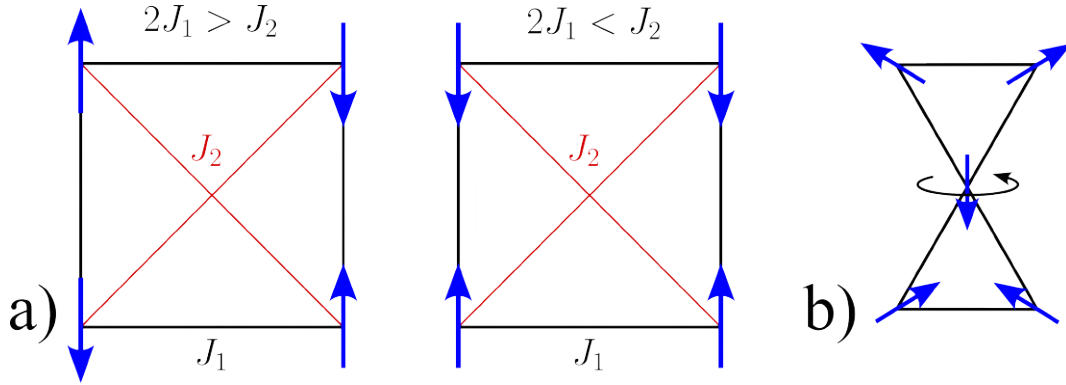


FIGURE 8.1 – a) Modèle $J_1 - J_2$ avec interactions antiferromagnétiques d'amplitude $J_1 > 0$ entre premiers voisins, et $J_2 > 0$ entre second voisins. Les configurations adoptées par les spins dans l'état fondamental dépendent du ratio J_1/J_2 . b) Configurations typiques adoptées par des spins de Heisenberg placés sur deux triangles partageant un coin. Les configurations obtenues en tournant les spins autour de l'axe porté par le spin central appartiennent elles aussi à l'état fondamental.

l'état fondamental pour de tels réseaux frustrés peut être plus grande que ce que laisse penser le groupe de symétrie associé au hamiltonien.

Ce concept général de frustration amène à caractériser les matériaux susceptibles d'accueillir des liquides de spins de la manière suivante. L'inverse de la susceptibilité magnétique varie linéairement[1, 2, 4] en fonction de la température

$$\chi^{-1} \propto T - \Theta_{CW} \quad (8.1)$$

avec une ordonnée à l'origine Θ_{CW} , appelée constante de Curie-Weiss qui caractérise la force et le signe des interactions magnétiques, étant positive (négative) pour un matériau (anti)ferromagnétique à trois dimensions. Là où, pour un matériau usuel, la susceptibilité magnétique présente une singularité à une température de l'ordre de Θ_{CW} , elle peut demeurer régulière dans le cadre d'un matériau frustré jusqu'à des températures bien inférieures à ce seuil. Si on note pour de tels matériaux T_c la température où le système finit par geler¹, alors un ratio

$$f \equiv \frac{|\Theta_{CW}|}{T_c} \quad (8.2)$$

grand devant l'unité est un bon indicateur de la frustration, et donc des matériaux susceptibles de faire émerger des liquides de spin. La phase magnétique coopérante sera dans ce cas rencontrée pour des températures T telles que $T_c < T \ll \Theta_{CW}$ pour lesquelles les effets de la frustration sont maximaux.

1. Cela peut être dû à des interactions non prises en compte dans des modèles de Heisenberg[4], ou à un phénomène d'ordre par le désordre, discuté plus loin.

8.2 Modèles usuels

On se propose maintenant de se concentrer un peu plus en détail sur des modèles faciles à manipuler, généralisant l'exemple ci dessus des deux triangles, et présentant donc les propriétés recherchées pour abriter des liquides de spins. On se concentre ici sur des modèles comportant des groupes de spins de Heisenberg, interagissant entre eux selon une unique constante de couplage. Ces groupes de spins sont arrangés de telle sorte à ce que deux groupes voisins partagent un unique spin. On peut citer à deux dimensions le réseau de kagomé et le damier, ainsi que le pyrochlore à trois dimensions, tous trois représentés sur la figure 8.2.

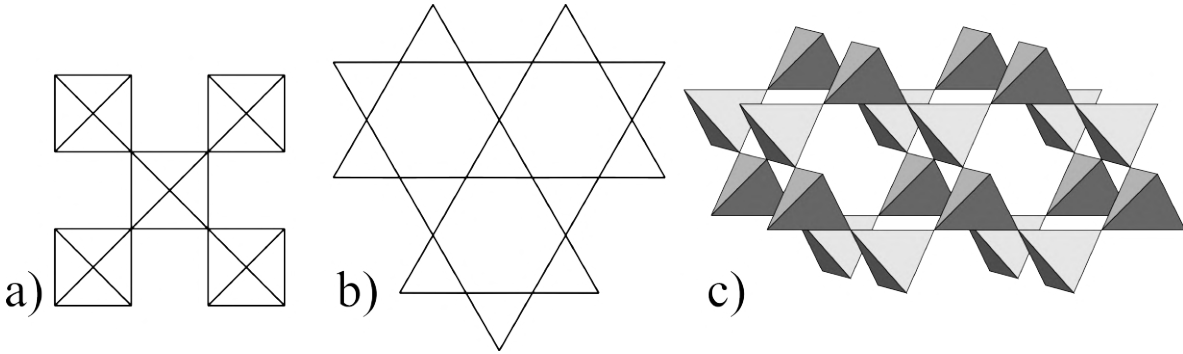


FIGURE 8.2 – a) Réseau du damier, chaque groupe de spin est un carré comportant 4 spins interagissant tous avec la même force. b) Réseau de kagomé, pouvant être vu comme des triangles se touchant par les sommets où chaque spin appartient à deux triangles seulement. c) Réseau du pyrochlore, composé de tétraèdres se touchant par les sommets.

La particularité de ces systèmes est que le hamiltonien

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \frac{J}{2} \sum_p \mathcal{S}_p^2 + C \quad (8.3)$$

peut être réécrit sous la forme d'une somme sur les groupes de spins (indexés par l'indice p) du spin total de chacun ces groupes de spin défini comme

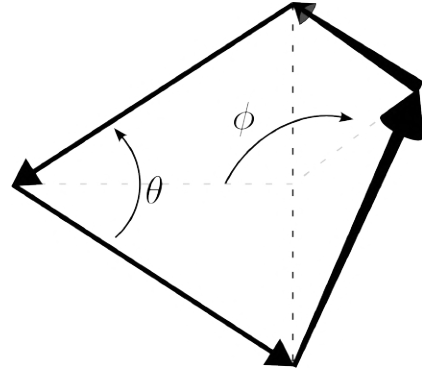
$$\mathcal{S}_p \equiv \sum_{i \in p} \mathbf{S}_i. \quad (8.4)$$

Cette réécriture est possible puisque le carré du spin total d'un groupement de spin se développe comme

$$\mathcal{S}_p^2 = \sum_{i \neq j \in p} 2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \sum_i \mathbf{S}_i^2, \quad (8.5)$$

on voit ainsi que les premiers termes correspondent aux termes d'interactions entre spins voisins au sein du groupe de spin, et que la deuxième somme est simplement une constante.

Cette structure bien particulière du hamiltonien impose que dans l'état fondamental chaque groupe de spin ait un spin total nul. Cela signifie que le hamiltonien aura, en plus de la symétrie de rotation globale, des degrés de liberté internes à chaque groupe de spin. On a par exemple illustré à droite les deux degrés de liberté angulaire qui existent pour un groupe de quatres spins, on peut changer les angles θ et ϕ sans impacter la condition $\mathcal{S} = 0$ imposée sur ce groupe de spins.



L'existence de ces degrés de liberté supplémentaires suppose, dans le cas d'un réseau étendu comportant un grand nombre de groupes de spins, un nombre de degré de liberté extensif. On peut clarifier cette idée en essayant de compter le nombre de degrés de liberté en fonction de la taille du système. Considérons que le système possède un nombre N_p de groupes de spins, contenant chacun q spins. On considère de plus que chacun de ces spins appartient simultanément à un nombre b de groupes. Dans ce cas on a un nombre total de spins dans le système qui vaut $N = \frac{q}{b}N_p$. Si on considère maintenant le cas le plus général de spins normés à n dimensions, on a $n - 1$ degrés de liberté par spin, et donc $N(n - 1)$ degrés de liberté au total. Puisque pour chaque groupe on a une condition $\mathcal{S}_p = 0$ impliquant un vecteur à n composantes, on a un nombre total de contraintes valant $N_p n$. On a donc finalement un nombre de degrés de liberté total demeurant libre qui s'exprime comme

$$D = N(n - 1) - N_p n = \left(\frac{q}{b}(n - 1) - n \right) N_p \quad (8.6)$$

qui se trouve être proportionnel au nombre de groupes de spins dans le système, ce qui signifie donc qu'il est **extensif**. La quantité pertinente utilisée dans la suite du manuscrit sera le nombre de degrés de liberté effectifs par groupe de spin qui s'écrit donc

$$F = \frac{q}{b}(n - 1) - n \quad (8.7)$$

On voit par exemple que dans le cas décrit plus haut de spins de Heisenberg placés sur le damier, on a $n = 3$, $q = 4$ et $b = 2$ ce qui implique qu'il y a $F = 1$ degré de liberté par carré de spin. Cela peut sembler en contradiction avec l'image donnée plus haut pour un groupe de 4 spins qui suggère que $F = 2$, mais cette image est valable pour un groupe de spins isolé. Elle ne prend donc pas en compte le fait que pour le damier chacun des quatre spin appartient aussi à une autre plaquette de spin, augmentant la contrainte qui pèse sur lui, diminuant ainsi le nombre de degrés de liberté par plaquette.

L'existence de degrés de libertés associés à chaque groupe de spins suggère que le système peut se réorganiser localement sans coût énergétique. Le fait que le système ait un nombre extensif de degrés de libertés continus indique que l'ensemble des états fondamentaux possède lui aussi une dimension extensive. Il faut faire attention ici aux

limites de l'argument présenté ci dessus, qui suppose implicitement que les contraintes portant sur chaque groupe de spins son indépendantes les unes des autres. Ce n'est pas toujours le cas, et il existe parfois des configurations échappant à ce décompte, qui permettent cependant une réorganisation sans coût énergétique et conduisent elles aussi à un nombre de degrés de liberté extensif. C'est par exemple le cas du réseau de kagomé pour lequel le décompte ci dessus donne $F = 0$ mais qui abrite tout de même un nombre extensif $D = N_s/9$ de modes 0, faisant intervenir plusieurs triangles simultanément. On peut conclure que le calcul ci dessus donne un **minimum** du nombre de degrés de liberté par plaquette, et demeure généralement un très bon indicateur du degré de dégénérescence de l'état fondamental.

8.3 Ordre par le désordre

La dégénérescence macroscopique décrite plus haut permet d'offrir une explication naturelle au désordre qui est caractéristique des liquides de spin. Cette dégénérescence est cependant quelque peu accidentelle au sens où elle n'est induite par aucune symétrie inhérente au système. Puisque cette dégénérescence n'est donc protégée par aucune symétrie, elle est sujette à être perturbée ou même détruite par les fluctuations thermiques. Ce phénomène est couramment appelé ordre par le désordre[5, 1, 4, 2].

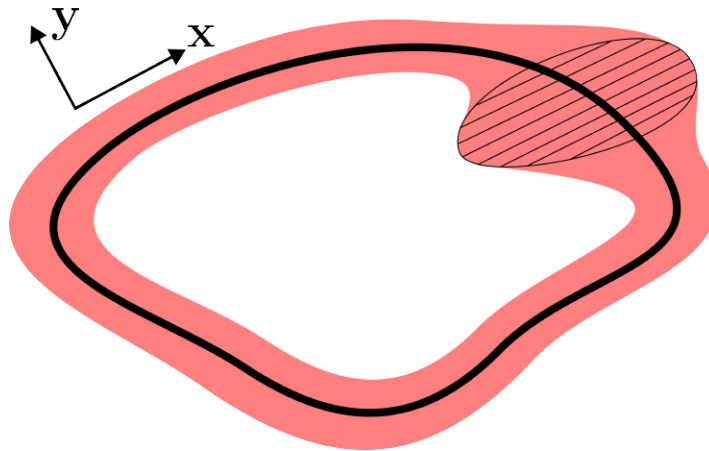


FIGURE 8.3 – Illustration de l'ensemble des états fondamentaux en noir. La surface occupée par le système dans l'espace des phases à température finie est représentée en couleur. La coordonnée x est prise le long de l'ensemble des états fondamentaux tandis que la coordonnée y est prise transverse à cet ensemble.

Cet effet peut être illustré en utilisant la représentation donnée sur la figure 8.3 où l'ensemble des états fondamentaux est représenté par un contour noir, tandis que la surface de l'espace des phases accessible à température non nulle est donnée en couleur. La région de l'espace hachurée est la région susceptible d'être sélectionnée par les fluctuations thermique à basse température. Si on prend une coordonnée x parcourant

l'ensemble des états fondamentaux² et une autre coordonnée \mathbf{y} orthogonale à cet ensemble³ alors on peut naturellement obtenir une distribution de probabilités le long de cet ensemble en intégrant les petites fluctuations selon \mathbf{y} . On obtient explicitement en notant $\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ que cette distribution de probabilité s'écrit[1, 4]

$$\mathcal{Z}(\mathbf{x}) = \int \mathcal{D}\mathbf{y} e^{-\beta\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{y})} \propto \prod_k \frac{k_B T}{\omega_k(\mathbf{x})}. \quad (8.8)$$

Pour obtenir l'expression de droite on a réalisé un développement harmonique de l'énergie $\mathcal{H}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ vis à vis des coordonnées y en supposant que ces dernières consistent en paires de coordonnées généralisées canoniques conjuguées analogues à la position et à l'impulsion. Cette expression indique qu'il y a deux situations possibles, si les excitations transverses le long de l'ensemble des états fondamentaux sont toutes harmoniques et comparables, alors l'ensemble de l'état fondamental va être parcouru même à très basse température. Si par contre un sous ensemble de l'état fondamental possède des excitations transverses qui ne sont pas harmoniques mais d'ordre supérieur, alors ce sous ensemble peut se voir sélectionné par les fluctuations thermiques. Cette situation est illustrée sur la figure 8.3 via la sous région hachurée de l'espace des phases. À cet endroit l'espace transverse exploré dû aux fluctuations thermiques est plus conséquent qu'ailleurs, et la sous région correspondante de l'état fondamental est donc sujette à être sélectionnée à basse température.

Il existe de nombreux exemples de systèmes[1, 4] sujets à ce phénomène d'ordre par le désordre, on pourra par exemple citer le cas du réseau de kagomé[6] où les configurations coplanaires sont sélectionnées car elles présentent des fluctuations quartiques contrairement aux autres configurations qui présentent des déviations "standards" quadratiques.

La présence de modes mous et d'ordre par le désordre peut être notamment identifiée en utilisant des simulations de Monte Carlo. La chaleur spécifique par spin C_v obtenue à très basse température avec de telles simulations permet en effet de détecter la présence de modes mous. Une généralisation simple du principe d'équipartition[1] montre si l'énergie \mathcal{H} dépend de la coordonnée θ suivant un mode de la forme $\mathcal{H} \sim |\theta|^m$ alors cela implique une contribution de ce mode à la chaleur spécifique par spin C_v valant k_B/m . Suivant cet argument on s'attend pour des modèles classiques de spins à n dimensions, qui sont sujet à n contraintes par plaquette et ayant q/b spins par plaquette à avoir une

2. On aurait par exemple dans le cas discuté plus haut d'un groupe isolé de quatre spins un ensemble d'état fondamentaux qui peut être assimilé à un taure, parcouru par les deux angles θ et ϕ qui demeurent libres dans l'état fondamental (on met de côté les 3 angles correspondants aux rotations du système entier). La coordonnée \mathbf{x} serait donc dans ce cas $\mathbf{x} = (\theta, \phi)^t$.

3. Toujours avec le même exemple d'un groupe de quatre spins, \mathbf{y} encode les déviations angulaires des quatre spins par rapport à l'un des états fondamentaux. Puisqu'il y a 3 contraintes imposées par la condition $\mathcal{S} = 0$, alors \mathbf{y} est de dimension 3.

chaleur spécifique par spin qui s'exprime comme

$$C_v = \frac{b}{q} n \frac{1}{2} \quad (8.9)$$

en unités de k_B à basse température si toutes les fluctuations sont quadratiques. Si la valeur observée pour la limite à basse température de la chaleur spécifique obtenue via une simulation de Monte Carlo est inférieure à cette valeur alors cela indique l'existence de modes mous.

Pour le réseau de kagomé avec des spins de Heisenberg par exemple on peut montrer[6] que seuls cinq sixième des modes sont quadratiques, quand le sixième restant sont quartiques. Dans cette situation la chaleur spécifique par spin vaut $C_v = \frac{5}{6} \frac{1}{2} + \frac{1}{6} 14 = \frac{11}{12}$ en unités de k_B . Cette diminution de la chaleur spécifique par spin attendue s'accompagne du fait que le système se restreint à basse température aux configurations coplanaires qui correspondent aux modes quartiques.

Cette introduction générale nous a permis de mieux identifier ce qu'est un liquide de spin classique et d'avoir un aperçu de la phénoménologie associée. On peut mentionner le fait qu'il existe un domaine entier et très large dédié à l'étude quantique des liquides de spins, pouvant faire l'objet à lui seul d'une introduction. L'étude réalisée ici se cantonne aux liquides de spin classiques, proposant une phénoménologie déjà très riche, et on n'entrera donc pas dans les détails des liquides de spin quantiques.

On se tourne maintenant vers la présentation des méthodes et théories effectives qui seront utilisées tout au long de ce manuscrit pour identifier et caractériser les liquides de spin étudiés.

9

Méthodes et théories utilisées

Ce chapitre présente une partie des méthodes analytiques et numériques qui seront utilisées dans ce manuscrit pour étudier les liquides de spin classiques. Ce chapitre se concentre sur les méthodes standards de la littérature, très générales et fréquemment utilisées dans l'étude des liquides de spin classiques. On y présente l'approximation de Luttinger Tisza, la connexion entre loi de Gauss et corrélations dipolaires, et les simulations de Monte Carlo appliquées aux systèmes de spins en interaction.

Contenu du chapitre

| | | |
|------------|--|------------|
| 9.1 | Approximation de Luttinger Tisza | 137 |
| 9.2 | Lois de Gauss et liquides de spin algébriques | 140 |
| 9.3 | Simulations de Monte Carlo | 144 |

9.1 Approximation de Luttinger Tisza

On se propose dans cette section de discuter l'approximation dite de Luttinger Tisza[7], que l'on va utiliser tout au long de ce manuscrit. Cette approximation est très utile lorsqu'on veut étudier des systèmes comprenant N spins classiques en interaction, décrits par des hamiltoniens de type Heisenberg

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (9.1)$$

où la somme se fait sur les différents sites appartenant au réseau considéré. Ce hamiltonien est associé à la contrainte que chaque spin classique a une norme fixée

$$\|\mathbf{S}_i\|^2 = S_i^2 \quad \forall i = 1, \dots, N. \quad (9.2)$$

Cette contrainte peut généralement se reformuler en absorbant ces normes dans les coefficients de la matrice d'interaction J_{ij} selon $\tilde{J}_{ij} = J_{ij} S_i S_j$, tel qu'on ait toujours un hamiltonien

$$H = \sum_{ij} \tilde{J}_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (9.3)$$

mais cette fois associé à la contrainte

$$\|\mathbf{S}_i\| = 1, \quad \forall i = 1, \dots, N. \quad (9.4)$$

L'objectif est maintenant de trouver l'état fondamental $\mathbf{S}_0 = \{\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_N\}$ d'un tel système, qui minimise le hamiltonien (9.3) tout en respectant les N contraintes (9.4). Cela peut être fait en théorie en utilisant la méthode des multiplicateurs de Lagrange, correspondant ici à minimiser la fonction

$$\mathcal{L}[\mathbf{S}_i, \lambda_i] = \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_i \lambda_i [\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i - 1] \quad (9.5)$$

par rapport à l'ensemble des spin $\{\mathbf{S}_i\}$ et l'ensemble des paramètres de Lagrange $\{\lambda_i\}$. Trouver les paramètres $\{\mathbf{S}_i^0\}$ et $\{\lambda_i^0\}$ qui minimisent \mathcal{L} revient ainsi à trouver l'état fondamental du système. Cela implique cependant de résoudre $4N$ équations ayant $4N$ variables, ce qui n'est pas raisonnable dans le cas d'un système macroscopique où $N \sim 10^{23}$. L'approximation ou méthode de Luttinger Tisza consiste[7] donc ici à réduire l'ensemble des contraintes (9.4) à une unique contrainte

$$\sum_{\mu} \sum_i \alpha_{\mu}^2 \|\mathbf{S}_i^{\mu}\|^2 = N_m \sum_{\mu} \alpha_{\mu}^2, \quad (9.6)$$

induite par les contraintes initiales (9.4). L'indice μ désigne ici le sous réseau auquel appartient le spin \mathbf{S}_i^{μ} , la somme sur l'indice i se fait sur l'ensemble des mailles du réseau et N_m désigne le nombre de maille contenues dans le réseau. Cette condition, beaucoup plus souple que l'ensemble des contraintes initiales, correspond physiquement à autoriser les amplitudes des spins du système à varier, tant que la somme pondérée des normes de tous les spins demeure elle bien constante. Dans ce cas la fonction à minimiser se réduit à

$$\mathcal{L}[\mathbf{S}_i, \lambda] = \sum_{\mu i, \nu j} J_{\mu i, \nu j} \mathbf{S}_i^{\mu} \cdot \mathbf{S}_j^{\nu} - \lambda \sum_{\mu} \left[\sum_i \alpha_{\mu}^2 \|\mathbf{S}_i^{\mu}\|^2 - N_m \alpha_{\mu}^2 \right], \quad (9.7)$$

impliquant, lorsqu'on la minimise selon les spins \mathbf{S}_i^{μ} , les équations

$$\sum_{\nu j} J_{\mu i, \nu j} \mathbf{S}_j^{\nu} = N_m \lambda \alpha_{\mu}^2 \mathbf{S}_i^{\mu}. \quad (9.8)$$

On voit qu'en définissant la matrice

$$K_{\mu i, \nu j} = \alpha_{\mu}^{-1} J_{\mu i, \nu j} \alpha_{\nu}^{-1} \quad (9.9)$$

et en notant $\mathbf{P}_i^{\mu} = \alpha_{\mu} \mathbf{S}_i^{\mu}$ le système d'équation se résume simplement à

$$\sum_{\nu j} K_{\mu i, \nu j} \mathbf{P}_j^{\nu} = N_m \lambda \mathbf{P}_i^{\mu}, \quad (9.10)$$

soit l'équation aux valeurs propres de la matrice \mathbf{K} . Ce système peut être généralement être résolu pour les réseaux réguliers en utilisant l'invariance par translation de \mathbf{J} , et donc de \mathbf{K} selon les translations du réseau,

$$K_{\mu i, \nu j} = K_{\mu\nu}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j). \quad (9.11)$$

Cette propriété permet en effet de passer dans l'espace réciproque en considérant la décomposition de Fourier des spins,

$$\mathbf{S}_i^\mu = \frac{1}{N_m} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_{i\mu}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^\mu, \quad \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^\mu = \sum_i e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_{i\mu}} \mathbf{S}_i^\mu \quad (9.12)$$

et en notant naturellement

$$\mathbf{P}_{\mathbf{q}}^\mu = \alpha_\mu \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^\mu. \quad (9.13)$$

La condition faible (9.6) devient ainsi

$$\sum_{\mu, \mathbf{q}} \mathbf{P}_{\mathbf{q}}^\mu \cdot \mathbf{P}_{-\mathbf{q}}^\mu = \frac{1}{N_m} \sum_{\mu} \alpha_\mu^2 \quad (9.14)$$

tandis que l'équation aux valeurs propres (9.10) devient

$$\sum_{\mu} M_{\mu\nu}(\mathbf{q}) \mathbf{P}_{\mathbf{q}}^\nu = \lambda N_m \mathbf{P}_{\mathbf{q}}^\mu \quad (9.15)$$

où

$$M_{\mu\nu}(\mathbf{q}) = (\alpha_\mu \alpha_\nu)^{-1} \sum_{\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_{i\mu} - \mathbf{R}_{j\nu})} J_{\mu\nu}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j). \quad (9.16)$$

On voit donc ici que grâce à l'approximation de Luttinger Tisza et les propriétés d'invariance du système on se retrouve finalement avec une simple équation aux valeurs propres, où la matrice \mathbf{M} a pour dimension le nombre de sous réseaux du système qui est a priori petit. On voit donc que le problème se voit considérablement simplifié. Puisque le hamiltonien se réécrit quant à lui dans l'espace réciproque comme

$$H = \frac{1}{N_m} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mathbf{q}} M_{\mu\nu}(\mathbf{q}) \mathbf{P}_{\mathbf{q}}^\mu \cdot \mathbf{P}_{-\mathbf{q}}^\nu \quad (9.17)$$

on a que pour les configurations satisfaisant (9.15) l'énergie associée s'écrit

$$\mathcal{E} = \lambda \sum_{\mu} \alpha_\mu^2 \quad (9.18)$$

où on utilisé la relation faible (9.14). Pour que la configuration solution de l'équation (9.15) conduisant à cette énergie soit valable il faut qu'il existe un set de coefficients $\{\alpha_\mu\}$ tel que cette configuration satisfasse aussi à la contrainte forte (9.4). Pour les réseaux de Bravais[7] on a un unique coefficient $\alpha = 1$, et on peut montrer[7] que dans ce cas la configuration de plus basse énergie satisfait toujours la contrainte forte (9.4).

Dans le cas où il existe différents sous réseaux équivalents il est pertinent de considérer le même coefficient pour chacun de ces sous réseaux, et dans le cas où tous les sous réseaux sont équivalents on pourra notamment prendre $\alpha_\mu = 1$ pour chaque sous réseau. Cette situation est celle rencontrée dans les trois exemples traités dans ce manuscrit. Il est important de noter qu'en dehors des réseaux de Bravais, il n'y a pas de raison a priori que la méthode fonctionne, c'est à dire que les configurations obtenues grâce à la contrainte faible puissent aussi satisfaire à la contrainte forte. Si la méthode échoue alors dans ce cas on peut tout de même se consoler en remarquant que l'énergie ainsi trouvée, puisque obtenue en explorant un espace de paramètres plus grand (puisqu'en considérant une contrainte plus faible), correspond à une borne inférieure pour l'énergie.

Cette approximation peut être étendue à l'étude de la structure de bande du système de spin. En effet pour les systèmes invariants par translation le passage dans l'espace réciproque permet de diagonaliser facilement le hamiltonien comme on a pu le voir via sa réécriture (9.17). Le passage dans l'espace réciproque ne peut cependant se faire qu'en relaxant la contrainte locale sur la norme des spins à une contrainte globale. En ce sens l'approximation de Luttinger est tout indiquée pour traiter les systèmes invariants par translation. Le fait d'avoir ignoré la contrainte forte implique cependant que la structure de bande obtenue ne soit qu'approximative du point de vue classique. L'avantage de la méthode est que laisser varier l'amplitude des spins classiques permet en un sens de prendre en compte leurs fluctuations[8], laissant varier localement l'amplitude des spins classiques tout en gardant leur amplitude moyenne fixée. On sait de plus que considérer des spins classiques correspond à supposer les fonctions d'onde de chaque moments magnétiques localisées sur leur site, sans recouvrement, et l'énergie fondamentale du hamiltonien classique donne donc une borne supérieure à l'énergie du hamiltonien quantique correspondant. Les bandes d'énergie trouvées en utilisant l'approximation de Luttinger Tisza, correspondant à des bornes inférieures pour le hamiltonien classique, se révèlent donc souvent une bonne estimation préliminaire et permettent d'avoir une première vue de la structure globale. Pour aller plus loin il faudra ensuite mettre en place des techniques plus sophistiquées pour raffiner la structure de bande préalablement établie dans l'approximation de Luttinger Tisza.

Lorsqu'on se référera dans ce manuscrit à l'approximation de Luttinger Tisza on réalisera en pratique une diagonalisation du hamiltonien dans l'espace réciproque, en relaxant de manière implicite la contrainte sur la norme locale des moments magnétiques.

9.2 Lois de Gauss et liquides de spin algébriques

On présente maintenant une construction de théorie des champs permettant, pour des spins classiques, d'identifier à l'aide d'un champ continu, de potentielles corrélations à longue portée entre ces spins. Ce type de construction a été initialement introduite

par Henley[9, 10] pour expliquer l'apparition de corrélations dipolaires dans les glaces de spin, correspondant à des spins d'Ising placé sur le réseau du pyrochlore. Ce type de construction a ensuite pu être généralisé à des systèmes de spins de Heisenberg[9, 10].

On considère ici un réseau quelconque, que l'on prend bidimensionnel pour se focaliser sur les cas présentés dans ce manuscrit, mais le raisonnement peut être fait à l'identique pour un système à trois dimensions. On place sur ce réseau des spins de Heisenberg classiques, et on cherche maintenant à comprendre comment l'existence d'une théorie des champs ayant une symétrie $U(1)$ locale va impliquer l'existence de corrélations dipolaires pour les spins de ce système. Supposons qu'il est possible de construire à partir de ces spins un champ qui possède les propriétés d'un champ magnétique. Ce champ, appelé tenseur de polarisation, doit en particulier satisfaire une loi de Gauss[9, 10]

$$\partial_i E_i^\alpha = 0 \quad (9.19)$$

pour chaque composante de spin $\alpha = x, y, z$.

On se penche maintenant sur l'action effective de basse énergie associée à ce champ. Dans la limite d'une température nulle la physique de basse énergie sera encodée[11] dans une fonctionnelle énergie de type Maxwell

$$F = \frac{\kappa}{2} \int d^2r \sum_{i,\alpha} [E_i^\alpha(\mathbf{r})]^2, \quad (9.20)$$

cette fonctionnelle étant la plus simple qu'on puisse formuler puisqu'elle ne comporte que des termes quadratiques. On peut maintenant argumenter que la structure de cette fonctionnelle demeure essentiellement la même à température non nulle. En effet on s'intéresse ici à des systèmes hébergeant des liquides de spin, présentant donc un fort désordre intrinsèque, ou autrement dit possédant une dégénérescence extensive de l'état fondamental. Dans de telles circonstances il est raisonnable de penser, que lorsque la température va augmenter les effets entropiques vont rapidement dominer, puisque l'entropie d'un système très désordonné sera intrinsèquement grande a priori. Cela implique une énergie libre de la forme $F \sim -TS$, où il nous faut maintenant relier l'entropie avec le champ de polarisation. Pour cela il faut tout d'abord remarquer que si le système possède une ligne de flux fermée, une réorganisation des spins le long de cette ligne de flux peut se faire sans coût énergétique, pour peu que cette réorganisation se fasse tout au long de la ligne, cette dernière devant demeurer fermée. On en déduit que pour un tenseur de polarisation donné, plus il existe de boucles de flux fermées de petites tailles, plus il existe de reconfigurations possibles qui ne changent pas la structure du champ de polarisation. En effet le champ de polarisation peut être vu comme une limite gros grain d'un champ sur réseau, et ne ressent donc pas les réorganisation locales des boucles de flux. On a de plus que l'existence de nombreuses boucles de flux diminue l'amplitude du champ de polarisation. On en déduit finalement qu'afin de maximiser l'entropie il faut minimiser l'amplitude du champ de polarisation. Cela implique une énergie libre qui s'exprime en première approximation comme[9, 10, 11]

$$F = \frac{\kappa'}{2} \int d^2r \sum_{i,\alpha} [E_i^\alpha(\mathbf{r})]^2, \quad (9.21)$$

à une constante additive près. On observe que dans les deux cas on se retrouve avec une énergie qui est analogue à celle obtenue en électromagnétique comme une fonction du champ électrique ou magnétique, associé à une loi de Gauss avec une charge nulle. On a donc une théorie effective qui est analogue à celle obtenue en électromagnétisme pour un champ magnétique ou un champ électrique en absence de charges.

On va maintenant montrer pourquoi une telle structure impose des corrélations dipolaires à longue portée pour le champ effectif de la théorie, ici appelé tenseur de polarisation. On expliquera ensuite comment de telles corrélations pour le tenseur de polarisation impliquent à leur tour des corrélations similaires pour les spins classiques à partir desquels on a construit le tenseur de polarisation.

On part de l'une des fonctionnelles énergies (9.20) ou (9.21) associée à la loi de Gauss (9.19). La fonctionnelle énergie F impose que la densité de probabilité associée à la composante \mathbf{E}^α du tenseur soit proportionnelle à

$$P\{\mathbf{E}^\alpha(\mathbf{r})\} \propto e^{-\beta F[\mathbf{E}^\alpha(\mathbf{r})]}. \quad (9.22)$$

De son côté la loi de Gauss impose que les configurations du tenseur \mathbf{E}^α satisfassent cette équation de Gauss, ce qui se traduit par

$$P\{\mathbf{E}^\alpha(\mathbf{r})\} \propto \prod_{\mathbf{r}} \delta(\nabla \cdot \mathbf{E}^\alpha(\mathbf{r})). \quad (9.23)$$

On en déduit finalement que la densité de probabilité doit être proportionnelle à

$$P\{\mathbf{E}^\alpha(\mathbf{r})\} \propto e^{-\beta F[\mathbf{E}^\alpha(\mathbf{r})]} \prod_{\mathbf{r}} \delta(\nabla \cdot \mathbf{E}^\alpha(\mathbf{r})). \quad (9.24)$$

Dans l'espace réciproque les fonctionnelles énergies peuvent être mises sous la forme

$$F = \frac{\kappa}{2} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{i,\alpha} [E_i^\alpha(\mathbf{q})]^2 \quad (9.25)$$

impliquant a priori, selon le théorème de l'équipartition, que les fonctions de corrélations du tenseur de polarisation s'expriment comme

$$\langle E_i^\alpha(-\mathbf{q}) E_j^\beta(\mathbf{q}) \rangle \sim \frac{1}{\kappa} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}. \quad (9.26)$$

Cependant la loi de Gauss (9.19) se traduit dans l'espace réciproque sous la forme

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{E}^\alpha(\mathbf{q}) = 0 \quad (9.27)$$

pour les trois composantes de spin $\alpha = x, y$ et z . Cela impose qu'il n'y ait pas de fluctuations longitudinales, autrement dit on doit avoir

$$q^i \langle E_i^\alpha(-\mathbf{q}) E_j^\beta(\mathbf{q}) \rangle = 0. \quad (9.28)$$

On en déduit que les fonctions de corrélation du tenseur de polarisation doivent être projetées dans l'espace orthogonal au vecteur d'onde, soit,

$$\langle E_i^\alpha(-\mathbf{q})E_j^\beta(\mathbf{q}) \rangle \propto \delta_{\alpha\beta} \left(\delta_{ij} - \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{q}\|^2} \right). \quad (9.29)$$

Cela correspond dans l'espace réel à des corrélations algébriques[9, 10, 11]

$$\langle E_i^\alpha(0)E_j^\beta(\mathbf{r}) \rangle \propto \delta_{\alpha\beta} \left[\delta(\mathbf{r}) + \frac{1}{r^2} (\delta_{ij} - 2\tilde{r}_i \tilde{r}_j) \right] \quad (9.30)$$

où $\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$. Puisque dans la pratique le tenseur de polarisation est construit à partir de flux étant eux même composés de spins, on peut raisonnablement supposer[10, 11] que les versions gros grains des spins sont exprimables à partir du tenseur de polarisation comme

$$\mathbf{S}_n(\mathbf{r}) = \sum c_{ni}(\mathbf{r})E_i(\mathbf{r}) \quad (9.31)$$

où l'indice n réfère au sous réseau auquel appartient le spin \mathbf{S}_n . Le tenseur c_{ni} , symétrique, est déterminé par les symétries du réseau considéré. Les fonctions de corrélation spin-spin vont être ainsi des sommes pondérées des différentes fonctions de corrélation du tenseur de polarisation

$$\langle S_m^\alpha(0)S_n^\beta(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{i,j} c_{mi}(\mathbf{r})c_{nj}(\mathbf{r})\langle E_i^\alpha(0)E_j^\beta(\mathbf{r}) \rangle. \quad (9.32)$$

On en déduit donc finalement que lorsqu'il est possible de construire un tenseur de polarisation de divergence nulle et suivant une fonctionnelle énergie du genre Maxwell, alors on aura des corrélations spin-spin algébriques, caractéristiques des liquides de spin à longue portée.

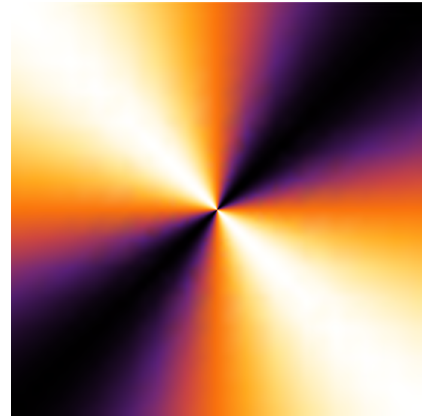
Cela implique notamment que le facteur de structure

$$\mathbb{S}(\mathbf{q}) = \sum_{\alpha} \sum_{mn} \langle S_m^\alpha(-\mathbf{q})S_n^\alpha(\mathbf{q}) \rangle, \quad (9.33)$$

aura nécessairement localement la forme

$$\mathbb{S}(\mathbf{Q} + \mathbf{q}) \sim \alpha + \beta \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{q}\|^2} \quad (9.34)$$

avec α et β deux constantes réelles, et où la position \mathbf{Q} des points singuliers est définie[10] par les propriétés du tenseur $c_{ni}(\mathbf{r})$. Cette fonction singulière possède une structure bien particulière, où la limite en $\|\mathbf{q}\| \rightarrow 0$ dépend de la direction selon laquelle on s'approche. Cela produit ainsi des "points de pincement" en forme de papillon dans la zone de Brillouin, comme illustré à droite.



L'observation de tels points de pincement se révèle ainsi être une signature des liquides de spin algébriques. La position de ces points de pincement, dépendant notamment du réseau considéré, permet de classifier les différents types de liquides de spin algébriques.

9.3 Simulations de Monte Carlo

Les différents exemples présentés dans ce manuscrit seront d'une part traité dans le cadre de l'approximation de Luttinger Tisza, et pourront, dans le cas de liquides de spin algébrique, faire l'objet de la construction d'une théorie de jauge $U(1)$ correspondant au formalisme donné ci dessus. Cette étude analytique sera de plus associée, comme on le verra plus tard, à l'étude d'un autre objet, appelé vecteur de contrainte, caractérisé seulement récemment dans la littérature[12]. Ces méthodes d'analyses sont toutes les trois analytiques, et il apparaît donc pertinent d'avoir une approche complémentaire, plus proche de l'expérience. Les simulations de Monte Carlo entrent dans ce cadre au sens où pour un hamiltonien donné les résultats de ces simulations nous permettent de voir quelle est la physique émergente d'un hamiltonien, brute et sans trop d'enjolivement liés aux approximations qui vont de paire avec les méthodes analytiques. Cela nous permettra en particulier de pouvoir observer le comportement du système à température finie.

Les simulations de Monte Carlo présentées ici sont réalisées en utilisant l'algorithme de Metropolis combiné à une surrelaxation, et en abaissant la température dans un schéma de recuit. La température T est toujours exprimée en unités du couplage ayant la valeur absolue la plus élevée pour chaque ensemble particulier de paramètres. Le système est thermalisé pendant plus de 10^5 pas de Monte Carlo, et les mesures sont prises pendant deux fois plus de pas de Monte Carlo. Les systèmes simulés comportent un nombre $N = n_0 L^2$ de spins, où n_0 est le nombre de sites dans la cellule unitaire¹, et L est la taille linéaire du système, qui est prise égale à $L = 24$ ou $L = 60$ selon le cas traité.

Afin de rechercher d'éventuelles signatures de liquides de spin, deux quantités sont mesurées : la chaleur spécifique par spin C_v , et le facteur de structure statique défini comme

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sqrt{\left\langle \left| \sum_j \mathbf{S}_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \right|^2 \right\rangle}. \quad (9.35)$$

Ce facteur de structure pourra notamment être comparé avec le facteur de structure que l'on peut construire à température nulle à l'aide du vecteur de contrainte, comme explicité plus loin. On peut de plus noter que les facteurs de structure obtenus se prêtent a priori à une comparaison avec les facteurs de structures obtenus expérimentalement

1. Les deux réseaux traités dans ce manuscrit correspondent à $n_0 = 2$ pour le damier et $n_0 = 3$ pour le kagomé.

par diffusion de neutrons[4, 2].

Les résultats présentés dans ce manuscrit sont tirés de simulations réalisées par Flavia Alejandra Gómez Albarracín, avec qui j'ai eu le plaisir de collaborer pour les recherches présentées ici. Je m'étendrai donc peu sur ces simulations que je n'ai pas réalisées et pour lesquelles je n'ai aucune expertise quant à leur production.

Nous avons présenté ici trois méthodes ou théories complémentaires dans l'étude des liquides de spin et utilisées depuis longtemps par la communauté relative à ce sujet. Nous nous tournons maintenant vers la présentation du cadre spécifique que nous souhaitons étudier et des méthodes qui y sont directement associées.

10

Hamiltonien sur plaquette et vecteur de contrainte

Ce chapitre définit la position du problème étudié dans cette seconde partie du manuscrit, explicitant le type de hamiltoniens et le type de réseaux étudiés. On se concentre ensuite sur les outils analytiques qui existent pour traiter ce type de hamiltonien en particulier. Ces outils étant peu fréquemment discutés dans la littérature, on veillera à bien détailler leur introduction. On finira par expliciter comment les différents outils introduits sont interconnectés.

Contenu du chapitre

| | |
|--|------------|
| 10.1 Le Hamiltonien sur plaquette | 146 |
| 10.2 Vecteur de contrainte | 148 |
| 10.2.1 Vecteur de contrainte unique | 148 |
| 10.2.2 Existence de deux vecteurs de contrainte conjugués complexe | 152 |
| 10.2.3 Cas général | 154 |
| 10.3 Tenseurs de Gauss émergent | 155 |

10.1 Le Hamiltonien sur plaquette

On se propose d'étudier dans ce manuscrit des systèmes constitués de spin classiques \mathbf{S}_i , placés sur un réseau. On se restreint aux cas pour lesquels le hamiltonien peut s'écrire comme une somme sur des sous parties du réseau, appelées plaquettes, sous la forme

$$H = \frac{J}{2} \sum_p \mathcal{S}_p^2. \quad (10.1)$$

La somme se fait sur les plaquettes p et le spin total de chaque plaquette est défini comme

$$\mathcal{S}_p = \sum_{i \in p} \eta_i \mathbf{S}_i, \quad (10.2)$$

avec η_i des coefficients réels, pondérant la manière dont chaque spin appartenant à la plaquette entre dans la définition du spin total. On voit immédiatement que puisque chaque spin total \mathbf{S}_p entre au carré dans le hamiltonien, les états fondamentaux seront ceux pour lesquels le spin total de chaque plaquette est nul. Les hamiltoniens de ce type se sont déjà montrés être de bons candidats pour abriter des liquides de spin longue portée, notamment dans le cas d'un réseau de type pyrochlore[9] ou hexagonal [13, 12].

Pour un réseau régulier pour lequel le système présente une invariance par translation, on peut travailler dans l'espace réciproque et ainsi définir la transformée de Fourier du spin total comme

$$\mathbf{S}(\mathbf{q}) = \sum_{m=1}^{n_u} L_m(\mathbf{q})\mathbf{S}_m(\mathbf{q}). \quad (10.3)$$

La somme se fait sur les n_u sous-réseaux inéquivalents, et $\mathbf{S}_m(\mathbf{q})$ est la transformée de Fourier des spin classiques du sous réseau m . Cette expression fait intervenir le vecteur de contrainte [12]

$$L_{\mathbf{q}}^m = \sum_{i \in m} \eta_i e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_i)} \quad (10.4)$$

qui est défini dans l'espace réciproque à partir de l'impulsion \mathbf{q} . Les positions dans l'espace réel des sites $\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_i$ à l'intérieur d'une plaquette sont données relativement au centre de cette plaquette \mathbf{r}_c . Dans le cas particulier où le hamiltonien du système peut s'écrire sous la forme (10.1) on voit directement l'intérêt du vecteur de contrainte qui permet de réécrire le hamiltonien dans l'espace réciproque sous la forme

$$H = \frac{J}{2} \sum_{m,n} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^m L_{\mathbf{q}}^m L_{-\mathbf{q}}^n \mathbf{S}_{-\mathbf{q}}^n. \quad (10.5)$$

Cette expression est analogue à celle obtenue pour un tel hamiltonien dans le cadre de l'approximation de Luttinger-Tisza [7]. Dans le cadre de cette approximation on relaxe la contrainte sur la longueur des spins \mathbf{S}_i , on peut alors directement obtenir la structure de bande associée au hamiltonien en passant dans l'espace réciproque,

$$H = J \sum_{m,n} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^m M_{mn}(\mathbf{q}) \mathbf{S}_{-\mathbf{q}}^n, \quad (10.6)$$

en calculant les valeurs propres de la matrice \mathbf{M} . Cette approximation s'avère pertinente lorsque la transcription dans l'espace réel des modes propres associés à la matrice \mathbf{M} correspond à des spins respectant la contrainte de norme constante. C'est notamment le cas pour tous les réseaux de Bravais [7].

Dans le cas présent d'un hamiltonien présentant la structure (10.1) on constate que la matrice \mathbf{M} peut s'exprimer comme

$$M_{mn}(\mathbf{q}) = L_{\mathbf{q}}^m L_{-\mathbf{q}}^n, \quad (10.7)$$

ce qui signifie que la structure des bandes d'énergie $\varepsilon_i(\mathbf{q})$ est directement reliée à la structure du vecteur de contrainte $\mathbf{L}(\mathbf{q})$. On peut notamment noter que ce vecteur

possède un nombre de composantes égal aux nombre de sous-réseaux. On peut de plus noter que si un sous-réseau m est symétrique par rapport au centre de chaque plaquette alors la définition (10.4) impose que la composante associée $L_m(\mathbf{q})$ sera réelle. On peut ainsi facilement deviner le nombre de bandes plates du système en regardant le vecteur de contrainte. Si ce dernier est un vecteur réel ayant n_u composantes alors on peut trouver une base dans laquelle toutes ses composantes sont nulles excepté une, ce qui correspond à l'existence de $n_u - 1$ bandes plates associées à une unique bande dispersive. Si $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ est un vecteur complexe alors le même raisonnement mène à la conclusion qu'il y aura cette fois 2 bandes non plates.

10.2 Vecteur de contrainte

La référence [12] indique que l'existence d'un point de pincement dans le facteur de structure est associée à une singularité du vecteur de contrainte $\mathbf{L}(\mathbf{q})$. Ce résultat, mis en valeur par Benton et ses collaborateurs[12], est tiré directement de l'article de Henley[9] qui introduit le vecteur de contrainte sans le nommer, et l'utilise pour calculer le facteur de structure dans le cas du pyrochlore. On se propose ici de suivre les raisonnements de ce papier original pour expliquer comment les propriétés du vecteur de contrainte sont reliées à l'existence de points de pincements. On va voir que la démonstration est différente selon les propriétés du vecteur de contrainte. On se propose de commencer par traiter le cas le plus simple où $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ est réel.

10.2.1 Vecteur de contrainte unique

Vecteur de contrainte réel

Considérons tout d'abord le cas où le vecteur de contrainte $\mathbf{L}_\mathbf{q}$ est unique, et réel. Comme on aura l'occasion de le voir dans le cas du damier et dans le cas du kagomé vu comme composé d'hexagones, ce cas correspond aux systèmes où la maille élémentaire possède une symétrie centrale. C'est notamment le cas lorsqu'on traite un réseau hexagonal [12]. Dans ces systèmes il est légitime de penser que, la maille étant symétrique, le réseau est pavé avec cette unique maille et le système ne possède donc qu'une unique contrainte sur plaquette du type

$$\mathcal{S}_p = \sum_{i \in p} \eta_i \mathbf{S}_i = 0. \quad (10.8)$$

Cette contrainte se traduit dans l'espace réciproque comme

$$\sum_{\mathbf{q}} \sum_m e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_p} \sum_{i \in m \in p} \eta_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \mathbf{S}_m(\mathbf{q}) = 0, \quad (10.9)$$

avec \mathbf{r}_i les positions des sites de la maille relativement à la position de son centre \mathbf{r}_p . Cette expression est valable pour toute plaquette p , quelle que soit sa position \mathbf{r}_p . On

en déduit que

$$\mathcal{S}^\alpha(\mathbf{q}) = \mathbf{L}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{S}^\alpha(\mathbf{q}) = \sum_m L_m(\mathbf{q}) S_m^\alpha(\mathbf{q}) = 0 \quad (10.10)$$

pour chaque composante de spin $\alpha = x, y, z$. Attention le produit scalaire ci-dessus se fait sur les composantes relatives aux sous réseaux, indexés par m .

On veut maintenant calculer les fonctions de corrélation $\langle S_m^\alpha(-\mathbf{q}) S_n^\alpha(\mathbf{q}) \rangle$ qui résultent de la contrainte (10.10). On considère pour cela que la distribution de probabilité suivie par les composantes de spin α est

$$Prob(\{S_i^\alpha\}) \propto e^{-\beta H(\{S_i^\alpha\})}. \quad (10.11)$$

Cette probabilité correspond simplement à un terme de Boltzmann faisant intervenir le hamiltonien sur plaquette (10.1) imposant la contrainte (10.10) sur l'état fondamental, avec β l'inverse de la température. Dans la limite d'une température nulle $\beta \rightarrow \infty$, la contrainte sur l'état fondamental est imposée strictement dans la distribution de probabilité. On a ainsi

$$Prob(\{S_i^\alpha\}) \propto \delta(\mathcal{S}_p) \quad (10.12)$$

où le terme $\delta(\mathcal{S}_p)$ impose la contrainte (10.10). Si on regarde maintenant les fonctions de corrélation $\langle S_m^\alpha(-\mathbf{q}) S_n^\alpha(\mathbf{q}) \rangle$ dans l'espace de Fourier, on utilise la distribution de probabilité correspondante dans l'espace réciproque, à savoir

$$Prob(\{S_m^\alpha(\mathbf{q})\}) \propto \delta(\mathcal{S}(\mathbf{q})). \quad (10.13)$$

L'argument de la delta de Dirac ci-dessus peut être vu comme le produit scalaire de $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ avec $\mathbf{S}^\alpha(\mathbf{q})$. Suivant cette notation il devient clair[9] que les fonctions de corrélation $\langle S_m^\alpha(-\mathbf{q}) S_n^\alpha(\mathbf{q}) \rangle$ vont être proportionnelles au projecteur dans l'espace orthogonal au vecteur de contrainte $\mathbf{L}(\mathbf{q})$. Ce projecteur s'écrit comme

$$\mathbf{\Pi} = 1 - \mathbf{L} \frac{1}{\|\mathbf{L}\|^2} \mathbf{L}^t, \quad (10.14)$$

correspondant à des fonctions de corrélation

$$\langle S_m^\alpha(-\mathbf{q}) S_n^\alpha(\mathbf{q}) \rangle \propto \delta_{mn} - \frac{L_m L_n}{\|\mathbf{L}\|^2}. \quad (10.15)$$

Le facteur de structure $\mathbb{S}(\mathbf{q})$, observé dans les simulations Monte Carlo où expérimentalement lors d'expériences de diffraction de neutrons, combine les contributions de tous les sous réseaux. On l'obtient ainsi en sommant les différentes composantes du projecteur

$$\mathbb{S}(\mathbf{q}) \propto \sum_{m,n} \delta_{mn} - \frac{L_m L_n}{\|\mathbf{L}\|^2} = n_u - 1 - \sum_{m \neq n} \frac{L_m L_n}{\|\mathbf{L}\|^2}. \quad (10.16)$$

On voit immédiatement que le facteur de structure est singulier lorsque la norme du vecteur de contrainte $\|\mathbf{L}\|^2 \equiv \varepsilon(\mathbf{q})$ s'annule. Dans le cas le plus simple où cette norme s'annule de manière quadratique, c'est-à-dire qu'on a une dispersion

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = A^2 \|\mathbf{q}\|^2 \quad (10.17)$$

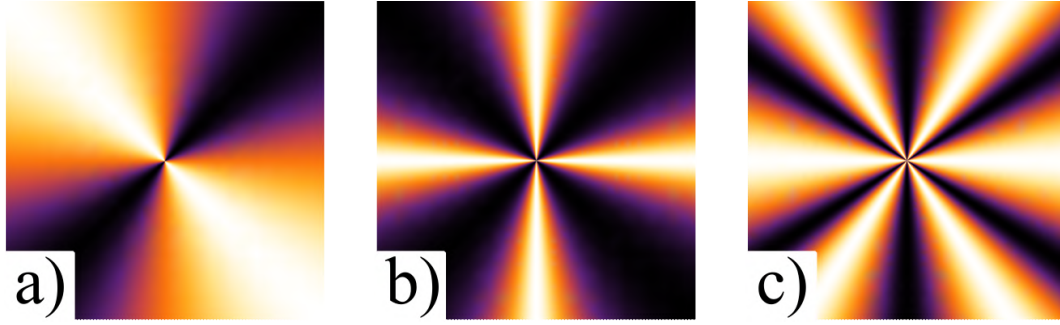


FIGURE 10.1 – Représentation graphique, dans l’espace réciproque, de trois types de point de pincement. Le tracé a), le plus simple et le plus souvent rencontré dans ce manuscrit tout comme dans la littérature, correspond à l’équation (10.19). Le tracé b) correspond à un point de contact quartique, associé au facteur de structure (10.21), tandis que le c) correspond à un point de contact présentant une dispersion sextique.

au voisinage du point où cette norme s’annule, on voit que les composantes du vecteur de contrainte sont localement linéaires

$$L_n(\mathbf{q}) = A_n^i q_i, \quad (10.18)$$

correspondant à un facteur de structure

$$\mathbb{S}(\mathbf{q}) \propto n_u - 1 - \sum_{m \neq n} \frac{A_m^i A_n^j}{A^2} \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{q}\|^2}. \quad (10.19)$$

Cette expression, tracée sur la figure 10.1 a), correspond précisément à ce que l’on appelle un point de pincement dans l’espace réciproque.

Si le voisinage du point de contact se révèle posséder un dispersion quartique

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = \alpha(q_x^4 + q_y^4) + 2\beta q_x^2 q_y^2 \quad (10.20)$$

impliquant un facteur de structure analogue à

$$\mathbb{S}(\mathbf{q}) \propto n_u - 1 - \sum_{m \neq n} A_m^i A_n^j \frac{(q_i)^2 (q_j)^2}{\alpha \|\mathbf{q}\|^4 + 2\beta q_x^2 q_y^2}, \quad (10.21)$$

on aura alors des points de pincements de plus haut rang, possédant ici une double symétrie axiale[11], voir figure 10.1 b). On peut faire le même raisonnement avec une dispersion sextique, correspondant à des points de pincement à six bras, voir figure 10.1 c) pour avoir une représentation graphique des trois types de point de pincement discutés ici.

On comprend ainsi pourquoi, dans le cas d’un réseau centrosymétrique, l’étude des annulations de la norme du vecteur de contrainte est pertinente. La proposition d’étudier les propriétés topologiques de ce vecteur[12] est alors pertinente pour repérer,

de manière robuste vis à vis de possibles perturbations du hamiltonien, les points où $\|\mathbf{L}(\mathbf{q})\|$ s'annule. Si ce vecteur possède deux composantes, les défauts topologiques associés seront des vortex, imposant que la norme du champ s'annule en leur centre. Si $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ possède trois composantes, les défauts topologiques seront des skyrmions au sein desquels $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ n'a aucune raison de s'annuler, mais qui impose une singularité lorsque la charge topologique du système change. Dans ce cas on pourra donc repérer les annulations de $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ en regardant pour quels paramètres du hamiltonien la charge topologique totale du système dans la zone de Brillouin varie.

Vecteur de contrainte complexe

Supposons maintenant que l'on ait toujours un unique vecteur de contrainte, mais cette fois complexe. Cela correspond par exemple au cas du réseau hexagonal[12]. On a dans ce cas nécessairement un réseau très régulier puisque composé d'une unique maille, et on peut ainsi se restreindre au cas où il existe seulement deux sous réseaux, reliés par une transformation de symétrie centrale, comme c'est le cas pour le réseau hexagonal. Cela implique notamment que le vecteur de contrainte soit un vecteur complexe à deux composantes, dont la seconde composante est simplement le conjugué complexe de la première. On a donc un vecteur complexe à deux composantes, qui contient seulement deux degrés de liberté indépendants, et donc finalement analogue au cas d'un vecteur réel. Le projecteur est identique à celui obtenu dans le cas réel, au détail près que c'est cette fois le transposé conjugué du vecteur de contrainte qui intervient

$$\mathbf{\Pi} = 1 - \mathbf{L} \frac{1}{\|\mathbf{L}\|^2} \mathbf{L}^\dagger. \quad (10.22)$$

Les points de pincement sont donc là encore rencontrés lorsque la norme du vecteur de contrainte s'annule.

Si on regarde maintenant la matrice d'interaction obtenue dans l'approximation de Luttinger Tisza on a simplement

$$\mathbf{M} = \mathbf{L}_q \mathbf{L}_q^\dagger = \begin{pmatrix} |L_1|^2 & (L_1)^2 \\ (L_1^*)^2 & |L_1|^2 \end{pmatrix} \quad (10.23)$$

puisque $L_2 = L_1^*$. On en déduit que les bandes d'énergie on pour expression

$$\varepsilon_1(\mathbf{q}) = 0, \quad \varepsilon_2(\mathbf{q}) = 2|L_1|^2 = \|\mathbf{L}_q\|^2. \quad (10.24)$$

On a donc finalement une situation analogue en tout point au cas réel, présentant une unique bande dispersive dont l'expression se résume à la norme du vecteur de contrainte. L'étude des propriétés topologiques du vecteur de contrainte pourra notamment se faire de manière similaire au cas réel[12].

10.2.2 Existence de deux vecteurs de contrainte conjugués complexe

On se tourne maintenant vers le cas légèrement plus complexe où le vecteur de contrainte $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ n'est plus réel mais possède une partie imaginaire. Ce cas correspond aux réseaux ne possédant pas de symétrie centrale, cela pouvant correspondre en deux dimensions à un pavage triangulaire du type kagomé, ou au cas du pyrochlore[9] pour un système tridimensionnel, où les briques élémentaires sont des tétraèdres. S'il existe un unique vecteur de contrainte, c'est à dire une unique plaquette élémentaire ayant une unique orientation, la démonstration est similaire à celle du cas précédent. Si par contre on a la nécessité d'utiliser différentes orientations (généralement deux) de la plaquette élémentaire pour pouvoir paver le plan, la situation est différente. Si on prend par exemple le cas du réseau de kagomé on voit que le réseau est composé de deux types de triangles, pointant respectivement vers le haut ou vers le bas. Dans un tel cas on voit que l'on aura une relation de contrainte analogue à (10.10) pour chaque orientation possible de la plaquette élémentaire. Cela correspond à la définition d'autant de vecteurs de contrainte que de relations de contrainte. Il apparaît ainsi immédiatement que la démonstration effectuée dans le cas réel ne fonctionne plus ici.

On se propose pour cette démonstration de se concentrer dans le cas présent sur les situations où il existe seulement deux plaquettes élémentaires, qui sont reliées par une symétrie centrale¹. Dans ce cas on voit directement en regardant la définition (10.4) que les deux vecteurs de contraintes sont simplement le conjugué complexe l'un de l'autre. Les deux contraintes imposées par le hamiltonien sont donc simplement $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}^\alpha = 0$ et $\mathbf{L}^* \cdot \mathbf{S}^\alpha = 0$. On en déduit, suivant le même raisonnement que dans le cas réel, que les fonctions de corrélations $\langle S_m^\alpha(-\mathbf{q}) S_n^\alpha(\mathbf{q}) \rangle$ seront cette fois proportionnelles à l'opérateur qui projette dans le sous espace orthogonal à la fois à $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ et $\mathbf{L}^*(\mathbf{q})$. Pour construire ce projecteur on définit la matrice \mathbf{M} constituées de \mathbf{L} et \mathbf{L}^* en guise de colonnes. Le projecteur dans le sous espace orthogonal à \mathbf{M} est alors

$$\mathbf{\Pi} = 1 - \mathbf{M}(\mathbf{M}^\dagger \mathbf{M})^{-1} \mathbf{M}^\dagger. \quad (10.25)$$

On a notamment

$$\mathbf{M}^\dagger \mathbf{M} = \begin{pmatrix} \|\mathbf{L}\|^2 & Q^* \\ Q & \|\mathbf{L}\|^2 \end{pmatrix} \quad (10.26)$$

où on a noté

$$\|\mathbf{L}\| = \mathbf{L}^* \cdot \mathbf{L} = L_i^* L_i \quad (10.27)$$

et où

$$Q(\mathbf{q}) = Q^*(-\mathbf{q}) = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} = \sum_m (L_m(\mathbf{q}))^2 \quad (10.28)$$

est une fonction scalaire, complexe, de l'impulsion \mathbf{q} . On a donc

$$(\mathbf{M}^\dagger \mathbf{M})^{-1} = \frac{1}{\|\mathbf{L}\|^4 - |Q|^2} \begin{pmatrix} \|\mathbf{L}\|^2 & -Q^* \\ -Q & \|\mathbf{L}\|^2 \end{pmatrix}, \quad (10.29)$$

1. Cette restriction correspond à ne considérer que des cas naturels, tels que le cas du réseau de kagomé et le pyrochlore.

Impliquant que cette fois l'observation de singularités du type point de pincement se fera lorsque

$$\|\mathbf{L}\|^4 - |Q|^2 = 0. \quad (10.30)$$

On se pose maintenant la question de savoir si, comme dans le cas d'un unique vecteur de contrainte, un contact entre la première bande dispersive avec les bandes plates correspond toujours à l'existence d'une singularité dans le facteur de structure. On considère pour cela l'approximation de Luttinger-Tisza, dans le cadre de laquelle le hamiltonien s'exprime dans l'espace réciproque comme

$$H = \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^m \left(L_{\mathbf{q}}^n L_{-\mathbf{q}}^m + (L_{\mathbf{q}}^n L_{-\mathbf{q}}^m)^* \right) \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^n. \quad (10.31)$$

Le premier produit $L_{\mathbf{q}}^n L_{-\mathbf{q}}^m$ correspond aux triangles orientés vers le haut, et le second à ceux orientés vers le bas. On peut utiliser que par définition $\mathbf{L}_{\mathbf{q}} = \mathbf{L}_{-\mathbf{q}}^*$ pour réécrire le hamiltonien comme

$$H = \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^m \left(L_{\mathbf{q}}^n (L_{\mathbf{q}}^m)^* + (L_{\mathbf{q}}^n)^* L_{\mathbf{q}}^m \right) \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^n. \quad (10.32)$$

On peut choisir une base pour le vecteur de contrainte \mathbf{L} telle que les deux premiers générateurs de cette base engendrent le sous espace vectoriel généré par la partie réelle et la partie imaginaire de \mathbf{L} . On se place dans cette base et on note le vecteur de contrainte \mathbf{l} . Par construction ce vecteur n'a plus que deux composantes non nulles, et on peut donc se restreindre à l'étude d'un vecteur de dimension 2. Cela signifie notamment que les bandes d'énergies générées seront toutes plates exceptées deux bandes dispersives, comme évoqué précédemment. Dans cette base la matrice de Luttinger-Tisza s'écrit à partir de $\mathbf{l}(\mathbf{q})$ comme

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} 2|l_1|^2 & l_1 l_2^* + l_1^* l_2 \\ l_1 l_2^* + l_1^* l_2 & 2|l_2|^2 \end{pmatrix}. \quad (10.33)$$

Cela signifie que les valeurs propres de cette matrice, à savoir les dispersions des bandes d'énergies dispersives, satisfont

$$(2|l_1|^2 - \varepsilon)(2|l_2|^2 - \varepsilon) - (l_1 l_2^* + l_1^* l_2)^2 = 0 \quad (10.34)$$

ou

$$\varepsilon^2 - 2\|\mathbf{l}\|^2 - \left((l_1)^2 (l_2^*)^2 + (l_1^*)^2 (l_2)^2 - 2|l_1|^2 |l_2|^2 \right) = 0, \quad (10.35)$$

Le déterminant de ce polynôme du second degré peut notamment s'écrire comme

$$4 \left[|l_1|^4 + |l_2|^4 + 2|l_1|^2 |l_2|^2 \right] + 4 \left[(l_1)^2 (l_2^*)^2 + (l_1^*)^2 (l_2)^2 - 2|l_1|^2 |l_2|^2 \right] \quad (10.36)$$

ce qui se simplifie comme

$$4(\mathbf{l} \cdot \mathbf{l})(\mathbf{l} \cdot \mathbf{l})^* = 4|Q|^2, \quad (10.37)$$

où on a utilisé le fait que la rotation $\mathbf{L} \rightarrow \mathbf{I}$ préserve les produits scalaires. Cela signifie que les valeurs propres s'expriment simplement comme

$$\varepsilon_{\pm} = \|\mathbf{L}\|^2 \pm |Q|. \quad (10.38)$$

Le déterminant de $\mathbf{M}^\dagger \mathbf{M}$ est donc égal au produit des valeurs propres obtenues dans le cadre de l'approximation de Luttinger-Tisza. On observe donc là encore, que l'existence d'un point de contact entre l'une des deux bandes dispersive et les bandes plates va produire un point de pincement dans le facteur de structure. On peut ici noter qu'une annulation de la seconde bande dispersive nécessite que $\|\mathbf{L}\|^2$ et $|Q|$ s'annulent simultanément, les points de contacts entre la seconde bande dispersive et les bandes plates seront donc plus rares.

On observe que dans ce cas l'analyse des propriétés topologiques de \mathbf{L} perd son sens. En effet comme on l'a vu, les singularités n'apparaissent plus lorsque la norme du vecteur de contrainte s'annule, mais lorsque la quantité $\|\mathbf{L}\|^4 - |\mathbf{L} \cdot \mathbf{L}|^2$ s'annule. Cette quantité peut notamment s'écrire en utilisant les parties réelle et imaginaire du vecteur de contrainte comme

$$\|\mathbf{L}\|^4 - |Q|^2 = 4 \left[\|R\{\mathbf{L}\}\|^2 \|I\{\mathbf{L}\}\|^2 - (R\{\mathbf{L}\} \cdot I\{\mathbf{L}\})^2 \right], \quad (10.39)$$

signifiant ainsi qu'on s'attend à observer une singularité dans le facteur de structure lorsque soit la partie réelle, soit la partie imaginaire du vecteur de contrainte s'annule, ou lorsque parties réelle et imaginaire deviennent proportionnelles l'une à l'autre. On voit donc dans ce cas qu'il est pertinent de chercher lorsque le vecteur

$$\mathbf{L}_{\times}(\mathbf{q}) = \mathbf{L}_{\mathbf{q}} \times \mathbf{L}_{\mathbf{q}}^* \quad (10.40)$$

s'annule, sa norme carrée valant précisément $\|\mathbf{L}\|^4 - |Q|^2$. La recherche des zéros de ce nouveau champ vectoriel peut notamment se faire en réalisant une analyse des ses propriétés topologiques, de manière similaire à ce qu'on a proposé dans le cas d'un unique vecteur de contrainte réel.

10.2.3 Cas général

On veut maintenant discuter le cas général où il existe un nombre n de vecteurs de contraintes (réels ou complexes), ayant un nombre de composantes n_u égal aux nombre de sous réseaux. Dans ce cas on peut faire le même raisonnement que dans les deux cas précédents, et ainsi observer que les fonctions de corrélations seront proportionnelles aux composantes du projecteur dans le sous espace vectoriel orthogonal à tous les vecteurs de contrainte. Si on construit la matrice \mathbf{M} de taille $n_u \times n$ étant composée des n vecteurs de contraintes comme colonnes, alors ce projecteur s'écrit comme

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{1} - \mathbf{M}(\mathbf{M}^\dagger \mathbf{M})^{-1} \mathbf{M}^\dagger. \quad (10.41)$$

La matrice

$$\left(\mathbf{M}^\dagger \mathbf{M}\right)_{ij} = (\mathbf{L}_i)^* \cdot \mathbf{L}_j \quad (10.42)$$

est singulière lorsque son déterminant s'annule, ce qui correspond dans le cas présent à une situation où, soit l'un des vecteurs de contrainte s'annule, soit l'un des vecteurs de contrainte devient linéairement dépendant des autres[12]. Cela signifie alors que l'une des n conditions

$$\mathbf{L}_i(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{S}^\alpha(\mathbf{q}) = 0 \quad (10.43)$$

est automatiquement satisfaite, et donc que pour ce point précis dans l'espace réciproque une contrainte est relâchée. On peut noter cela s'applique au cas précédemment traité de deux vecteurs de contrainte complexes conjugués. On peut donc en général chercher, via une analyse topologique notamment, quand est ce que s'annule l'un des 2 parmi n vecteurs définis comme les produits vectoriels d'une paire de vecteurs de contrainte.

10.3 Tenseurs de Gauss émergent

On a vu en introduction [9] que si la physique de basse énergie d'un système de spin est régie par une loi de Gauss, cela conduit à l'apparition de points de pincement dans le facteur de structure. Il est naturel de se poser la question réciproque, l'existence d'un point de pincement dans le facteur de structure implique t-elle l'existence d'un champ sous-jacent dont la divergence est nulle dans la limite $T \rightarrow 0$. L'approximation de Luttinger Tisza peut permettre d'éclairer cette question, si on regarde le système à une température suffisamment basse pour que les échelles de longueurs caractéristiques soient petites devant la longueur de corrélation thermique, et dans l'hypothèse d'absence d'ordre par désordre.

On a vu que l'annulation du vecteur de contrainte en certains points correspondaient à l'apparition de points de pincement. On a aussi vu que dans le cadre de hamiltoniens ayant la structure (10.1) cela correspondait à l'annulation de la bande d'énergie $\varepsilon(\mathbf{q})$ non plate². Cela signifie que cette bande peut s'exprimer autour de ce point de contact³ comme

$$\varepsilon(\mathbf{q}) \simeq \alpha^2(q_x^2 + q_y^2), \quad (10.44)$$

où \mathbf{q} représente la distance dans l'espace réciproque au point de contact, et α est un coefficient réel. On peut alors montrer qu'une telle relation de dispersion correspond à l'existence un point de pincement "standard". Ces derniers sont en effet associés à l'existence d'une loi de Gauss pour un tenseur de rang \mathbf{E} , qui satisfait donc dans l'espace

2. On se place ici dans le cas où le vecteur de contrainte est réel. Dans ce il y a une unique bande non plate qui doit s'annuler lorsque le vecteur de contrainte s'annule. Dans le cas où le vecteur de contrainte $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ est complexe, il y a deux bandes non plates, qui peuvent s'annuler séparément sans que le vecteur de contrainte ne le fasse.

3. Si la bande excitée s'annule cela signifie qu'elle entre en contact avec les bandes plates.

réciroque la relation

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{E} = 0. \quad (10.45)$$

Un tel tenseur peut toujours être construit en prenant

$$E_x(\mathbf{q}) = -\alpha q_y \phi(\mathbf{q}), \quad E_y(\mathbf{q}) = \alpha q_x \phi(\mathbf{q}), \quad (10.46)$$

où $\phi(\mathbf{q})$ correspond à la transformée de Fourier d'une version gros grain, continue, de l'une des composantes⁴ des spin locaux \mathbf{S}_i . Cela correspond dans l'espace réel à

$$E_x(\mathbf{r}) = -\alpha \partial_y \phi(\mathbf{r}), \quad E_y(\mathbf{r}) = \alpha \partial_x \phi(\mathbf{r}), \quad (10.47)$$

associée à la fonctionnelle énergie décrivant la physique à basse énergie

$$F \simeq \int d^2r E_i E^i = \int d^2r \alpha^2 \left((\partial_x \phi)^2 + (\partial_y \phi)^2 \right). \quad (10.48)$$

Cela peut être simplement ré-exprimé dans l'espace réciroque comme

$$F \simeq \int d^2q E_i(\mathbf{q}) E^i(-\mathbf{q}) = \int d^2q \varepsilon_i(\mathbf{q}) |\phi(\mathbf{q})|^2, \quad (10.49)$$

fonctionnelle qui peut être interprétée comme un développement local d'une version continue du hamiltonien (10.6).

Pour certains paramètres spécifique il est possible d'observer des points de contact dont la dispersion est quartique

$$\varepsilon(\mathbf{q}) \simeq \alpha^2 (q_x^4 + q_y^4) + 2\beta q_x^2 q_y^2, \quad (10.50)$$

avec α et β deux coefficients réels. Dans ce cas on peut introduire un tenseur symétrique de rang deux \mathbf{E} satisfaisant à une loi de Gauss généralisée $\partial_i E_{ij} = 0$ [14, 15]. Cette relation peut notamment s'exprimer dans l'espace réciroque comme

$$q_i E_{ij} = 0, \quad j = x, y. \quad (10.51)$$

Il apparaît alors que cette condition peut être généralement satisfaite en définissant le tenseur \mathbf{E} selon

$$\mathbf{E}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} q_y^2 \phi & -q_x q_y \phi \\ -q_x q_y \phi & q_x^2 \phi \end{pmatrix}. \quad (10.52)$$

Cela signifie alors que la fonctionnelle énergie qui décrit la physique des basses énergies peut être exprimée comme

$$F \simeq \int d^2q \eta_{ij} E_{ij}(\mathbf{q}) E^{ij}(-\mathbf{q}) = \int d^2q \varepsilon(\mathbf{q}) |\phi(\mathbf{q})|^2 \quad (10.53)$$

4. On devrait de manière générale définir E comme un tenseur à deux indices E_i^α avec α un indice de spin. Puisque la définition est analogue pour les trois composantes de spin on se permet néanmoins d'omettre cet indice ici. On peut de plus noter que le champ ϕ est composé des limites continues des spins des différents sous réseaux du systèmes.

où les coefficients η_{ij} dépendent de α et β . On aura donc en général une association.

Supposons maintenant que le point de contact possède une dispersion sextique du type

$$\varepsilon(\mathbf{q}) \simeq \alpha^2(q_x^6 + q_y^6) + 2\beta(q_x^4 q_y^2 + q_x^2 q_y^4). \quad (10.54)$$

On peut alors introduire un tenseur symétrique de rang trois \mathbf{E} satisfaisant une loi de Gauss définie cette fois comme

$$\partial_i E_{ijk} = 0, \quad (10.55)$$

pour tout j et k valant x ou y . Cette condition peut dans le cas présent être satisfaite en prenant, par analogie au cas quadratique,

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &\equiv \begin{pmatrix} E_{xxx} & E_{xxy} & E_{xyx} & E_{xyy} \\ E_{yxx} & E_{yyx} & E_{yyx} & E_{yyy} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} q_y^3 \phi & -q_x q_y^2 \phi & -q_x q_y^2 \phi & q_x^2 q_y \phi \\ -q_x q_y^2 \phi & q_x^2 q_y \phi & q_x^2 q_y \phi & -q_x^3 \phi \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (10.56)$$

Ce tenseur est bien symétrique au sens $E_{ijk} = E_{ikj} = E_{jik} = E_{kji}$. Ce tenseur permet notamment d'exprimer localement la fonctionnelle énergie qui décrit la physique à basse température comme

$$F \simeq \int d^2q \eta_{ijk} E_{ijk}(\mathbf{q}) E^{ijk}(-\mathbf{q}) = \int d^2q \varepsilon(\mathbf{q}) |\phi(\mathbf{q})|^2 \quad (10.57)$$

où les coefficients η_{ijk} dépendent ici aussi de α et β . On peut noter qu'un tel tenseur $U(1)$ de rang 3 ne semble pas avoir été étudié précédemment dans le cadre de liquides de spin[14, 15, 11]. Sa structure se révèle néanmoins à première vue très similaire à celle d'un tenseur de rang 2 comme celui introduit pour un point de contact ayant une dispersion quadratique et qui a quant à lui été largement discuté dans la littérature. On a en particulier, qu'au vu de la loi de Gauss (10.55), les fonctions de corrélations du tenseur de rang 3 doivent satisfaire

$$q_i \langle E^{ijk}(\mathbf{q}) E^{lmn}(-\mathbf{q}) \rangle = 0. \quad (10.58)$$

On peut ainsi en déduire que ces fonctions de corrélation ont une structure analogue[11] à celles obtenues pour un tenseur de rang 2, soit

$$\begin{aligned} \langle E^{ijk}(\mathbf{q}) E^{lmn}(-\mathbf{q}) \rangle &\propto \frac{\delta^{il}}{q^2} \left(\delta^{jm} q^k q^n + \delta^{kn} q^j q^m + \delta^{jn} q^k q^m + \delta^{km} q^j q^n \right) \\ &+ \frac{q^i q^l}{q^2} \left(\delta^{jm} \delta^{kn} + \delta^{jn} \delta^{km} \right) + \delta^{im} \dots + \delta^{in} \dots \\ &+ 3 \frac{q^i q^j q^k q^l q^m q^n}{q^6} \\ &- \left[\delta^{il} \frac{q^j q^m q^k q^n}{q^4} + \delta^{im} \frac{q^j q^l q^k q^n}{q^4} + \delta^{in} \frac{q^j q^m q^k q^l}{q^4} \right] \\ &- \delta^{j\bullet} \dots - \delta^{k\bullet} \dots \end{aligned} \quad (10.59)$$

où les ... désignent des termes similaires à ceux qui les précèdent, pris avec les bons indices. On a ainsi

$$\langle E^{xxx}(\mathbf{q})E^{yyy}(-\mathbf{q}) \rangle \propto 3 \frac{(q^x)^3(q^y)^3}{q^6} = 3 \left[\frac{q^x q^y}{q^2} \right]^3 \quad (10.60)$$

et

$$\begin{aligned} \langle E^{xyy}(\mathbf{q})E^{xyy}(-\mathbf{q}) \rangle &\propto 3 \frac{(q^x)^3(q^y)^3}{q^3} - 2 \frac{q^x(q^y)^3 + (q^x)^3 q^y}{q^4} \\ &= 3 \left[\frac{q^x q^y}{q^2} \right]^3 - 2 \frac{q^x q^y}{q^2} \end{aligned} \quad (10.61)$$

On en déduit que puisque

$$\langle S^\alpha(\mathbf{r})S^\alpha(0) \rangle = c_{ijklmn} \langle E^{ijk}(\mathbf{r})E^{lmn}(0) \rangle \quad (10.62)$$

avec c_{ijklmn} dépendant du réseau, et donc ici de γ et δ , le facteur de structure aura des points de pincement ayant localement une structure du type

$$\mathbb{S}(\mathbf{q}) \sim \alpha + \beta \left(\frac{q^x q^y}{q_x^2 + q_y^2} \right)^3 - \eta \frac{q^x q^y}{q_x^2 + q_y^2}. \quad (10.63)$$

On peut voir que pour $\beta = 0$ on a un point de pincement identique à ceux qu'on obtient dans le cas d'un tenseur de rang 1. Pour $\eta = 0$ on s'attend à avoir une structure analogue, puisqu'on a simplement la fonction caractéristique d'un point de pincement usuel, mais élevée au cube. Lorsque $\beta \sim \eta$, on va avoir une situation plus compliquée où on peut notamment observer l'apparition d'un point de pincement présentant six bras. Les différents cas sont représentés sur la figure 10.2.

On a vu qu'à chaque type de dispersion correspondait un tenseur d'ordre différent et une structure différente pour le point de pincement. Ces informations sont résumées dans le tableau suivant. Ces résultats montrent qu'il y a une connexion naturelle entre la physique à température nulle, décrite par les facteurs de structure estimés dans cette limite, et la physique à basse température gouvernée par la dispersion au voisinage des points de contact[16].

Ces considérations générales nous permettent d'identifier clairement pourquoi les hamiltoniens de plaquette se révèlent être d'excellents candidats pour observer des liquides de spin. On a en effet vu que ces systèmes sont structurellement sujets à l'émergence de bandes plates, impliquant une dégénérescence macroscopique pour les états fondamentaux. Cet élément est de plus renforcé par le fait que les bandes dispersives ne peuvent que venir toucher les bandes plates mais pas les traverser, puisque leur relation de dispersion, pouvant s'exprimer comme une norme doit être positive. Cela signifie qu'il ne peut pas y avoir de situation où il existe un minimum d'énergie bien défini dans l'espace

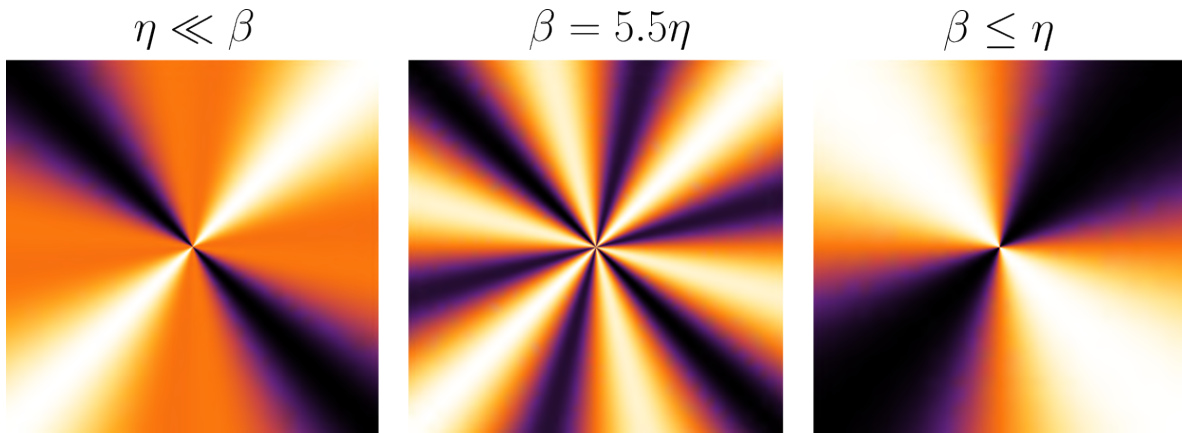


FIGURE 10.2 – Différents types de points de pincement obtenus pour un tenseur de rang 3 en faisant varier β et η . On observe que pour $\eta \gg \beta$ le point de pincement est identique à ceux qu'on obtient pour un tenseur de rang 1. Pour $\beta \gg \eta$ l'aspect est similaire mais tout de même différent, le point de pincement apparaissant plus écrasé. Dans le régime $\beta \gtrsim \eta$ on peut observer la formation de six bras distincts, permettant dans ce cas d'affirmer avec certitude que ce type de point de pincement correspond à un tenseur de rang 3.

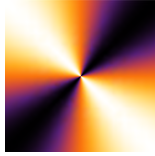
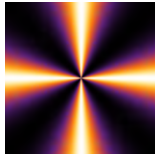
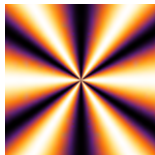
| Dispersion | Rang tenseur | Loi de Gauss | Point de pincement |
|-------------|--------------|--------------------------|---|
| quadratique | 1 | $\partial_i E_i = 0$ |  |
| quartique | 2 | $\partial_i E_{ij} = 0$ |  |
| sextique | 3 | $\partial_i E_{ijk} = 0$ |  |

TABLE 10.1 – Tableau regroupant les différentes situations rencontrées dans ce manuscrit. Un ordre de dispersion peut être relié à l'ordre du tenseur correspondant, selon "ordre relation de dispersion" = 2"ordre du tenseur". On présente à droite une illustration du point de pincement correspondant à un ordre donné observé au sein d'un facteur de structure.

réciroque, ce qui impliquerait que le système doive s'ordonner⁵. On a aussi introduit le vecteur de contrainte et montré en quoi il constitue un bon outil pour détecter et catégoriser les différents liquides de spin pouvant émerger.

On se propose maintenant d'appliquer ces concepts et outils au cas de trois exemples bidimensionnels.

5. Si il existe une unique configuration, ayant une impulsion donnée, minimisant l'énergie du système, cela signifie que le système va adopter cette configuration à basse température, et donc s'ordonner.

11

Le damier généralisé

Ce chapitre est dédié au traitement du premier des trois exemples abordés dans ce manuscrit. On se concentre ici sur le cas d'un réseau appelé damier, car il présente des groupes de spins carrés se touchant par les coins de manière analogue aux cases noires observées sur un damier. Les différentes méthodes analytiques et numériques présentées jusqu'ici sont appliquées au problème, se révélant complémentaires. Le diagramme de phase obtenu s'avère extrêmement riche, ce chapitre a pour objet la construction de ce diagramme, et la description et compréhension des nombreux cas de figure rencontrés.

Contenu du chapitre

| | |
|--|------------|
| 11.1 Propriétés du vecteur de contrainte | 162 |
| 11.2 Approximation de Luttinger-Tisza | 163 |
| 11.3 Points de pincement de haut rang | 165 |
| 11.3.1 Ligne de multiplicité 2 | 166 |
| 11.3.2 Ligne de multiplicité 4+1 | 167 |
| 11.3.3 Ligne de multiplicité 8+1 | 168 |
| 11.4 Analyse topologique du vecteur de contrainte | 169 |
| 11.5 Facteur de structure et chaleur spécifique | 171 |
| 11.5.1 Méthode projective | 171 |
| 11.5.2 Simulations Monte Carlo | 171 |
| 11.6 Loi de Gauss | 175 |
| 11.6.1 Cas du damier simple | 175 |
| 11.6.2 Damier généralisé | 176 |
| 11.7 Lignes de dégénérescence | 178 |
| 11.7.1 Lignes de dégénérescence rectilignes | 179 |
| 11.7.2 Lignes de dégénérescence circulaires | 184 |

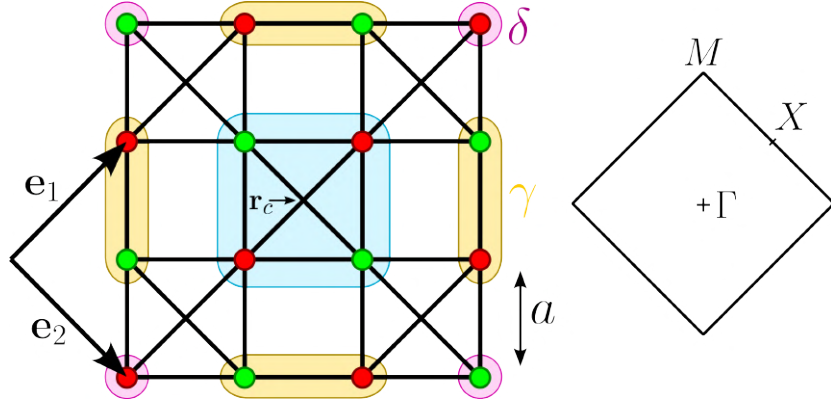


FIGURE 11.1 – Plaquette étendue du réseau dit en damier. Le réseau original est celui composé simplement des plaquettes comportant une croix centrale. On l’élargit ici en prenant en compte les spins voisins de cette plaquette centrale dans la définition du spin total (11.1) de la plaquette étendue. Les spins immédiatement voisins du carré central viennent avec un coefficient γ tandis que les quatre spins dans les coins sont comptés avec un coefficient δ . Les deux sous réseaux sont dépeints à l’aide de points de couleur verte et rouge. On a représenté sur la droite la zone de Brillouin associé à ce réseau, avec ses trois points spéciaux.

Le premier exemple considéré dans ce manuscrit est le réseau en damier représenté sur la figure 11.1. Le cas du damier "standard" avec $\delta = \gamma = 0$ a déjà été traité précédemment[17] et s’est révélé abriter un liquide de spin à longue portée. Dans le cas présent chacune des plaquettes p du damier est étendue comme représenté sur la figure 11.1. Le spin total par plaquette est ainsi défini comme

$$\mathcal{S}_p = \sum_{i \in p} \mathbf{S}_i + \gamma \sum_{i \in \langle p \rangle} \mathbf{S}_i + \delta \sum_{i \in \langle\langle p \rangle\rangle} \mathbf{S}_i, \quad (11.1)$$

où la première somme porte sur les spin du carré central, la seconde sur les spins adjacents à ce carré central, tandis que la dernière porte sur les quatre spins qui forment les coins d’une maille carrée étendue. On se propose de commencer l’étude de ce système par la description des propriétés du vecteur de contrainte.

11.1 Propriétés du vecteur de contrainte

On peut voir sur la figure 11.1 que les spins des deux sous réseaux sont disposés de manière symétrique vis à vis du centre de la plaquette étendue. On en déduit que le vecteur de contrainte défini selon (10.4) aura deux composantes réelles, puisque les

exponentielles vont s'apparier deux à deux pour former des cosinus. On a explicitement

$$\begin{aligned} \mathbf{L}(\mathbf{q}) = & 2 \begin{pmatrix} \cos(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{q}) \\ \cos(\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{q}) \end{pmatrix} \\ & + 2\gamma \begin{pmatrix} \cos((2\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{q}) + \cos((2\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{q}) \\ \cos((\mathbf{r}_1 + 2\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{q}) + \cos((\mathbf{r}_1 - 2\mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{q}) \end{pmatrix} \\ & + 2\delta \begin{pmatrix} \cos(3\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{q}) \\ \cos(3\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{q}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (11.2)$$

où on a noté

$$\mathbf{r}_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (11.3)$$

les vecteurs repérant la position de deux sites appartenant à la plaquette réduite prise relativement au centre de cette plaquette. Les défauts topologiques associés à un vecteur ayant deux composantes réelles sont des vortex, dont l'existence implique une singularité en leur centre. Ce système permet donc de réaliser une analyse de l'existence de points de pincement en étudiant les propriétés topologiques du vecteur de contrainte[12].

On a vu dans le chapitre 10 que l'étude des zéros du vecteur de contrainte était, pour ce système, finalement équivalente avec une étude des zéros de la première bande dispersive dans le cadre de l'approximation de Luttinger-Tisza. Une étude détaillée de l'un ou l'autre serait donc suffisante, mais on se propose ici de discuter les deux méthodes afin de les illustrer et de mettre en valeur leurs avantages et limitations. On commencera par l'étude via l'approximation de Luttinger Tisza, plus rapide et plus simple à mener.

11.2 Approximation de Luttinger-Tisza

On se propose maintenant de réaliser une étude détaillée des zéros de l'unique bande dispersive en jeu ici, le vecteur de contrainte étant réel. L'expression de cette dernière correspond simplement à la norme du vecteur de contrainte

$$\varepsilon(\mathbf{q}) \equiv \|\mathbf{L}(\mathbf{q})\|^2 \quad (11.4)$$

en unités de $J/2$. L'étude de la structure de cette bande en fonction des paramètres γ et δ révèle qu'il existe toujours des contacts entre cette bande et la bande plate sous-jacente. Ces contacts peuvent prendre la forme de points de contacts isolés, correspondant comme on l'a vu plus haut à l'existence de points de pincement. On peut cependant noter que ces contacts peuvent aussi prendre la forme de courbes rectilignes ou de forme circulaire. Ces lignes ne correspondent pas, comme on le verra par la suite, à un comportement singulier du facteur de structure. Ces lignes de dégénérescence seront discutées dans la section 11.7 correspondante.

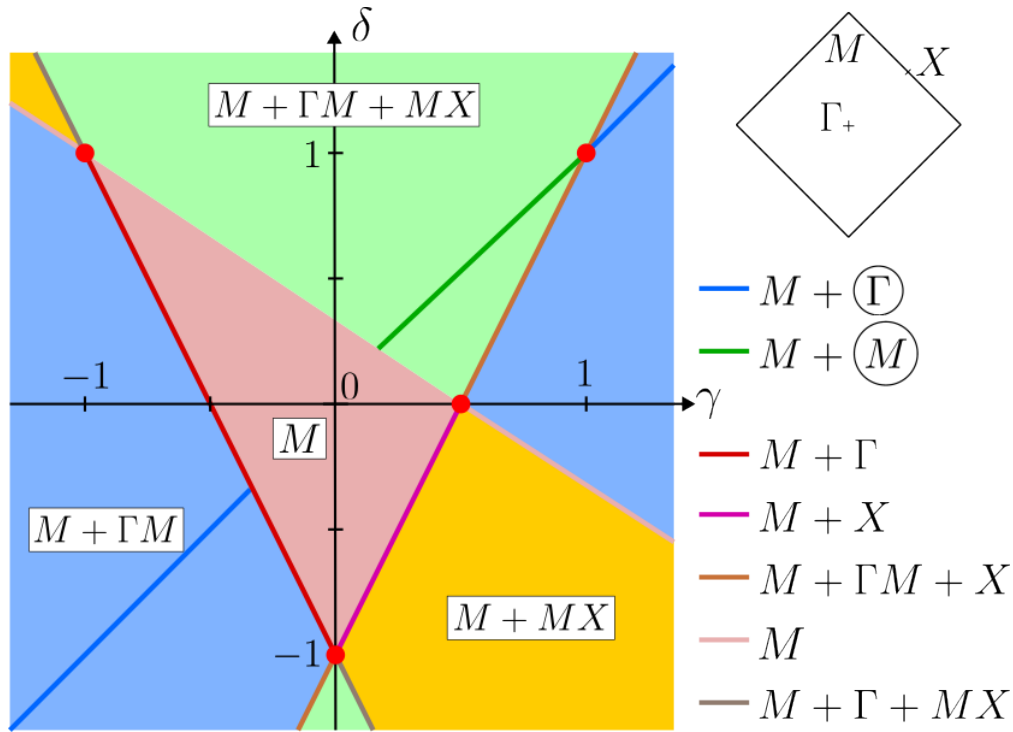


FIGURE 11.2 – Diagramme de phase pour le damier étendu, avec γ en abscisse et δ en ordonnée. Il y a quatre phases étendues séparées par trois lignes critiques. Il existe aussi une ligne spéciale d'équation $\delta = \gamma$ présentant des lignes de contact. L'intersection de ces lignes donne lieu à l'apparition de quatre phases très spéciales, dont les positions dans le diagramme sont repérées par des points rouges. Trois de ces points présentent des lignes de contact rectilignes comme on peut le voir sur la figure 11.11. Le quatrième, situé au point $(\gamma, \delta) = (0, -1)$ correspond à la phase $M + \Gamma + X$.

Selon la position et le nombre de points de contact, ainsi que selon la présence ou non de lignes de dégénérescence on peut classifier les différentes structures de bande sous la forme de phases distinctes. Le diagramme de phase obtenu est représenté sur la figure 11.2. La notation utilisée est la suivante, si un point de contact est localisé sur un point spécial X_i de la zone de Brillouin alors on note la phase X_i . Les points de contact peuvent aussi être situés sur les axes liant deux points spéciaux X_i et X_j de la zone de Brillouin, dans ce cas ce point sera noté $X_i X_j$. Dans le cas où il y a plusieurs points de contact on décrira la phase comme la somme des différentes positions de ces points. Par exemple la notation $M + MX$ signifie qu'il y a un point de contact à chaque coin M de la zone de Brillouin, et un point de contact positionné sur chaque segment MX sur les bords de la zone de Brillouin. Lorsque une phase est notée $X_i + \textcircled{X_j}$ cela signifie qu'il y a une ligne de contact quasi-circulaire entourant le point X_j , ainsi qu'un point de contact isolé situé en X_i .

On constate au regard du diagramme de phase représenté sur la figure 11.2 qu'il existe quatre phases étendues ne présentant que des points de contact isolés. Ces points se révèlent de plus avoir des dispersions quadratiques, signifiant qu'ils correspondent à des points de pincement usuels. Ces quatre phases sont séparées par trois lignes critiques qui ne présentent elles aussi que des points de contact, mais qui ne possèdent pas tous des dispersions quadratiques. Cela est plutôt naturel, puisque lors du passage de ces lignes on assiste à l'apparition de points de contact qui vont ensuite se séparer en deux, quatre ou huit points de contact selon la ligne critique traversée. Il n'est donc pas surprenant que la dispersion locale soit plus que quadratique le long des axes selon lesquels vont émerger les nouveaux points de contact. La structure de ces points de contact spéciaux sera discutée plus en détail dans la partie 11.3. Il existe finalement une ligne spéciale, d'équation $\delta = \gamma$, pour laquelle on voit apparaître des lignes de contact circulaires, dont l'emplacement dépend de la phase qui est traversée par cette ligne.

Il existe quatre points spéciaux, marqués en rouge sur le diagramme de phase, correspondant à des intersections entre lignes critiques, qui abritent quatre autres phases très spécifiques. Le point $(\gamma, \delta) = (0, -1)$ est différent des trois autres car il n'abrite que des points de contact isolés, placés aux points Γ , M et X de la zone de Brillouin. Les points de contact situés sur les points M et X de la zone de Brillouin ont des dispersions non quadratiques, analogues aux dispersions observées pour les deux lignes critiques qui se croient en ce point. Ce point $(\gamma, \delta) = (0, -1)$ correspond donc à la seule phase du diagramme pour laquelle on observe simultanément deux types distincts de points de pincement associés à des tenseurs de haut rangs. Les trois autres points spéciaux présentent quant à eux des lignes de contact rectilignes, formant un motif propre à chacun de ces trois points comme on peut le voir sur la figure 11.11. Ces lignes seront discutées en détail dans la section 11.7.

On peut finalement remarquer que quel que soit le point considéré dans le diagramme de phase il existe toujours un point de contact situé à chaque coin M de la zone de Brillouin. On a donc a priori toujours des corrélations algébriques dans le cadre du damier généralisé. Cela signifie qu'on peut supposer l'existence d'un champ de divergence nulle, associé à la propagation d'un photon. On se propose maintenant de construire localement un tel champ, et de montrer que cette construction est bien valable pour toutes les valeurs des paramètres γ et δ .

11.3 Points de pincement de haut rang

Il existe dans le diagramme de phase de la figure 11.2 trois lignes critiques séparant des phases étendues. Lors du passage de ces lignes on assiste à la création ou disparition de points de pincement en fonction de la direction selon laquelle est franchie la ligne. L'apparition de ces nouveaux points de pincement se fait généralement via l'apparition d'un point de pincement de plus haut rang, qui se sépare ensuite en sous points de

pincement standards. On se propose ici de décrire les cas spécifiques de ces trois lignes critiques, qui se révèlent être tous les trois différents. On classe les lignes en prenant en compte le nombre de points de pincement en lesquels se sépare le point de pincement de rang supérieur appartenant à la ligne. On appellera par la suite *multiplicité* le nombre de sous points produits par la séparation d'un point de pincement de haut rang.

11.3.1 Ligne de multiplicité 2

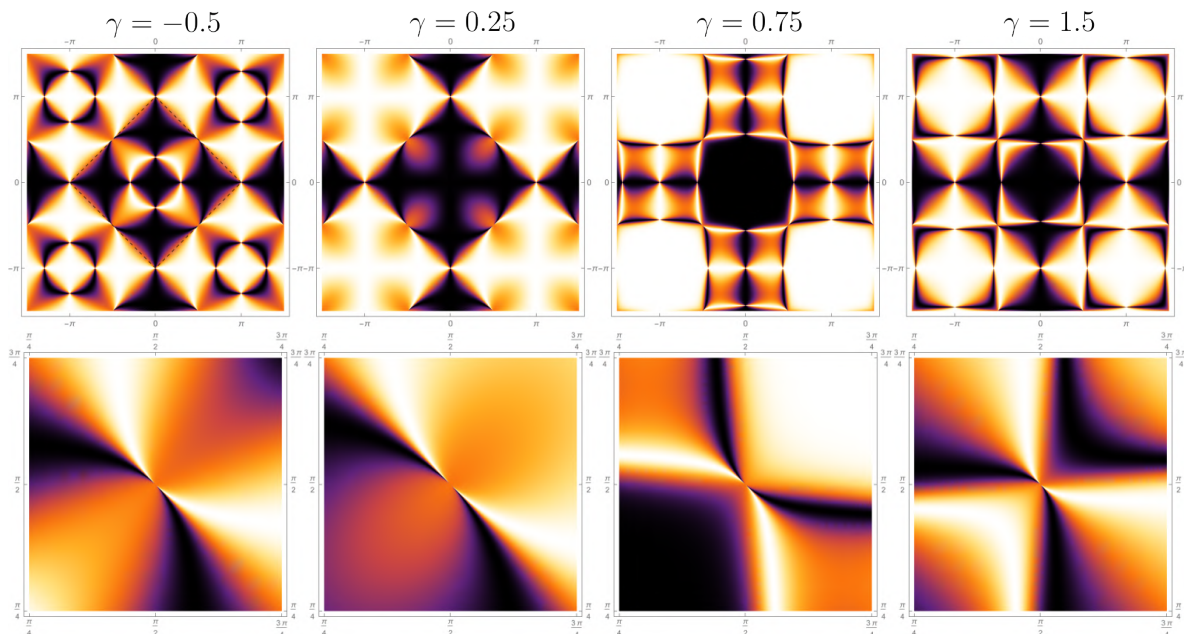


FIGURE 11.3 – Facteurs de structure pris selon la ligne critique d'équation $\delta = -1 + 2\gamma$, et obtenus par la méthode projective. On observe que le point de pincement situé en X , sur lequel on a fait un zoom sur la seconde ligne, possède une allure qui dépend de la phase rencontrée au sein de la ligne critique, cette dernière contenant la phase $M + \Gamma M + X$ pour $\gamma \in \mathbb{R} \setminus [-1, 0]$ et la phase $M + X$ pour $\gamma \in] -1, 0[$. Dans les deux phases le point de pincement possède un axe de symétrie ainsi qu'un axe d'antisymétrie, tout deux orthogonaux.

La ligne critique d'équation $\delta = -1 + 2\gamma$ dans l'espace des paramètres se caractérise par la présence d'un point de pincement situé au point X . Ce point se sépare en deux points de pincement selon les axes MX lorsqu'on s'éloigne de la ligne critique dans la phase $M + MX$ ou $M + MX + \Gamma M$. Ce point de pincement possède une structure très particulière comme on peut l'observer dans la figure 11.3 présentant des facteurs structure pris le long de la ligne critique. On observe si on zoome sur ces points de pincement qu'ils possèdent toujours un axe de symétrie selon $\Gamma\Gamma'$ et un axe d'antisymétrie selon MXM' . Cette antisymétrie doit être vue comme une symétrie¹ $\mathbb{S}(\mathbf{q}) \rightarrow 1/2 - \mathbb{S}(\mathbf{q})$.

1. La méthode projective donne le facteur de structure à une constante près, la constante implicite

Dans le contexte de l'approximation de Luttinger-Tisza, ce point de pincement spécial correspond à un point de contact qui possède une dispersion quadratique dans une direction et quartique dans l'autre, on a notamment

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = 2(2\gamma - 1)^2 q_+^2 + 2(2\gamma - 1)^2 q_-^4 - 4\gamma^2 q_+^2 q_-^2 - \frac{2}{3} (10\gamma^2 - 20\gamma + 7) q_+^4 \quad (11.5)$$

autour du point $(q_x, q_y) = \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right)$ et où on a pris $q_{\pm} = \frac{q_x \pm q_y}{2}$. Ce point ne rentre donc pas dans le cadre de la théorie présentée dans la section 10.3, correspondant ² à un point de Lifshitz[18].

11.3.2 Ligne de multiplicité 4+1

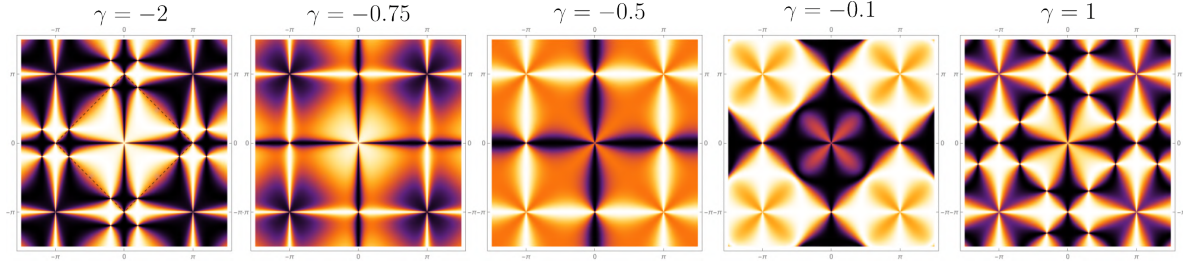


FIGURE 11.4 – Facteurs de structure pris selon la ligne critique d'équation $\delta = -1 - 2\gamma$, et obtenus par la méthode projective. On observe que le point de pincement central possède une symétrie de rotation d'angle $\pi/2$, caractéristique des points de pincements associés à un tenseur de rang 2.

La ligne d'équation $\delta = -1 - 2\gamma$ qui sépare les phases M et $M + \Gamma M$ possède un point de pincement situé en Γ qui se scinde en lui même plus quatre points de pincement situés le long des axes ΓM . On parlera ainsi d'un point de multiplicité 4 + 1. Ce point se révèle posséder quatre bras lorsqu'on regarde les facteurs de structure obtenus pour cette ligne, qui sont donnés sur la figure 11.4 (on pourra se rapporter à la figure 10.1 du chapitre précédent pour avoir une vue simplifiée de la structure de ces points de pincement à quatre bras).

Cela correspond dans le cadre de l'approximation de Luttinger-Tisza à un point contact entre la première bande excitée et les bandes plates associé à une relation de dispersion quartique. Dans le cas présent on a explicitement

$$\varepsilon(\mathbf{q}) \simeq 4(1 + \gamma)^2 (q_x^4 + q_y^4) + 4(3 + 14\gamma + 19\gamma^2) 2q_x^2 q_y^2, \quad (11.6)$$

au voisinage du point Γ , et ce seulement le long de la ligne critique $\delta = -1 - 2\gamma$. Comme on l'a vu plus haut dans la section 10.3 cela correspond à l'existence d'un

² tement choisie ici est telle que $\mathbb{S}(\mathbf{q})$ soit compris entre 0 et 1.

2. On utilise ici cette terminologie par analogie aux points de Lifshitz correspondants dans une théorie de Ginzburg-Landau à une fonctionnelle ayant des dérivées d'ordres différents selon la direction[18].

tenseur symétrique E_{ij}^α qui satisfait une équation de Gauss de rang 2

$$\partial_i E_{ij}^\alpha = 0 \quad (11.7)$$

pour chaque composante de spin α [14, 15, 19, 11].

11.3.3 Ligne de multiplicité 8+1

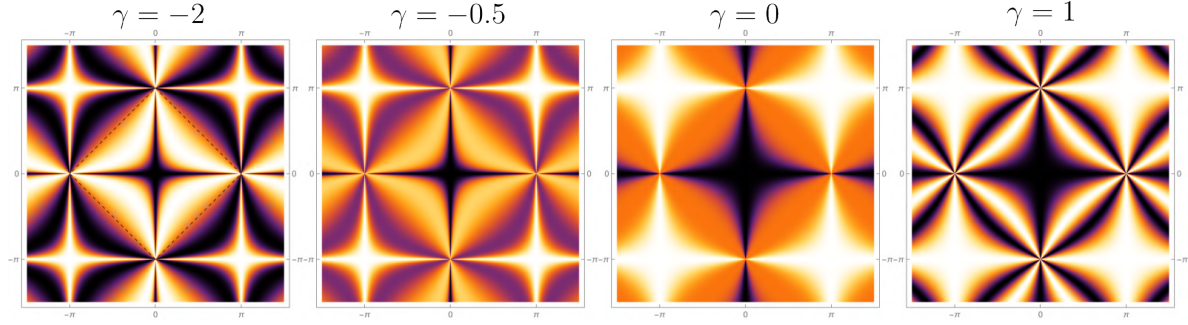


FIGURE 11.5 – Facteurs de structure pris selon la ligne critique d'équation $\delta = (1 - 2\gamma)/3$, et obtenus par la méthode projective. Le point de pincement situé au point M se révèle posséder une structure inhabituelle, présentant notamment "six bras".

On se concentre maintenant sur la ligne critique $\delta = \frac{1-2\gamma}{3}$ correspondant à la phase M , et séparant soit les phases M et $M + \Gamma M + MX$, soit les phases $M + MX$ et $M + \Gamma M$. Dans le premier cas le point de contact situé au point M se scinde en lui même plus 8 sous-points de contact, correspondant à une multiplicité de 8+1. Dans le second cas quatre points convergent vers le point M le long des axes $, jusqu'à coalescer en un unique point au niveau de la ligne de contact, avant de se scinder en quatre nouveaux sous points de contact selon les axes $. Ce type de comportement est spécifique à cette ligne critique, c'est la seule pour laquelle on observe des points de contact converger selon un axe pour émerger selon un autre. Puisque le point critique situé en $est susceptible de se séparer en lui même plus 8 différents types de points de contact, on dira là aussi qu'il a une multiplicité valant $8 + 1$.$$$

On peut observer sur la figure 11.5 que le facteur de structure associé à ce point possède une structure tout à fait inhabituelle présentant généralement "six bras". On peut cependant noter que sur l'intervalle $\gamma \in [0, 1/2]$ la structure de ce point de pincement semble être analogue à celle d'un point de pincement standard, comme présenté sur la figure 11.5 pour $\gamma = 0$, et sur la figure 11.7 pour $\gamma = 1/2$ et $\delta = 0$. Ce point de pincement particulier correspond dans l'approximation de Luttinger-Tisza à un point de contact ayant une dispersion sextique

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = (q_x^2 + q_y^2) \left[\alpha(q_x^4 + q_y^4) + 2\beta q_x^2 q_y^2 \right] \quad (11.8)$$

avec

$$\alpha = \frac{(1 + \gamma)^2}{9}, \quad \beta = \frac{7 - 34\gamma + 31\gamma^2}{9}. \quad (11.9)$$

Une telle dispersion correspond selon la section 10.3 à un l'existence d'un tenseur symétrique \mathbf{E}^α de rang 3 pour chaque composante de spin α , satisfaisant à l'équation de Gauss sans charges

$$\partial_i E_{ijk}^\alpha = 0, \quad (11.10)$$

pour tout j, k (indices d'espace) et pour tout α . On a vu que ce type de tenseur donnait lieu à des points de pincement pouvant avoir six bras, ou pouvant ressembler à des points de pincements standard de rang 1. C'est bien ce qu'on observe ici sur la figure 11.5.

11.4 Analyse topologique du vecteur de contrainte

On se propose ici de réaliser l'étude des propriétés topologiques de l'unique vecteur de contrainte en jeu. On rappelle que ce champ vectoriel ayant deux composantes réelles les défauts topologiques associés sont des vortex, nécessairement singuliers en leur centre. La présence de vortex dans une région peut notamment être établie en calculant la charge topologique de cette région. Cette dernière représente le nombre de fois où le vecteur $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ s'enroule sur lui même lorsqu'on fait le tour d'une région Ω selon son contour $\partial\Omega$. Elle peut donc s'écrire

$$Q = \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial\Omega} d\phi \quad (11.11)$$

où l'angle ϕ correspond à une paramétrisation angulaire du vecteur de contrainte, pouvant par exemple être définie selon

$$\tilde{\mathbf{L}}_{\mathbf{q}} = \frac{\mathbf{L}_{\mathbf{q}}}{\|\mathbf{L}_{\mathbf{q}}\|} = \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{pmatrix}. \quad (11.12)$$

De cette façon on voit notamment que la charge topologique d'un vortex est nécessairement un entier. Afin de faire directement intervenir les composantes du vecteur de contrainte, on peut réécrire cette charge topologique comme³

$$Q = \frac{1}{2\pi} \oint_{\partial\Omega} [\tilde{L}_1(\mathbf{q}) \nabla \tilde{L}_2(\mathbf{q}) - \tilde{L}_2(\mathbf{q}) \nabla \tilde{L}_1(\mathbf{q})] \cdot d\mathbf{q}. \quad (11.13)$$

Il faut être attentif lors du calcul de la charge topologique d'une région à bien choisir cette dernière. Si la région choisie contient par exemple une paire de vortex-antivortex, alors la charge topologique totale de cette région sera la somme des deux charges et donc égale à zéro. On propose sur la figure 11.6 une analyse de la vorticit  pour diff rentes valeurs des deux param tres γ et δ . Sur cette figure on a mis en valeur les vortex

3. On a utilis  que pour tout vecteur \mathbf{l} de norme 1 on a $\mathbf{l} \cdot (\nabla \mathbf{l}) = 0$ pour obtenir l' galit  (11.13).

de charge $Q = 1$ en les entourant de rouge, et les antivortex de charge $Q = -1$ en les entourant de bleu. On peut observer qu'il existe toujours un vortex de charge 1 situé au point M de coordonnées $(\pi/a, 0)$, ainsi qu'un antivortex de charge -1 situé au point M' de coordonnées $(0, \pi/a)$. Cette situation semble s'inverser lorsque des lignes de dégénérescence passent par les points M , ce qui est le cas pour $(\gamma, \delta) = (-1, 1)$ ou $(1/2, 0)$. On peut cependant noter que dans ce cas le champ est singulier le long de ces lignes, signifiant que quelque soit le contour d'intégration choisi pour calculer Q le champ sera singulier en un point de ce contour, faussant le calcul. On peut voir qu'au point $\gamma = 1, \delta = -1/3$ les vortex (antivortex) situés aux points M (M') ont une charge $Q = -3$ ($Q = 3$). On a vu précédemment que ce point appartient à la ligne critique séparant les phases $M + \Gamma M$ et $M + MX$. Or on voit que dans la phase $M + \Gamma M$ illustrée par le point $\gamma = -1, \delta = 0$ le point M est entouré de quatre antivortex de charge $Q = -1$. Il est donc naturel que lorsque, en s'approchant de la ligne critique, ces quatre antivortex convergent vers le point M , cela conduise à la formation d'un antivortex de charge $Q = -3$. C'est dû au fait que la vorticit  est une propri t  longue port e, se calculant sur un contour donn e, et ne doit donc pas  tre impact e par des modifications locales se produisant   l'int rieur de ce contour. On peut noter que de l'autre c t  de la ligne critique, cet antivortex se s pare   nouveau en un vortex situ  en M , et quatre antivortex plac s cette fois le long des axes MX , comme illustr  sur le trac  obtenu pour $\gamma = 1, \delta = -1$ repr sent  sur la figure 11.6.

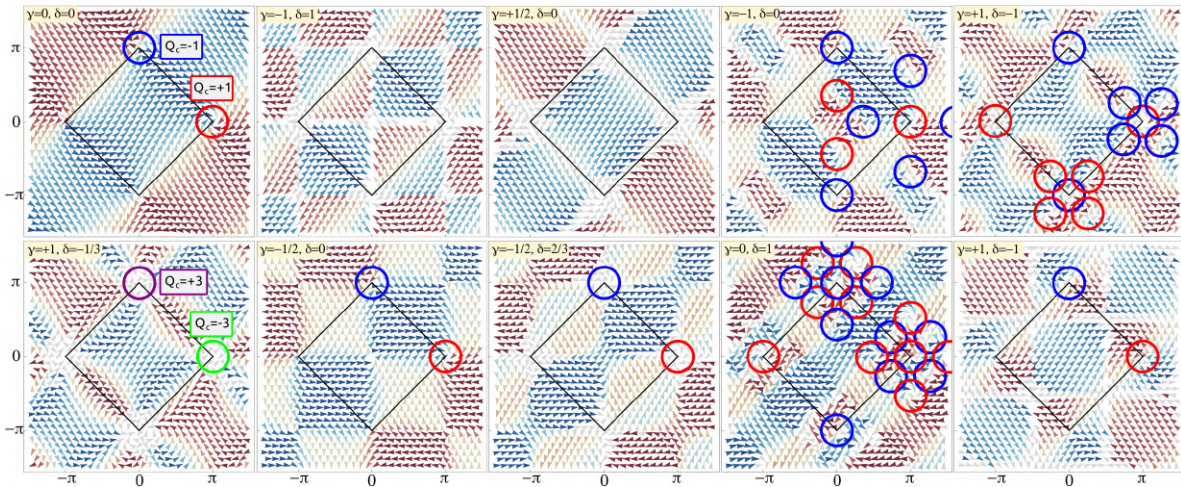


FIGURE 11.6 – Trac  du champ vectoriel \mathbf{L}_q dans l'espace r ciproque pour diff rents points (γ, δ) dans l'espace des param tres. On observe qu'il y a toujours un vortex de charge 1 (repr sent  en rouge) situ  au point M de coordonn es $(\pi/a, 0)$, et un antivortex de charge -1 (repr sent  en bleu) situ  au point M' de coordonn es $(0, \pi/a)$. Cette situation semble s'inverser lorsque $(\gamma, \delta) = (-1, 1)$ ou $(1/2, 0)$, mais dans ce cas la charge topologique aux points M est mal d finie   cause des lignes de d g n rescence, qui se traduisent ici par l'annulation de \mathbf{L}_q le long d'axes traversant les points M .

On serait donc tent  de supposer au vu de cette exemple que les points de pincement

d'ordre supérieur correspondent à des vortex de charge $|Q| > 1$. Cela n'est en réalité généralement pas le cas, comme on peut le voir par exemple sur le tracé vectoriel obtenu $\gamma = -1/2$ et $\delta = 0$, où il y a un point de pincement de multiplicité $4 + 1$ situé en Γ qui semble pourtant avoir une vorticité nulle. Ce résultat n'a rien de surprenant, puisque ce point appartient à la ligne critique de phase $M + \Gamma$ séparant les phases M et $M + \Gamma M$. Puisque du côté de la phase M il n'y a pas de point de pincement en Γ et donc pas de vorticité dans son voisinage, il n'est pas surprenant que lors du passage de cette ligne critique la vorticité demeure nulle. On voit ainsi qu'une fois la ligne franchie seules des paires vortex-antivortex ont été produites, dont la vorticité totale est bien nulle, comme illustré sur la figure obtenue pour $\gamma = -1$, $\delta = 0$.

Ces observations nous amènent à conclure que l'analyse topologique du vecteur de contrainte ne permet pas de repérer tous les points de pincement de haut rang. Une telle analyse ne comporte donc aucun avantage substantiel comparé à une analyse suivant l'approximation de Luttinger Tisza, se révélant plus coûteuse calculatoirement parlant et moins précise.

11.5 Facteur de structure et chaleur spécifique

11.5.1 Méthode projective

Le facteur de structure dans la limite d'une température nulle peut être obtenu selon la méthode explicitée dans la section 10.2.1. On peut ainsi écrire explicitement son expression à température nulle en utilisant le vecteur de contrainte selon l'équation (10.16) comme

$$\mathbb{S}(\mathbf{q}) \propto 1 - 2 \frac{L_1 L_2}{\|\mathbf{L}\|^2}. \quad (11.14)$$

Les tracés correspondant à ce facteur de structure sont donnés sur la figure 11.7 où ils sont comparés avec les facteurs de structure obtenus par Monte Carlo.

11.5.2 Simulations Monte Carlo

On peut utiliser les simulations de Monte Carlo pour tracer le facteur de structure pour un couple de paramètres (γ, δ) et une température donnés. Les facteurs de structure ainsi obtenus sont donnés sur la figure 11.7, où ils sont comparés à la prédiction analytique obtenue par la méthode projective explicitée plus bas. On présente sur cette figure un facteur de structure pour chaque phase du diagramme de phase de la figure 11.2. On présente notamment les quatre phases étendues sur la première ligne, les points spéciaux sur la seconde ligne, et des points appartenant aux quatre lignes critiques sur les deux dernières lignes de la figure. Chaque facteur de structure obtenu confirme les prédictions réalisées à l'aide de l'approximation de Luttinger Tisza, confirmant la localisation des points de pincement ainsi que des lignes de dégénérescence qui apparaissent ici comme des lignes claires.

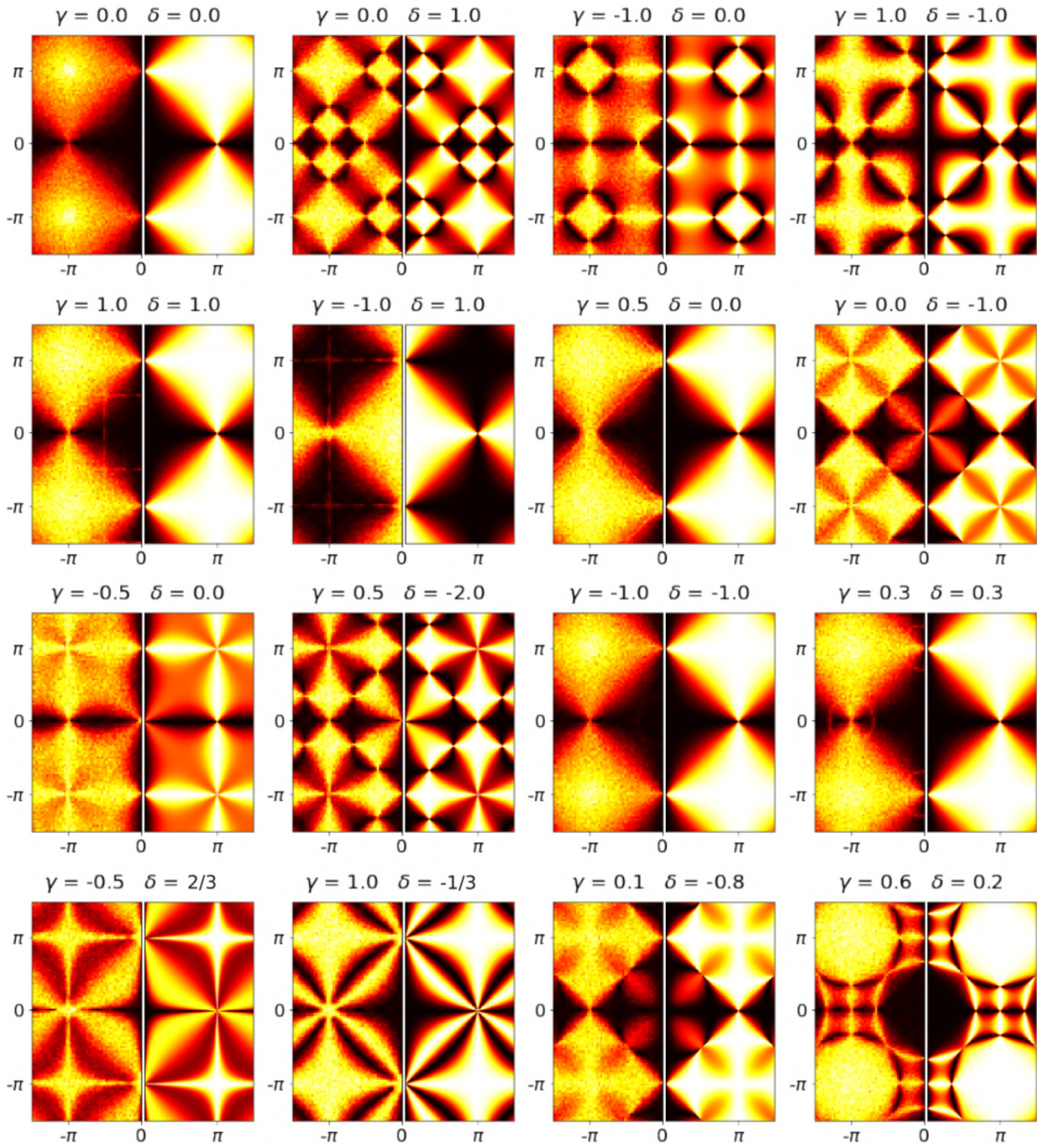


FIGURE 11.7 – Tracé du facteur de structure dans la zone de Brillouin. La partie gauche de chacune des figures présente le facteur de structure obtenu par Monte Carlo, quand la partie droite présente le facteur de structure obtenu via la méthode projective, donné par l'équation (11.14). Chaque facteur de structure présenté illustre une phase du diagramme de phase 11.2. On a en particulier les quatre phases étendues qui sont illustrées sur la première ligne, les points spéciaux donnés dans la seconde ligne, tandis que les deux dernières lignes présentent des facteurs de structures correspondant aux quatre lignes critiques du diagramme de phase.

On peut observer que le point spécial $(\gamma, \delta) = (0, -1)$, situé à l'intersection de deux lignes critiques présentant toutes deux des points de pincement de multiplicité strictement supérieure à l'unité, est le seul point du diagramme de phase pour lequel on observe deux types de points de pincement de multiplicité non unitaire. Cette observation est en parfait accord avec l'étude des dispersions locales de ces points de contact réalisée dans le contexte de l'approximation de Luttinger Tisza.

On observe que l'accord entre les facteurs de structure obtenus grâce à la méthode projective et les simulations de Monte-Carlo est excellent, confirmant que la méthode projective permet de réaliser une bonne prédiction du facteur de structure dans le domaine de température correspondant à l'existence d'une phase magnétique coopérante. A plus basse température le système finit par se figer, correspondant pour le facteur de structure à l'apparition de pics de Bragg indiquant que le système s'ordonne.

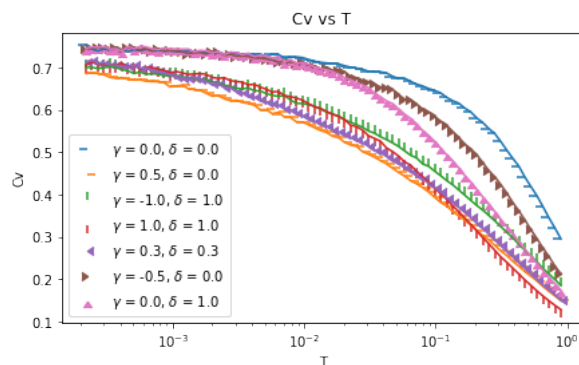


FIGURE 11.8 – Chaleur spécifique (en unité de k_B) en fonction de la température, calculée grâce à des simulations Monte Carlo pour différents points remarquables du diagramme de phase.

On peut calculer la chaleur spécifique C_v du système pour un couple de paramètres (γ, δ) et une température donnés. Ce résultat est présenté sur la figure 11.8, où la chaleur spécifique est tracée en unité de la constante de Boltzmann. On y observe que pour $\gamma = \delta = 0$ la chaleur spécifique tend vers $3/4$ lorsque la température tend à s'annuler. Ce résultat est en bon accord avec le compte des modes zéros autorisés par le réseau du damier associé au hamiltonien sur plaquette. On a en effet dans ce cas $q = 4$ spins par plaquette, avec chaque spin appartenant respectivement à $b = 2$ plaquettes, voir figure 11.9. On en déduit que le nombre de modes d'énergie nulle par plaquette vaut

$$F = \frac{q}{b}(n - 1) - n = 1 \quad (11.15)$$

où on rappelle que n réfère à la dimension des spins considérés et vaut donc $n = 3$ pour les spins de Heisenberg considérés ici. La chaleur spécifique associée à ces modes 0 vaut ainsi

$$C_v = \frac{bn}{2q} = \frac{3}{4}, \quad (11.16)$$

en excellent accord avec la chaleur spécifique obtenue par Monte Carlo pour $\delta = \gamma = 0$, donnée sur la figure 11.8. Ce résultat est a priori supposé changer lorsque γ ne vaut plus zéro puisqu'alors les valeurs de q et b doivent être modifiées. On peut cependant voir sur la figure 11.9 que pour γ non nul on a $q = 12$ et $b = 6$, ce qui signifie que le ratio q/b entrant dans le calcul de la chaleur spécifique ne varie pas. De même pour γ et δ non nuls on a $q = 16$ et $b = 8$ et donc le ratio q/b vaut là encore $1/2$. Cela explique pourquoi on devrait a priori avoir pour γ et δ quelconques toujours une chaleur spécifique valant $3/4$. C'est bien ce qui est observé sur la figure 11.8 lorsque le système ne possède pas de lignes de dégénérescence. On constate que lorsqu'une de ces dernières apparaît dans le système la chaleur spécifique semble plus petite, comme illustré par les chaleurs spécifiques obtenues pour les couples de paramètres $(\gamma, \delta) = (1, 1), (-1, 1), (0.5, 0)$ et $(0.3, 0.3)$. Cela suggère que le sous ensemble des états fondamentaux correspondant aux lignes de dégénérescence permet l'existence de modes mous supplémentaires, résultant en une baisse effective de la chaleur spécifique.

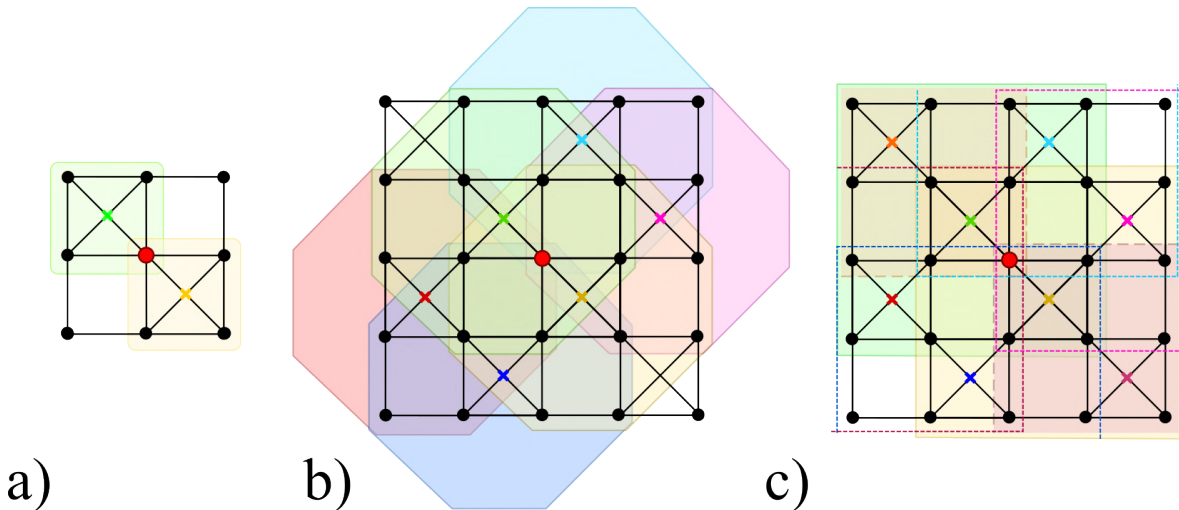


FIGURE 11.9 – On présente ici des schémas illustrant le nombre de spins par plaquette, ainsi que le nombre de plaquettes selon lesquelles sont partagés chacun des spins. En a) on illustre le cas $\delta = \gamma = 0$, on voit ici immédiatement que chaque plaquette contient $q = 4$ spins, et que le spin représenté en rouge appartient à $b = 2$ plaquettes. Le schéma b) correspond au cas $\delta = 0$ mais γ non nul. On a cette fois $q = 12$ spins par plaquette, les plaquettes étant représentées de la même couleur que la croix qui en repère le centre. On voit de plus que le spin représenté en rouge est recouvert par les $b = 6$ plaquettes voisines. La figure c) correspond au cas où γ et δ sont non nuls, on a alors des plaquettes carrées contenant $q = 16$ spins. Chacun de ces spins est recouvert par les $b = 8$ plaquettes voisines, représentées par des contours pleins ou pointillés, et dont les centres sont là encore marqués par des croix dont la couleur est harmonisée avec le contour.

11.6 Loi de Gauss

L'existence d'un point de contact quadratique dans le contexte de l'approximation de Luttinger-Tisza, corrélée par la présence d'un point de pincement à deux bras dans le tracé du facteur de structure obtenu via des simulations Monte-Carlo, est généralement associée à l'existence d'une loi de Gauss[9]. Cette loi porte sur un champ vectoriel \mathbf{E} qui est une version continue d'un champ local \mathbf{P} appelé tenseur de polarisation, qui possède les mêmes propriétés et peut être construit sur le réseau bidual⁴ du réseau original. On se propose maintenant de faire la construction locale, explicite, de ce tenseur de polarisation dans le cas du damier généralisé. Afin d'être le plus pédagogue possible on commence par le cas du damier simple $\delta = \gamma = 0$ pour lequel la construction est la plus simple.

11.6.1 Cas du damier simple

On veut construire un champ qui est de divergence nulle pour chaque plaquette. Pour cela on va utiliser la propriété qui nous dit que dans l'état fondamental la somme des quatre spins composant une plaquette p doit être nulle

$$\mathcal{S}_p = \sum_{i \in p} \mathbf{S}_i = 0. \quad (11.17)$$

Considérons le réseau bidual du damier, qui est un réseau carré tourné de 45° . Ce réseau est bipartite⁵ et on peut donc orienter chaque lien j de ce réseau en allant par exemple toujours du sous réseau A vers le sous réseau B . On se propose maintenant d'attacher un flux $\mathbf{\Pi}_j$ à chacun de ces liens. Prenons maintenant un site p de ce réseau pour lequel les quatre liens sont rentrant, et demandons à ce que la somme des quatre flux associés à ces liens soit égale à \mathcal{S}_p et donc nulle. On voit qu'on peut simplement prendre chaque flux comme étant égal au spin placé sur le lien correspondant, $\mathbf{\Pi}_j = \mathbf{S}_j$, tel que

$$\sum_{j \in p} \mathbf{\Pi}_j = \sum_{i \in p} \mathbf{S}_i = \mathcal{S}_p = 0. \quad (11.18)$$

On voit alors que le tenseur de polarisation doit être sur un lien j comme

$$P_{ij}^\alpha = S_j^\alpha u_j^i \quad (11.19)$$

avec u_j^i la i -ème composante du vecteur \mathbf{u}_j décrivant le lien orienté j considéré. Le tenseur de polarisation \mathbf{P}^α possède un indice de spin α car on traite ici de spins de

4. Le réseau bidual est le réseau pour lequel chaque spin du réseau original est placé sur un des liens du réseau bidual.

5. Un réseau bipartite est un réseau au sein duquel chaque site peut être colorié en utilisant deux couleurs, de telle sorte que chaque site d'une couleur donnée ne soit entouré que de sites de l'autre couleur.

Heisenberg qui ont trois composantes. On voit maintenant que si on définit pour chaque composante α de spin une version continue du champ de polarisation $\mathbf{E}^\alpha(\mathbf{r})$ telle que

$$\mathbf{E}^\alpha(\mathbf{r}_j) = \mathbf{P}_j^\alpha \quad (11.20)$$

pour chaque lien j dont le centre est repéré par le vecteur \mathbf{r}_j . On a alors que

$$\nabla \cdot \mathbf{E}^\alpha = 0 \quad (11.21)$$

pour les trois composantes de spin α . Cela peut se montrer explicitement en écrivant la dérivée continue sur \mathbf{E} comme une dérivée sur réseau pour \mathbf{P} ,

$$\nabla \cdot \mathbf{E}^\alpha|_{\mathbf{R}_p} \simeq \sum_{i=x,y} \frac{\sqrt{2}}{a} \mathbf{e}_i \cdot \left[\mathbf{P}^\alpha \left(\mathbf{R}_p + \frac{a}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_i \right) - \mathbf{P}^\alpha \left(\mathbf{R}_p - \frac{a}{\sqrt{2}} \mathbf{e}_i \right) \right], \quad (11.22)$$

où les \mathbf{e}_i sont deux vecteurs unitaires pris selon les axes naturels du réseau bidual. Le produit scalaire avec \mathbf{e}_i donne un signe opposé pour chacun des deux termes entre crochet. On a ainsi

$$\nabla \cdot \mathbf{E}^\alpha|_{\mathbf{R}_p} \simeq \pm \frac{\sqrt{2}}{a} \sum_{j \in \mathcal{P}} S_j^\alpha = 0, \quad (11.23)$$

avec le signe qui dépend de si on regarde un site du réseau bidual pour lequel les flux sont rentrants ou sortants. On a ainsi pu construire une loi de Gauss, qui couplée avec les arguments évoqués dans la section introductive 9.2, permet d'expliquer l'observation de points de pincements pour le damier simple. On se propose maintenant de montrer qu'une telle construction est possible dans le cas du damier généralisé.

11.6.2 Damier généralisé

Dans le cas où γ et δ sont non nuls on va devoir adapter les flux attachés à chaque lien du réseau bidual, pour que la somme des flux adjacents à une plaquette soit égale au spin total de la plaquette considérée. On voit que ces flux sont nécessairement composés des spins appartenant au recouvrement de deux plaquettes voisines, ces flux étant attachés au lien reliant ces deux plaquettes. Cette condition peut être visualisée sur la figure 11.10, où on a représenté deux plaquettes voisines, ainsi que le lien orienté qui les lie. En suivant les notations de la partie droite de cette figure on peut notamment définir le flux attaché au lien rouge, associé à l'indice i , comme

$$\mathbf{\Pi}_i = \alpha \mathbf{S}_i + \beta \sum_{j \in \text{jaune}} \mathbf{S}_j + \eta \sum_{j \in \text{vert}} \mathbf{S}_j + \delta \sum_{j \in \text{rose}} \mathbf{S}_j. \quad (11.24)$$

On veut maintenant que la somme des quatre flux entrants définis de la sorte soit égale au spin total \mathcal{S}_p de la plaquette p dans laquelle entrent ces flux, soit

$$\sum_{i=1}^4 \mathbf{\Pi}_i = \mathcal{S}_p. \quad (11.25)$$

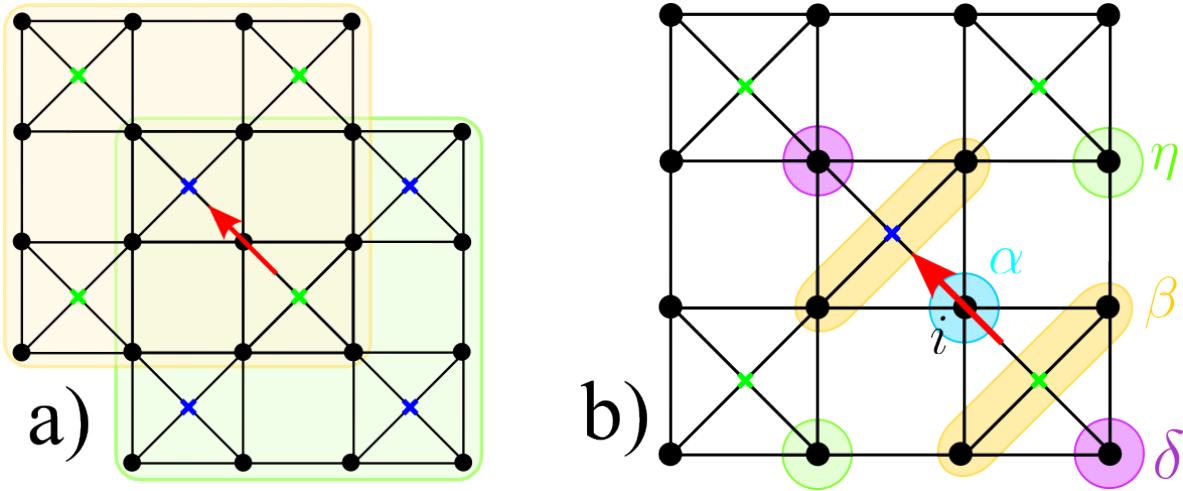


FIGURE 11.10 – Schéma de construction permettant d’obtenir le tenseur de polarisation pour le damier généralisé. Le schéma a) indique la zone de recouvrement entre deux plaquettes voisines. Les spins intervenant dans la constitution du flux attaché au lien entre ces deux plaquettes devront appartenir à cette sous région. Les sites du réseau bidual du damier sont situés au centre de chaque case du damier. Ce réseau étant bipartite il peut être scindé en deux sous réseaux tels que les sites d’un sous réseau ne soient liés qu’à des sites de l’autre sous réseau. Ces deux sous réseaux sont repérés par des croix de couleur verte ou bleue. Les régions colorées du schéma b) désignent quels spins sont pris en compte dans le calcul du flux attaché au lien orienté rouge, et avec quels coefficients ils sont comptés.

Cela impose alors les conditions suivantes sur les trois paramètres α , β et η

$$\begin{aligned} \alpha + 2\beta + \delta &= 1, \\ \beta + \eta &= \gamma. \end{aligned} \tag{11.26}$$

La première condition s’obtient notamment en considérant les spins de la plaquette réduite centrale, dont les spins entrent avec un coefficient 1 dans le calcul du spin total \mathcal{S}_p de la plaquette étendue. Si on considère l’un de ces spins du point de vue des flux entrants, on voit qu’un premier flux apporte ce spin avec un coefficient α , le flux opposé le fait rentrer avec un coefficient δ , tandis que les deux flux latéraux le portent avec un coefficient β . La seconde équation s’obtient cette fois en considérant les spins secondaires, entrant avec un coefficient γ dans le calcul du spin total \mathcal{S}_p de la plaquette étendue. Ces spins entrent chacun via deux flux adjacents, l’un le portant avec un coefficient β et l’autre avec un coefficient η . On peut noter qu’il existe en réalité une troisième équation portant sur les derniers spins de la plaquette, mais cette dernière ne fait que fixer le dernier coefficient comme étant égal à δ , on ne la mentionne donc pas explicitement ici. On voit qu’on a simplement deux conditions à satisfaire pour

trois⁶ degrés de liberté α , β et η . Cela signifie que ces conditions pourront toujours être satisfaites quelles que soient les valeurs des paramètres γ et δ . Le tenseur de polarisation peut finalement être construit à partir des flux ainsi constitués, en suivant la même procédure que pour le damier simple. On définit ici le tenseur de polarisation sur le lien j selon

$$P_{ji}^\alpha = \Pi_j^\alpha u_j^i \quad (11.27)$$

avec toujours \mathbf{u}_j le vecteur donnant la direction du lien j . On prend ensuite la limite continue de ce tenseur en introduisant le tenseur $\mathbf{E}^\alpha(\mathbf{r})$ défini à partir du tenseur de polarisation discret selon

$$\mathbf{E}^\alpha(\mathbf{r}_j) = \mathbf{P}_j^\alpha, \quad (11.28)$$

pour chaque lien j dont le centre est repéré par le vecteur \mathbf{r}_j . Ce tenseur satisfait ainsi par construction à la loi de Gauss

$$\nabla \cdot \mathbf{E}^\alpha = 0 \quad (11.29)$$

pour les mêmes raisons que celles avancées dans le cas du damier simple. On en déduit qu'il existe donc au moins une loi de Gauss constructible explicitement pour tout point de l'espace des paramètres, ce qui corrobore le fait qu'on observe au moins un point de pincement en tout point du diagramme de phase.

On se tourne maintenant vers l'étude des lignes de dégénérescence, qui ont été mises en évidence sous la forme de ligne de contact dans l'étude de la structure de bande obtenue grâce à l'approximation de Luttinger-Tisza.

11.7 Lignes de dégénérescence

On appelle lignes de dégénérescence les lignes de contact pouvant se former entre la bande dispersive et les bandes plates. Des exemples de telles lignes sont données pour trois points spéciaux sur la figure 11.11. Ces lignes peuvent aussi être observées dans les facteurs de structure obtenus via des simulations Monte Carlo, comme représenté sur la figure 11.7. Elles y apparaissent comme des lignes claires, indiquant que les configurations situées le long de ces lignes de dégénérescence sont plus probables. On se propose maintenant d'expliquer leur origine en raisonnant dans l'espace réel des configurations, en traitant séparément les différentes lignes de dégénérescence observées.

On pourra noter avant d'aller plus loin que ces lignes ne correspondent pas aux lignes de pincement observées en trois dimensions [20, 21]. Ces lignes sont en effet telles qu'on observe un point de pincement lorsqu'on regarde un plan transpercé par la ligne de pincement, le point de pincement étant justement situé au niveau du point d'intersection entre la ligne et le plan. Ces lignes de pincement n'ont donc un sens qu'en trois dimensions au moins.

6. Cela signifie aussi qu'on pourra, par soucis de simplicité, se restreindre par exemple aux constructions pour lesquelles $\eta = 0$ ou $\beta = 0$, pour lesquelles on aura deux équations et deux degrés de liberté.

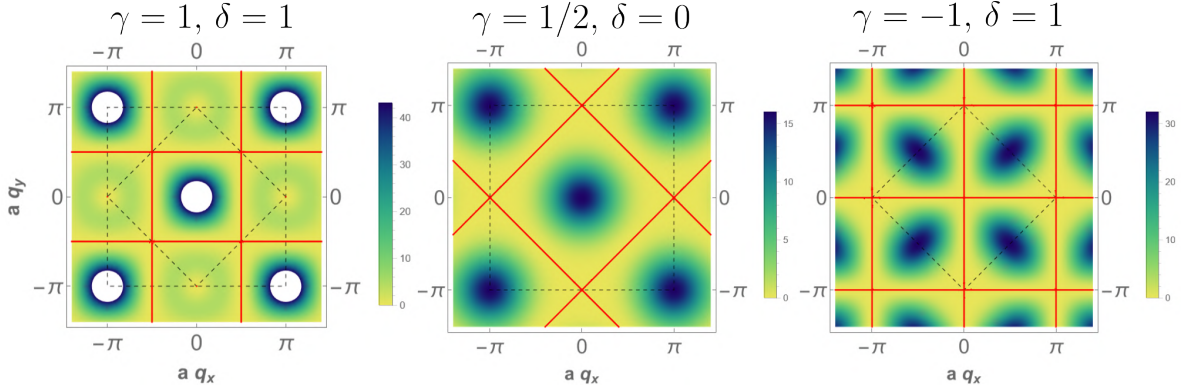


FIGURE 11.11 – Représentation sous la forme d’une carte en température de la bande dispersive $\varepsilon(\mathbf{q})$ dans l’espace réciproque. Les lignes rouges correspondent aux équipotentielles $\varepsilon(\mathbf{q}) = 0$, et indiquent donc les lignes et points de contact. On a représenté les trois des quatre points spéciaux marqués par des points rouge sur le diagramme de phase qui présentent des lignes de contact.

11.7.1 Lignes de dégénérescence rectilignes

On commence par étudier les cas illustrés sur la figure 11.11 qui présentent des lignes de dégénérescence rectiligne. Ces lignes apparaissent dans les simulations Monte Carlo comme superposées au facteur de structure qu’on obtient en faisant varier légèrement γ et δ du côté de la phase M . On peut ainsi voir le facteur de structure comme étant composé du facteur de structure "basique" obtenu pour cette phase, plus une contribution spéciale n’apparaissant que pour ce point. Cette contribution particulière peut de plus être approximée comme des lignes de divergence dans l’espace réciproque, de la forme

$$S_{dl}(\mathbf{q}) = \delta(c + q_i), \quad (11.30)$$

avec c une constante dépendant du cas considéré, et q_i pris selon la direction de la ligne considérée. Un tel facteur de structure peut directement s’interpréter dans l’espace réel.

Ligne de dégénérescence XX'

On commence pour cela par traiter le cas $\gamma = \delta = 1$ qui se révèle être le plus simple. Pour de tels paramètres le spin total d’une plaquette étendue P peut s’écrire simplement comme

$$\mathbf{S}_P = \sum_P \mathbf{S}_i \quad (11.31)$$

avec donc seulement des 1 comme coefficients. On rappelle que ce spin total doit être nul pour les configurations de l’état fondamental. On peut notamment satisfaire cette contrainte ligne par ligne. On prend pour ce faire les quatre spins composant une des quatre lignes de la plaquette étendue P , et on impose que la somme de ces quatre spins

soit nulle,

$$\sum_{i=1}^4 \mathbf{S}_{A_i} = 0, \quad (11.32)$$

avec les spins numérotés comme sur la figure 11.12. Dans ce cas on voit qu'il n'y a, a priori, aucune corrélations d'une ligne à l'autre, impliquant que la moyenne des corrélations spin-spin selon l'une des directions du réseau sera toujours nulle. On voit aussi que puisque les plaquettes étendues se chevauchent entre elles, la plaquette suivante contiendra les trois spins \mathbf{S}_{A_2} , \mathbf{S}_{A_3} et \mathbf{S}_{A_4} , ainsi que le cinquième spin de la ligne, comme illustré sur la figure 11.12. Puisque pour cette plaquette on aura la condition

$$\mathbf{S}_{A_2} + \mathbf{S}_{A_3} + \mathbf{S}_{A_4} + \mathbf{S}_{A_5} = 0, \quad (11.33)$$

on voit que cela impose que le cinquième spin de la ligne soit égal au premier $\mathbf{S}_{A_5} = \mathbf{S}_{A_1}$. Ces lignes ne vont donc faire que répéter ces quatre spins de base, toujours ordonnés de la même manière.

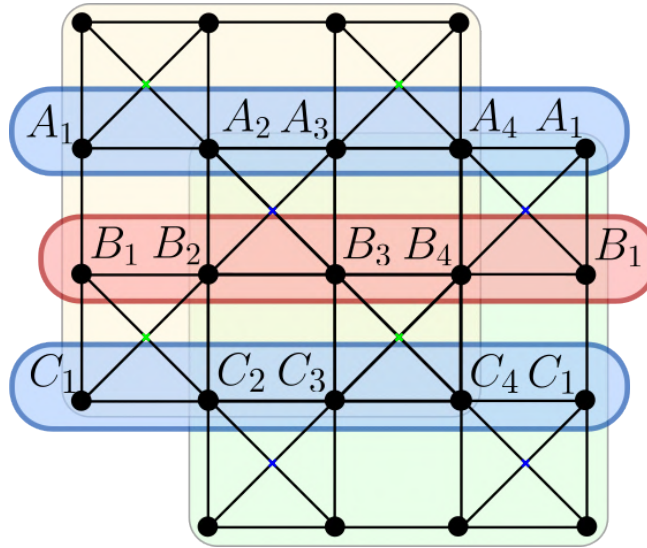


FIGURE 11.12 – Construction dans l'espace réel des configurations responsables de l'apparition de lignes de dégénérescence selon les axes XX' dans le facteur de structure. On peut observer que l'enchevêtrement des plaquettes étendues impose que chaque ligne ne puisse contenir et répéter que quatre spins seulement. Les lignes successives sont complètement décorrélées, le choix des quatre spins de base pour une ligne ne dépendant pas des lignes adjacentes.

On voit que l'absence de corrélations selon une direction permet un dégénérescence massive de ces configurations. On voit de plus que chacune de ces configurations admet la même fonction de corrélation spin-spin dans l'espace réel, qui a la forme

$$S(\mathbf{r})_{dl} \cong \delta(y) f_{4a}(x) \quad (11.34)$$

avec $f_{4a}(x)$ une fonction ayant une périodicité de $4a$. On aura bien sûr la même construction possible avec des lignes de spins prises selon l'axe y , donnant lieu à des fonctions de corrélation de la forme $\delta x f_{4a}(y)$. La transformée de Fourier du facteur de structure (11.34) produit dans l'espace réciproque des lignes verticales s'étalant le long de q_y , et dont les positions correspondent aux harmoniques de la fonction $f_{4a}(x)$. Cette fonction ayant une périodicité $4a$ les lignes seront situées en

$$n \frac{2\pi}{4a}, \quad n \in \mathbb{Z}^*. \quad (11.35)$$

On observe cependant sur la figure 11.11 qu'il n'y a pas dans ce cas de lignes de dégénérescence placées en $x_i = \pm \frac{\pi}{a}$. Cela peut se comprendre en remarquant que les harmoniques de période a correspondent à une situation où $\mathbf{S}_{A_1} = -\mathbf{S}_{A_2}$. Or dans cette situation il n'y a rien qui impose que les doublets $(\mathbf{S}_{A_i}, -\mathbf{S}_{A_{i+1}})$ et $(\mathbf{S}_{A_{i+2}}, -\mathbf{S}_{A_{i+3}})$ soient corrélés. On peut en effet choisir une direction arbitrairement pour chaque doublet, et toujours satisfaire la condition (11.32). Cela va donc simplement produire une fonction de corrélation à très courte portée (de l'ordre du pas de réseau), résultant dans l'espace réciproque en un fond diffus indétectable. Il est donc naturel de pas observer de lignes de dégénérescence aux positions $n \frac{\pi}{a}$ dans ce cas.

Le fait que les lignes de dégénérescence apparaissent dans les simulations Monte Carlo peut maintenant être expliqué par le fait que ces configurations sont massivement dégénérées à cause de l'absence de corrélation selon une direction. Il en résulte que la taille de l'ensemble de ces configurations est comparable à celle de l'ensemble de toutes les configurations de l'état fondamental. Il est donc naturel dans ce cas que la composante du facteur de structure correspondant à ces configurations apparaisse dans les moyennes d'ensemble effectuées lors d'une simulation Monte Carlo.

Lignes selon ΓM

Si on regarde maintenant le cas $\delta = -\gamma = 1$ on voit que l'on peut faire le même genre de construction. On regarde à nouveau les spins d'une plaquette étendue ligne par ligne. Prenons par exemple ces lignes selon l'axe x comme sur la figure 11.13. Dans la première plaquette les quatre premiers spins de la ligne interviennent avec les signes

$$-\mathbf{S}_{A_1} \quad +\mathbf{S}_{A_2} \quad +\mathbf{S}_{A_3} \quad -\mathbf{S}_{A_4} \quad = 0 \quad (11.36)$$

dans la condition (11.32). Dans la seconde plaquette les spins de cette même ligne entrent cette fois avec les signes

$$+\mathbf{S}_{A_2} \quad -\mathbf{S}_{A_3} \quad -\mathbf{S}_{A_4} \quad +\mathbf{S}_{A_5} \quad = 0. \quad (11.37)$$

Ces deux équations imposent lorsqu'on les soustrait que

$$2\mathbf{S}_{A_3} = \mathbf{S}_{A_1} + \mathbf{S}_{A_5} \quad (11.38)$$

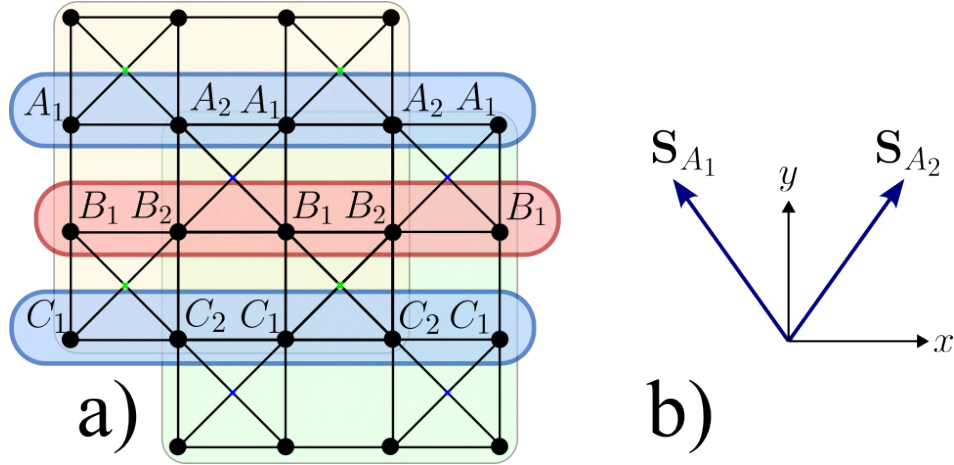


FIGURE 11.13 – a) Construction dans l'espace réel des configurations responsables de l'apparition de lignes de dégénérescence selon les axes XX' dans le facteur de structure. On peut observer que l'enchevêtrement des plaquettes étendues impose que chaque ligne ne puisse contenir et répéter que quatre spins seulement. Les lignes successives sont complètement décorréées, le choix des quatre spins de base pour une ligne ne dépendant pas des lignes adjacentes. b) Schéma indiquant un choix pertinent d'axes de spin permettant de rendre explicite l'explication de la position des lignes de contact dans l'espace réciproque.

ce qui mène à $\mathbf{S}_{A_1} = \mathbf{S}_{A_3} = \mathbf{S}_{A_5}$ puisque tous les spins ont la même norme. On a de même la condition

$$2\mathbf{S}_{A_2} = 2\mathbf{S}_{A_4} + \mathbf{S}_{A_1} - \mathbf{S}_{A_5} \quad (11.39)$$

lorsque qu'on somme (11.36) et (11.37). Cela impose alors $\mathbf{S}_{A_2} = \mathbf{S}_{A_4}$. On se retrouve donc avec la répétition de deux uniques spins tout au long de chaque ligne, comme schématisé sur la figure 11.13 a). On se propose maintenant de choisir les axes de spin comme représenté sur la figure 11.13 b), on peut ainsi exprimer facilement les fonctions de corrélation selon les trois axes de spin comme

$$\langle S^x(\mathbf{r})S^x(0) \rangle = \delta(y)e^{i\pi x/a}, \quad \langle S^y(\mathbf{r})S^y(0) \rangle = \delta(y) \quad (11.40)$$

tandis que les composantes de spin selon le troisième axe sont toujours nulles, donc les fonctions de corrélation aussi. Il apparaît ainsi immédiatement qu'on aura dans l'espace réciproque des lignes situées aux abscisses $q_x = 0$ et $q_x = \pi/a$. C'est bien ce qu'on peut observer sur la figure 11.11.

Lignes selon MM'

Le dernier cas présentant des lignes de dégénérescence rectilignes est le cas $\gamma = 0.5$, $\delta = 0$. On observe cette fois dans le facteur de structure les lignes obliques, à nouveau décalées par rapport au centre de la zone de Brillouin, comme représenté sur la figure

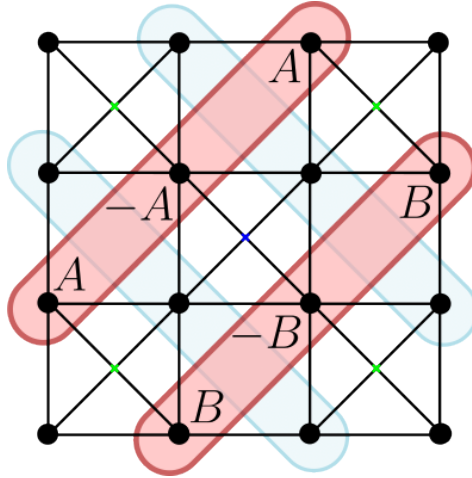


FIGURE 11.14 – Construction responsable de l’apparition de lignes de dégénérescence pour $\gamma = 1/2$ et $\delta = 0$. Il se forme des lignes obliques contenant une unique direction de spin, avec les spin voisins (selon la diagonale) ayant des orientations opposées.

11.11. Cela signifie que les corrélations se font cette fois selon les directions naturelles du réseau dual, c’est à dire selon les diagonales du damier. La construction est similaire aux cas précédents, sauf que les lignes de spins sont donc diagonales, comme représenté sur la figure 11.14. Si on choisit de découper une plaquette étendue selon les lignes diagonales tracées sur la figure 11.14 on voit que le spin central de chaque ligne vient avec un facteur 1 dans le calcul du spin total, tandis que les deux spins de part et d’autre viennent avec un facteur $1/2$. Cela signifie que si on prend ces deux spins opposés au premier on aura une compensation entre ces trois spins

$$\mathbf{S}_A - 2\gamma\mathbf{S}_A = 0. \quad (11.41)$$

On aura là encore une répétition alternée du même spin \mathbf{S}_A à cause du chevauchement des plaquettes voisines, et les lignes sont décorréélées entre elles. La périodicité des fonctions de corrélation sera de $2\sqrt{2}a$, impliquant que les lignes dans l’espace réciproque auront une abscisse $\pi/\sqrt{2}a$, comme observé sur la figure 11.11.

On peut remarquer que ce genre de construction ne semble possible que pour ces trois valeurs précises des paramètres γ et δ , ces valeurs correspondant à des configurations ayant chacune une symétrie bien particulière. Prenons par exemple la configuration présentant la répétition de quatre spins obtenue dans le cas $\gamma = \delta = 1$. Considérons cette configuration et voyons si elle peut être obtenue pour d’autres valeurs des paramètres γ et δ . Pour une ligne donnée la condition (11.32) doit être satisfaite dans chaque plaquette traversée, on doit vérifier

$$\mathbf{S}_{A_1} + \mathbf{S}_{A_2} + \gamma(\mathbf{S}_{A_3} + \mathbf{S}_{A_4}) = \gamma(\mathbf{S}_{A_1} + \mathbf{S}_{A_2}) + \mathbf{S}_{A_3} + \mathbf{S}_{A_4} \quad (11.42)$$

et

$$\delta(\mathbf{S}_{A_1} + \mathbf{S}_{A_4}) + \gamma(\mathbf{S}_{A_2} + \mathbf{S}_{A_3}) = \delta(\mathbf{S}_{A_2} + \mathbf{S}_{A_3}) + \gamma(\mathbf{S}_{A_1} + \mathbf{S}_{A_4}). \quad (11.43)$$

la première équation impose $\gamma = 1$ quand la seconde implique $\delta = 1$. On en déduit que cette configuration, produisant des lignes de dégénérescence bien particulières dans l'espace réciproque, ne peut exister que dans le cas particulier $\gamma = \delta$. Cela explique pourquoi il n'existe que quelques rares points de haute symétrie dans l'espace des paramètres pour lesquels on peut voir des lignes de dégénérescence rectilignes apparaître.

11.7.2 Lignes de dégénérescence circulaires

On peut voir sur le diagramme de phase 11.2 qu'il existe une sous région de la droite d'équation $\delta = \gamma$ pour laquelle on observe des lignes de dégénérescence circulaires. Ces lignes apparaissent là encore comme lumineuses dans le facteur de structure obtenu grâce aux simulations de Monte Carlo. Cela suggère donc de modéliser le facteur de structure comme

$$S(\mathbf{q}) \cong \delta \left(q_x^2 + q_y^2 - \frac{\pi^2}{a^2} f(\gamma)^2 \right) \quad (11.44)$$

avec $f(\gamma)$ une fonction de γ sans dimension. Cette fonction est de l'ordre de $1/\pi$ ou plus petite, et définit le rayon des lignes de dégénérescence observées dans l'espace réciproque. Un tel facteur de structure se traduit dans l'espace réel sous la forme d'une fonction de symétrie radiale, pouvant être approchée par

$$S(\mathbf{r}) \cong J_0 \left(f(\gamma) \frac{\pi}{a} \|\mathbf{r}\| \right), \quad (11.45)$$

avec J_0 une fonction de Bessel du premier type. Cela peut être visualisé comme correspondant à des anneaux concentriques de spins, chaque anneau étant anti-corrélé aux deux anneaux avec lesquels il est en contact. L'écart caractéristique entre les rayons de ces anneaux étant de l'ordre de $a/f(\gamma)$. On a notamment $S(\mathbf{r}) \simeq -0.4$ pour tout spin situé à la position \mathbf{r} telle que $\|\mathbf{r}\| = r_1$ avec r_1 le rayon du premier anneau. Cela signifie que les spins situés sur cet anneau sont en moyenne opposés au spin central. Les spins de l'anneau suivant seront quant à eux en moyenne orientés le long de la direction du spin central. On peut remarquer que l'écart entre les anneaux sera toujours plus grand que le triple du pas du réseau a , et que la première fonction de Bessel $J_0(r)$ décroît à grande distance comme $r^{-1/2}$. Cela signifie que ces structures de spin sont bien plus grandes que les plaquettes généralisées, et s'étendent sur de grands domaines.

On peut noter que le fait que ces structures symétriques apparaissent lorsque $\delta = \gamma$ avec γ assez grand n'est pas surprenant. Cette configuration rend en effet la plaquette élémentaire plus symétrique par rapport au centre, et favorise donc à longue portée des structures quasi-invariantes par rotation.

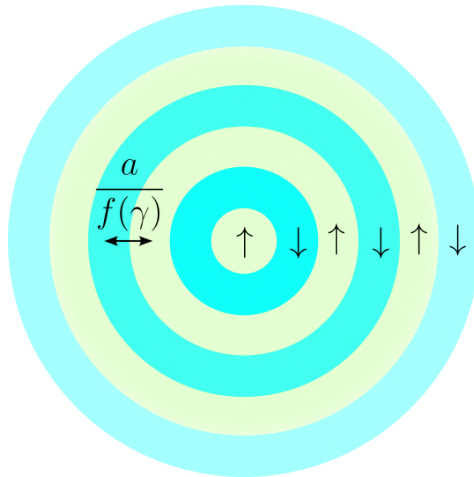


FIGURE 11.15 – Structures émergeant dans l'espace réel sur la ligne critique $\delta = \gamma$ de l'espace des paramètres. Ces structures s'étendent bien au delà d'une maille élémentaire. Les anneaux successifs ont des polarisations moyennes opposées.

12 Le réseau de Kagomé vu comme composé de triangles

Ce chapitre est dédié au traitement du réseau de kagomé, vu comme composé de triangles en contact par les coins. Ce cas révèle posséder de nombreux points communs avec l'exemple du damier traité dans le chapitre précédent, et l'étude présente suivra donc un déroulé similaire. On peut cependant d'ores et déjà noter que cet exemple se démarque par la présence d'ordre par le désordre, contrairement au cas du damier.

Contenu du chapitre

| | |
|---|------------|
| 12.1 Propriétés du vecteur de contrainte | 187 |
| 12.1.1 Méthode projective | 188 |
| 12.2 Approximation de Luttinger-Tisza | 189 |
| 12.2.1 Diagramme de phase | 189 |
| 12.2.2 Lignes critiques et points de pincement de haut rang | 193 |
| 12.3 Simulations Monte Carlo | 196 |
| 12.4 Loi de Gauss | 200 |
| 12.5 Lignes de dégénérescence | 202 |
| 12.6 Point multicritique | 206 |

On se propose maintenant de traiter un second exemple, pour lequel on travaille toujours avec le hamiltonien sur plaquette (10.1), mais cette fois défini sur le réseau de kagomé. On modifie néanmoins ce réseau pour que les plaquettes ne soient plus des triangles composées de 3 sites, mais élargies selon le schéma de la figure 12.1. Cela correspond à définir le spin total de chaque plaquette p comme

$$\mathbf{S}_p = \sum_{i \in p} \mathbf{S}_i + \gamma \sum_{i \in \langle p \rangle} \mathbf{S}_i + \delta \sum_{i \in \langle\langle p \rangle\rangle} \mathbf{S}_i. \quad (12.1)$$

La somme élargie $\langle p \rangle$ correspond aux sites entourés en jaune sur la figure 12.1 tandis que les voisins suivants notés $\langle\langle p \rangle\rangle$ correspondent aux spins entourés de rose. On peut

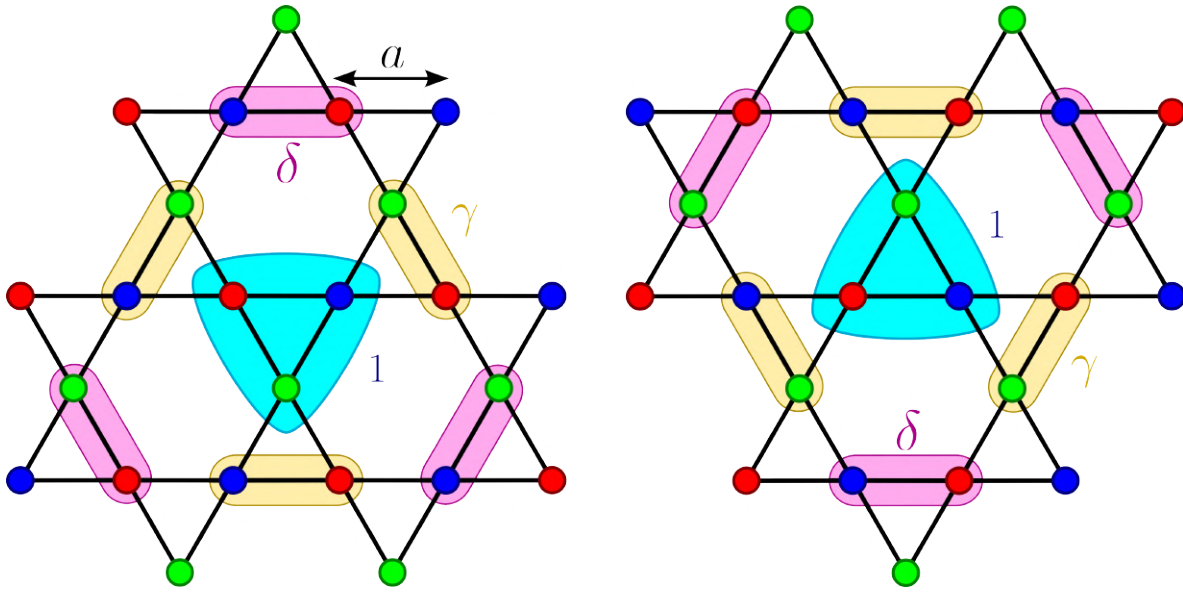


FIGURE 12.1 – Schéma présentant les deux types de plaquettes étendues présentes dans le réseau. Les spin centraux, entourés de bleu, sont comptés avec un facteur 1 dans le calcul du spin total de la plaquette. Les spins voisins, entourés de jaune sont eux pris avec un facteur γ tandis que les voisins les plus éloignés, auréolés de rose, sont quant à eux comptés avec un coefficient δ , comme explicité dans la définition (12.1). Les trois sous réseaux sont représentés via des points de trois couleurs différentes, rouge, bleu et vert. Ces deux plaquettes élémentaires ne possèdent pas de symétrie centrale, et vont donc conduire à deux vecteurs de contraintes à valeurs complexes. Ces deux plaquettes étant reliées via une transformation de symétrie centrale, les vecteurs de contrainte associés seront le conjugué complexe l'un de l'autre.

noter que le cas $\gamma = \delta = 0$ correspond simplement au réseau de kagomé associé à un hamiltonien de Heisenberg avec couplage ferromagnétique entre premiers voisins.

12.1 Propriétés du vecteur de contrainte

Le réseau de kagomé modifié considéré ici possède trois sous réseaux distincts, représentés via des points de couleur verte, rouge ou bleue sur la figure 12.1. Il existe tout comme pour le kagomé simple deux types de plaquettes reliées par une transformation de symétrie centrale. Cela signifie d'une part qu'il y aura deux vecteurs de contrainte distincts puisqu'il existe une contrainte $\mathcal{S}_p = 0$ par type de plaquette, et que les vecteurs de contraintes correspondant seront le conjugué complexe l'un de l'autre. On se retrouve ainsi dans la situation décrite dans la section 10.2.2. Si on veut faire l'analyse topologique des vecteurs de contrainte dans le cas présent, on a vu qu'il fallait étudier le produit vectoriel des deux vecteurs de contrainte. Puisqu'il existe trois sous réseaux ce vecteur possède trois composantes complexes, ce qui indique que les défauts topolo-

riques associés sont similaires à des skyrmions¹ puisque $\pi_2(CP^3) \cong \mathbb{Z}$. L'existence d'un skyrmion, au contraire d'un vortex à deux dimensions, n'impose pas une annulation du champ en son centre. Les singularités doivent donc dans ce cas être recherchées en observant si la charge topologique varie, puisque la transition d'un secteur topologique à un autre implique bel et bien que le champ vectoriel devienne singulier. On va néanmoins voir par la suite qu'il existe dans le présent système des points de pincements, et donc des singularités, pour toutes les valeurs des paramètres γ et δ . Dans une telle situation le nombre de skyrmions est toujours mal défini et une analyse topologique n'est donc pas pertinente. C'est pour cette raison que nous ne nous étendrons pas plus sur le sujet dans le cadre de cet exemple.

Cela ne signifie par pour autant que le vecteur de contrainte ne porte aucune information. On peut en particulier se servir de ses composantes pour calculer d'une part le facteur de structure à température nulle, et d'autre part les relations de dispersion des deux bandes non nulles.

12.1.1 Méthode projective

On a vu dans la section 10.2.2 que dans le cas où il existe comme ici deux vecteurs de contraintes conjugués complexe, le facteur de structure est proportionnel au projecteur

$$\mathbf{\Pi} = 1 - \mathbf{M}(\mathbf{M}^\dagger \mathbf{M})^{-1} \mathbf{M}^\dagger \quad (12.2)$$

où \mathbf{M} est la matrice composée des vecteurs de contraintes comme colonnes. On a donc explicitement

$$\left(\mathbf{M}(\mathbf{M}^\dagger \mathbf{M})^{-1} \mathbf{M}^\dagger \right)_{ij} = \frac{1}{\|\mathbf{L}\|^4 - |Q|^2} \left[\|\mathbf{L}\|^2 (L_i^* L_j + c.c) - (Q^* L_i L_j + c.c) \right]. \quad (12.3)$$

On peut en déduire l'expression du facteur de structure, qui est proportionnel[9] à la somme de toutes les composantes du projecteur $\mathbf{\Pi}$. La trace de ce projecteur vaut

$$\Pi_{ii} = \delta_{ii} - \frac{2\|\mathbf{L}\|^2 L_i^* L_i - (Q^* L_i L_i + Q L_i^* L_i^*)}{\|\mathbf{L}\|^4 - |Q|^2} = 3 - \frac{2\|\mathbf{L}\|^4 - 2|Q|^2}{\|\mathbf{L}\|^4 - |Q|^2} = 1, \quad (12.4)$$

tandis que la somme des éléments hors diagonaux donne

$$\sum_{i \neq j} \Pi_{ij} = 2 \sum_{i < j} \frac{\|\mathbf{L}\|^2 (L_i^* L_j + c.c) - (Q^* L_i L_j + c.c)}{\|\mathbf{L}\|^4 - |Q|^2}. \quad (12.5)$$

1. On a un vecteur normé à trois composantes complexes, appartenant donc à CP^3 , et on regarde comment ce champ peut être cartographié vers la sphère S^3 . On a en général $\pi_2(CP^n) \cong \mathbb{Z}$ ce qui signifie que l'ensemble des isomorphismes allant de CP^n dans S^3 est isomorphe à l'ensemble des entiers relatifs. Physiquement cela se traduit par le fait qu'à chacun de ces isomorphismes on va pouvoir associer un nombre d'enroulement, ou nombre de Hopf, comptant combien de fois le champ vectoriel s'enroule autour de la sphère, de manière analogue au cas d'un skyrmion.

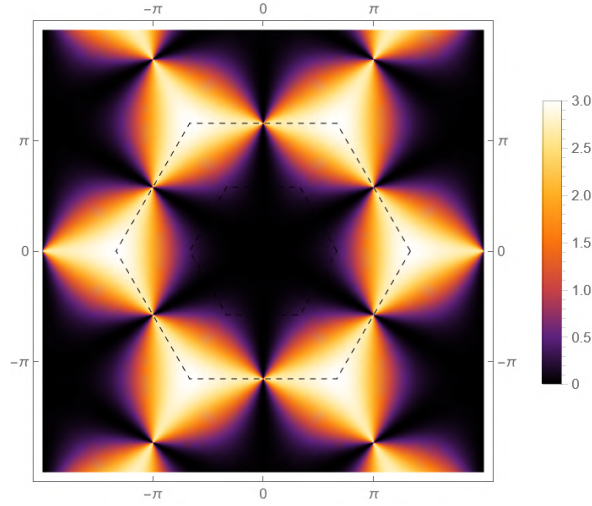


FIGURE 12.2 – Tracé du facteur de structure (12.6) obtenu via la méthode projective, la première et la seconde zone de Brillouin sont représentées en pointillés. Ce tracé obtenu pour $\delta = 0$ et $\gamma = 0$, se révèle être le même sur toute la sous région $\delta = 0$ de l'espace des paramètres. On y observe un unique point de pincement situé aux points Γ des zones de Brillouin secondaires. L'échelle est choisie arbitrairement en prenant un facteur de proportionnalité égal à 1 dans l'équation (12.6).

On obtient ainsi que dans la limite d'une température nulle le facteur de structure doit être proportionnel à

$$S(\mathbf{q}) \propto 1 - 2 \sum_{i < j} \frac{\|\mathbf{L}\|^2 (L_i^* L_j + c.c) - (Q^* L_i L_j + c.c)}{\|\mathbf{L}\|^4 - |Q|^2}. \quad (12.6)$$

Cette expression permet ainsi, tout comme pour le damier, d'obtenir une prédiction pour les facteurs de structure à comparer avec ceux obtenus par simulations Monte Carlo. Cette comparaison sera effectuée dans la section 12.3 dédiée aux simulations de Monte Carlo, et sera notamment réalisée à partir de la figure 12.2.

On se propose maintenant de réaliser une analyse de la structure de bande obtenue grâce à l'approximation de Luttinger-Tisza.

12.2 Approximation de Luttinger-Tisza

12.2.1 Diagramme de phase

Comme énoncé plus haut il existe deux vecteurs de contrainte conjugués complexes. On a vu dans la section 10.2.2 que dans une telle situation l'approximation de Luttinger Tisza conduit à l'obtention d'une bande plate associée à deux bandes dispersives dont

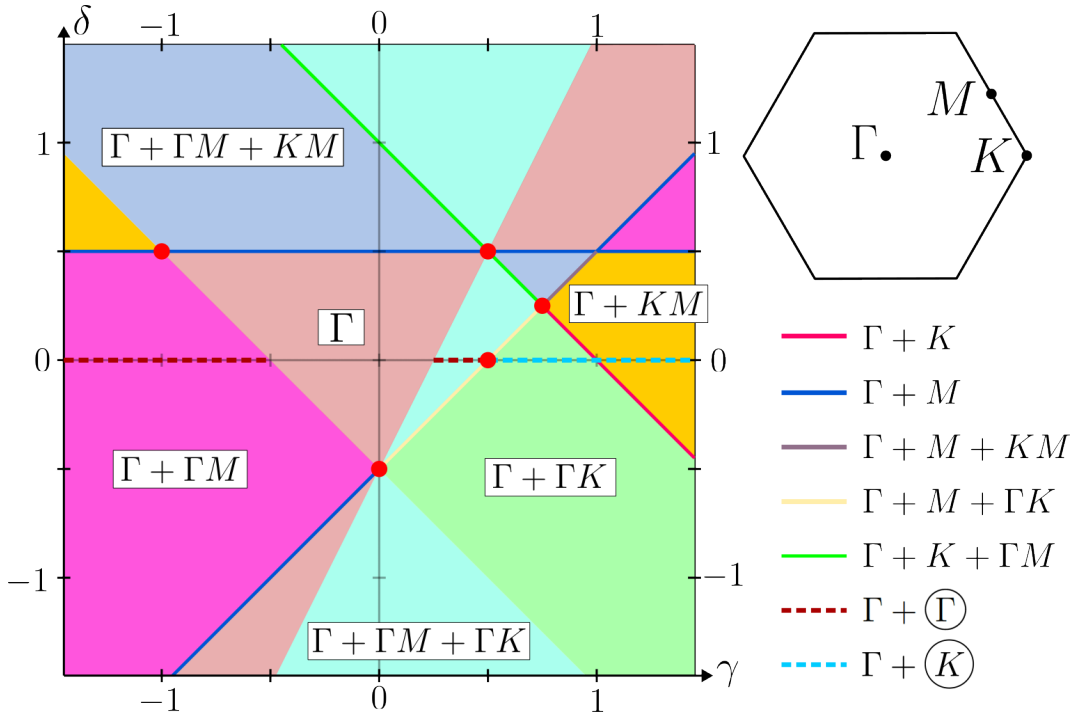


FIGURE 12.3 – Diagramme de phase obtenu pour le réseau de kagomé avec plaquettes triangulaires étendues. Les notations utilisées sont définies dans le texte. Ce diagramme comporte 5 phases étendues, ne présentant que des points de contacts. Les lignes critiques séparant ces phases constituent cinq autres phases, ayant un point de pincement situé en K ou en M . Il existe aussi deux phases observées sur la ligne $\delta = 0$ qui présentent des lignes de dégénérescence circulaires.

les relations de dispersion s'expriment comme

$$\varepsilon_{\pm} = \mathbf{L}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{L}^*(\mathbf{q}) \pm |\mathbf{L}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{q})|. \quad (12.7)$$

De manière similaire au cas du damier la première bande dispersive touche toujours la bande plate, mais cette fois au point Γ de la zone de Brillouin. Une étude systématique du nombre et des positions des points de contact, ainsi que des éventuelles lignes de contact permet de classer les différentes configurations sous la forme de phases. Le diagramme de phase correspondant est donnée sur la figure 12.3. On peut y observer cinq phases étendues qui sont indexées suivant la même notation que pour le damier, la phase $\Gamma + \Gamma M$ comporte par exemple un point de contact situé sur le point central Γ , ainsi qu'un point de contact par segment ΓM de la première zone de Brillouin. Ces phases étendues sont, là encore de manière similaire au cas du damier, séparées par des lignes critiques qui peuvent présenter des points de contact situé en K ou en M , ce qui n'est pas le cas pour les phases étendues. Ces points de contacts particuliers disparaissent d'un côté de la ligne critique et se séparent en points de contact multiples de l'autre côté de la ligne. On peut noter que pour la ligne $\Gamma + K$ séparant les phases

$\Gamma + KM$ et $\Gamma + \Gamma K$ la situation est un peu différente. Lors de la traversée de cette ligne les trois points de contact secondaires convergent vers le point K selon les axes KM , avant de se séparer à nouveau en trois points le long des axes $K\Gamma$.

L'axe $\delta = 0$ accueille deux phases un peu particulières présentant des lignes de dégénérescence quasi circulaires entourant le point Γ pour la phase $\Gamma + \textcircled{\Gamma}$ et entourant le point K pour la phase $\Gamma + \textcircled{K}$. Ces deux phases sont analogues à celles rencontrées le long de l'axe $\delta = \gamma$ dans le cas du damier généralisé.

Les intersections entre lignes critiques conduisent à l'apparition de phases plus exotiques. Les cinq points présentant de telles phases sont marqués par un point rouge sur le diagramme de phase de la figure 12.3. Le point $(\gamma, \delta) = (1/2, 0)$ présente des lignes de contact le long des segments MM' , formant un hexagone comme représenté sur la figure 12.4. Les deux points $(-1, 1/2)$ et $(0, -1/2)$ présentent quant à eux des lignes de contact le long des segments ΓM , formant ainsi des étoiles à six bras centrés en Γ comme représenté sur la figure 12.4. Le point $(3/4, 1/4)$ apparaît comme plus banal dans le contexte de l'approximation de Luttinger-Tisza puisqu'il ne comporte que des points de contacts, correspondant simplement à la phase $\Gamma + M + K$. Le facteur de structure correspondant a cependant des chances de comporter deux points de pincement d'ordre supérieur, le rendant tout particulier². Le dernier point particulier est situé en $(1/2, 1/2)$ et présente une phase unique dans laquelle la première bande dispersive s'aplatit pour venir toucher la première bande plate en tout point de l'espace réciproque. Ce point sera discuté en détail dans la partie 12.6.

Les simulations Monte Carlo et la méthode projective sont plus commodes à appliquer pour $\delta = 0$, pour des raisons de temps de calcul. On se propose donc de réaliser ici une discussion détaillée de cette région restreinte de l'espace, qui sera associée à une étude détaillée par la méthode projective et les simulations Monte Carlo. Si on parcourt l'axe $\delta = 0$ en partant de γ plus petit que -1 on commence par observer des lignes de contact qui entourent les points Γ , étant eux même des points de contacts. Ces cercles de contact rétrécissent lorsqu'on augmente γ , jusqu'à disparaître pour $\gamma = -1/2$. Il ne reste alors qu'un unique point de contact situé au centre de la zone de Brillouin. Les cercles observés précédemment réapparaissent pour $\gamma = 1/4$, grandissant et se déformant jusqu'à toucher les bords de la zone de Brillouin pour $\gamma = 1/2$. A ce point les cercles des différentes zones de Brillouin entrent donc en contact, formant ainsi des hexagones, comme on peut le voir sur la figure 12.4. Pour $\gamma > 1/2$ ce quadrillage hexagonal se transforme en triangles entourant les points K . Ces triangles rétrécissent ensuite, devenant plus circulaires, avant de disparaître en laissant un unique point de contact situé en K pour $\gamma = 1$. Pour $\gamma > 1$ ces mêmes cercles réapparaissent, grandissant lorsqu'on augmente γ . On peut noter que les deux limites $\gamma \rightarrow \pm\infty$ semblent similaires à

2. On peut noter que ce point est analogue au point situé en $(\gamma, \delta) = (0, -1)$ dans le diagramme de phase du damier, qui lui aussi comportait deux types de points de pincement de haut rang.

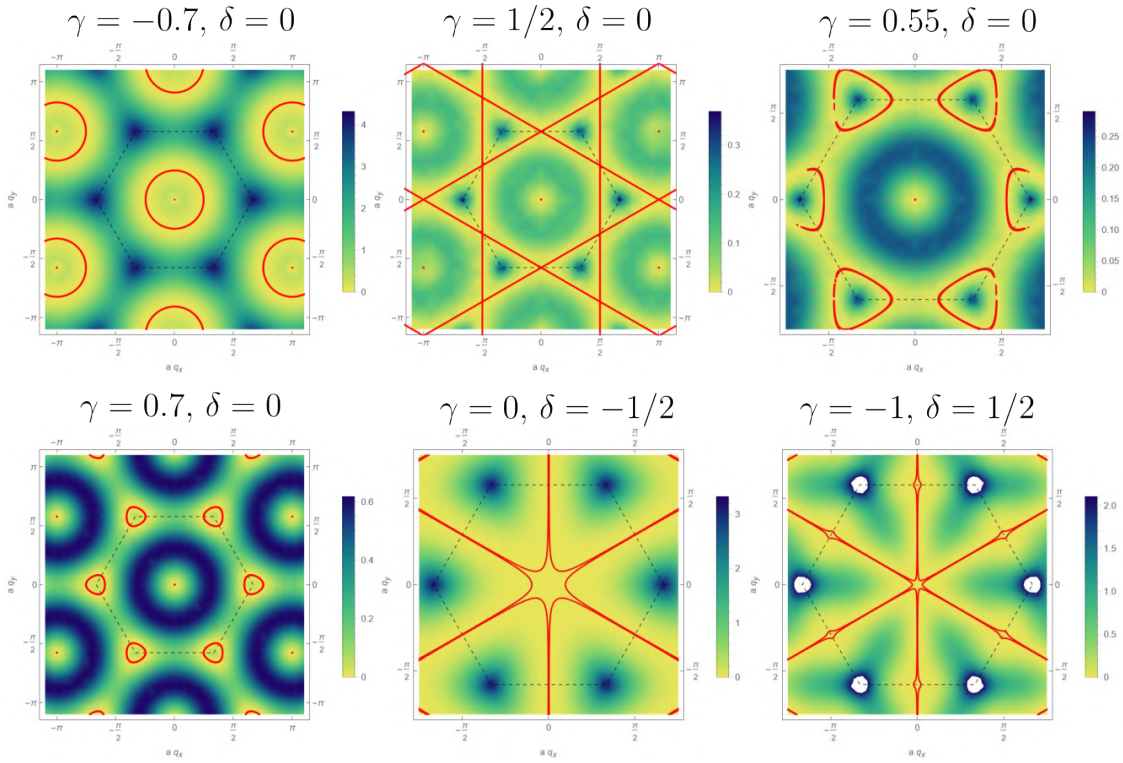


FIGURE 12.4 – Tracé en arrière plan de la première bande dispersive ε_- en fonction de l'impulsion \mathbf{q} . Ce tracé est donné sous la forme d'une carte en intensité, dont l'échelle est donnée en unités de J . On a superposé à cette carte un tracé de l'équipotentielle $\varepsilon_-(\mathbf{q}) = 0$ en rouge. En réalité pour des raisons numériques on trace une équipotentielle $\varepsilon_-(\mathbf{q}) = \epsilon$ avec ϵ choisi pour s'approcher au plus près de l'équipotentielle de hauteur nulle, tout en satisfaisant aux contraintes de tracé du logiciel utilisé, ici Mathematica. Les quatre premières images illustrent l'évolution des phases selon l'axe $\delta = 0$. Les deux dernières images représentent les deux phases spéciales présentant des lignes de dégénérescence en étoiles à six bras. Des observations dans des plans de coupe ont été réalisées afin de confirmer que dans ces deux derniers cas on observe bien des lignes de contact rectilignes.

la phase spéciale hexagonale observée pour $\gamma = 1/2$. Cela n'est pas surprenant puisque d'un côté comme de l'autre une ligne de contact circulaire croît avec $|\gamma|$, et on s'attend donc à ce que les lignes de contact des différentes zones de Brillouin entrent en contact dans la limite $|\gamma| \rightarrow \infty$.

On peut remarquer que les résultats de la section 10.2.2 indiquent qu'un contact entre la seconde bande dispersive ε_+ ayant une dispersion

$$\varepsilon_+(\mathbf{q}) = |\mathbf{L}^*(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{q})|^2 + |\mathbf{L}(\mathbf{q}) \cdot \mathbf{L}(\mathbf{q})| \quad (12.8)$$

et la bande plate va aussi conduire à l'apparition d'un point de pincement. On peut

néanmoins remarquer que cette seconde bande est toujours au dessus de la première bande dispersive ε_- , et ne peut donc venir au contact de la bande plate qu'en un point où la première bande dispersive serait déjà en contact avec la bande plate. Cette situation se produit le long de la ligne critique d'équation $\delta = 1 - \gamma$, sous région de l'espace des paramètres pour laquelle les deux bandes dispersives touchent la bande plate aux points K . On peut ainsi s'attendre à observer un point de pincement de plus haut rang en ce point, puisqu'alors la quantité

$$\|\mathbf{L}\|^4 - |Q|^2 = \varepsilon_- \varepsilon_+ \quad (12.9)$$

doit être au moins quartique. C'est bien ce qui est observé dans la pratique, où les dispersion locales des deux bandes aux points K sont quadratiques

$$\varepsilon_-(\mathbf{q}) = \frac{9}{2}(1 - 2\gamma)^2 \|\mathbf{q}\|^2, \quad \varepsilon_+(\mathbf{q}) = \frac{9}{2}(6\gamma^2 - 8\gamma + 3) \|\mathbf{q}\|^2. \quad (12.10)$$

Le point de pincement correspondant comporte alors généralement³ quatre bras, de manière analogue à ce qu'on a observé pour le damier lorsqu'on avait une dispersion quartique.

12.2.2 Lignes critiques et points de pincement de haut rang

La discussion ci-dessus amène donc un nouveau type de point de pincement de haut rang, où on a deux bandes dispersives possédant un point de contact simultané avec la bande plate. On a ici le cas de deux relations de dispersion quadratiques, suggérant l'existence de deux tenseurs indépendants de rang 1. Ce cas sort du contexte analytique présenté à la section 10.3.

On peut noter que la multiplicité de ces points de pincement vaut ici 3, et que cette ligne est toute particulière puisque c'est la seule pour laquelle le nombre de points de pincement est conservé lors de la traversée de cette ligne. On a en effet simplement trois points de pincements qui passent des segments $K\Gamma$ aux segments KM . On peut aussi remarquer que la symétrie relative aux points K implique une forte anisotropie pour les points de pincement, ce qui est bien observé en pratique comme illustré dans le tableau récapitulatif 12.1.

La ligne d'équation $\delta = -1/2 - \gamma$ sépare les phases $\Gamma(+\Gamma K)$ et $\Gamma(+\Gamma K) + \Gamma M$, et héberge quant à elle la phase $\Gamma(+\Gamma K)$. Cette ligne correspond donc à l'apparition de 6 sous points de pincements situés le long des segments ΓM , on peut néanmoins noter qu'il demeure un point de pincement situé en Γ . On notera donc dans ce cas la multiplicité comme valant 6+1. Cette ligne possède une dispersion tout à fait originale

3. Ce n'est pas le cas pour la situation particulière $\delta = 0$ où le point de pincement apparaît comme ayant une structure usuelle.

puisqu'elle s'écrit localement comme

$$\varepsilon_-(\mathbf{q}) = \frac{3(6\gamma^2 + 8\gamma + 3)q_x^6 + 2(1 + \gamma)^2 q_y^6 - 6\gamma(3\gamma + 2)q_x^4 q_y^2 + 3(14\gamma^2 + 16\gamma + 5)q_x^2 q_y^4}{\|\mathbf{q}\|^2}. \quad (12.11)$$

Les points de pincements associés, tracés grâce à la méthode projective, présentent six bras comme les points de pincements obtenus à l'aide d'un tenseur de rang 3. Ce résultat n'a finalement rien de surprenant, puisque la relation de dispersion (12.11) peut être associée à une fonctionnelle énergie de la forme⁴

$$F \simeq \int d^2q \eta_{ijk} E_{ijk}(\mathbf{q}) E^{ijk}(-\mathbf{q}) \quad (12.12)$$

faisant intervenir un tenseur de rang 3 ayant la structure générale décrite dans la section 10.3 mais renormalisé selon

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\|\mathbf{q}\|} \begin{pmatrix} q_y^3 \phi & -q_x q_y^2 \phi & -q_x q_y^2 \phi & q_x^2 q_y \phi \\ -q_x q_y^2 \phi & q_x^2 q_y \phi & q_x^2 q_y \phi & -q_x^3 \phi \end{pmatrix} \quad (12.13)$$

et satisfaisant en particulier une loi de Gauss $q_i E_{ijk} = 0$. Un tel tenseur associé à la fonctionnelle (12.12) produit bien des fonctions de corrélation engendrant un facteur de structure proportionnel à celui obtenu (10.63) dans la section 10.3. Cette observation est en excellent accord avec les points de pincement à six bras observés sur cette ligne critiques, illustrés dans le tableau 12.1.

La ligne critique associée à l'équation $\delta = -1/2 + 2\gamma$ comporte elle aussi un point critique de haut rang situé au point central Γ . Cette ligne, hébergeant la phase Γ , sépare en effet les phases Γ et $\Gamma + \Gamma M + \Gamma K$, signifiant que lors du passage de cette ligne critique le point de pincement central demeure tout en produisant 12 sous points de pincement, correspondant à une multiplicité valant 12+1. Cela en fait ainsi le point de pincement ayant la plus haute multiplicité rencontrée dans ce manuscrit. Ce point est associé à une dispersion locale sextique s'écrivant simplement

$$\varepsilon_-(\mathbf{q}) = \frac{(1 - 2\gamma)^2}{8} \|\mathbf{q}\|^6 \quad (12.14)$$

et correspondant donc bien au formalisme d'un tenseur de rang 3 présenté dans la partie 10.3. On peut noter que dans le facteur de structure la nature des points de pincements est difficilement identifiable, puisqu'ils correspondent au cas $\eta \gg \beta$ présenté dans la figure 10.2 de la section 10.3, et ont donc un aspect similaire à des points de pincement standards.

4. Il est important de noter ici que seuls les coefficients η_{ijk} dépendent à priori du réseau au travers des paramètres γ et δ . La structure générale du tenseur décrivant quant à elle le type de point de pincement rencontré, elle ne doit pas changer le long de la ligne critique du diagramme de phase.

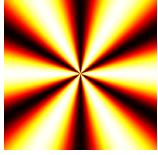
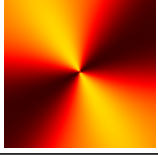
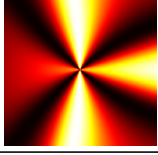
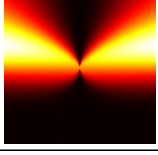
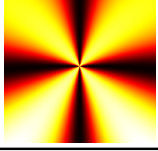
| Ligne | Position | Multiplicité | Dispersion | Point de pincement |
|-----------------------------------|----------|--------------|---|--|
| $\delta = -\frac{1}{2} - \gamma$ | Γ | 6+1 | $\varepsilon_-(\mathbf{q}) = \frac{\alpha_i q_i^6 + \beta_1 q_x^4 q_y^2 + \beta_2 q_x^2 q_y^4}{\ \mathbf{q}\ ^2}$ |  |
| $\delta = -\frac{1}{2} + 2\gamma$ | Γ | 12+1 | $\varepsilon_-(\mathbf{q}) = \frac{(1-2\gamma)^2}{8} \ \mathbf{q}\ ^6$ |  |
| $\delta = 1 - \gamma$ | K | 3 | $\varepsilon_-(\mathbf{q}) \propto \varepsilon_+(\mathbf{q}) \propto \ \mathbf{q}\ ^2$ |  |
| $\delta = -\frac{1}{2} + \gamma$ | M | 2 | $\varepsilon_-(\mathbf{q}) = 2(1 - 2\gamma)^2 q_x^2$ |  |
| $\delta = \frac{1}{2}$ | M | 4 | $\varepsilon_-(\mathbf{q}) = \alpha_i q_i^4 + \beta q_x^2 q_y^2$ |  |

TABLE 12.1 – Synthèse des différents types de points de pincement de haut rang rencontrés dans le réseau de kagomé triangulaire. Les figures sur la droite visent à illustrer la structure des points de pincement au sein d'un facteur de structure se trouvant sur la ligne critique correspondante. Cette structure est amenée à se déformer le long de la ligne critique, mais conserve toujours la même symétrie.

La ligne d'équation $\delta = -1/2 + \gamma$, héberge trois phases différentes mais comportant toutes un point de pincement situé au point M de la zone de Brillouin. On assiste en la traversant, à la séparation des points de pincement situés en M en paires de sous points de pincements situés le long des segments $M\Gamma$. La relation de dispersion correspondante

$$\varepsilon_-(\mathbf{q}) = 2(1 - 2\gamma)q_x^2 \quad (12.15)$$

est donc quadratique le long du segment KMK' et quartique le long de la direction perpendiculaire $\Gamma M\Gamma'$. On parlera ainsi de point de Lifshitz, de manière analogue au point de multiplicité deux rencontré dans le cas du damier.

Il existe une autre ligne abritant des points de pincement situés aux points M . Elle est associée dans le diagramme de phase à l'équation $\delta = 1/2$, et correspond

uniquement⁵ à la phase $\Gamma+M$. Lors de la traversée de cette ligne les points de pincement situés en M se séparent en 4 sous points de pincements, situés le long des segments MT et MK . La dispersion locale au voisinage du point M vaut pour cette ligne

$$\varepsilon_-(\mathbf{q}) = \frac{(1-2\gamma)^2}{2} \left[q_x^4 + 9q_y^4 + 6\frac{3-\gamma^2}{(1-\gamma)^2} q_x^2 q_y^2 \right] \quad (12.16)$$

et est donc quartique. Elle correspond ainsi à l'existence d'un tenseur de rang 2, associé à des points de pincement apparaissant avec quatre bras dans les facteurs de structure observés le long de cette ligne.

Les caractéristiques des cinq lignes critiques rencontrées pour le réseau de kagomé triangulaire sont résumées dans le tableau 12.1. On se propose maintenant de comparer les résultats obtenus grâce à cette analyse préliminaire faite dans le contexte de l'approximation de Luttinger-Tisza, à ceux obtenus à partir de simulations de Monte Carlo.

12.3 Simulations Monte Carlo

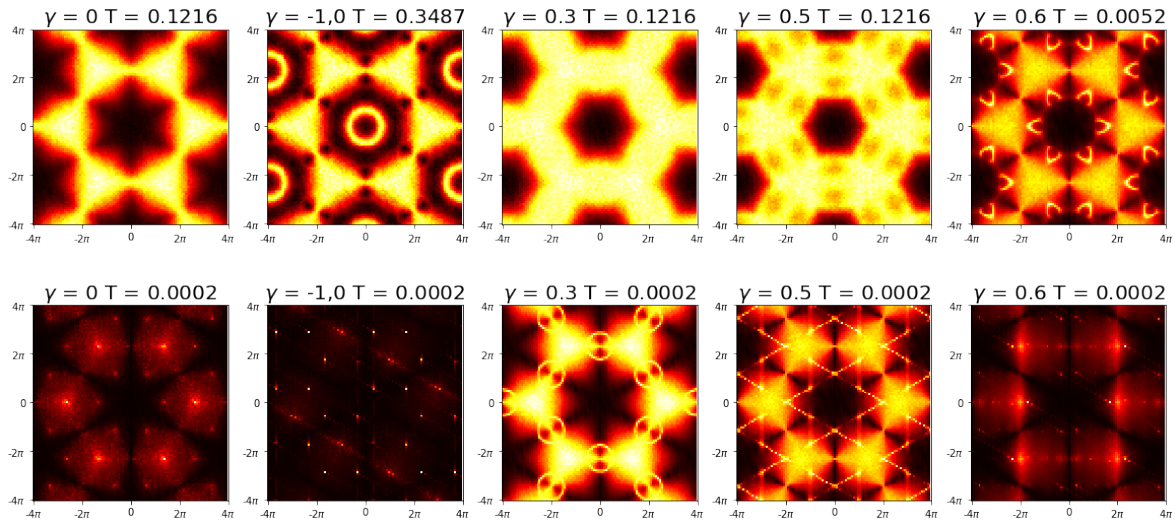


FIGURE 12.5 – Facteurs de structure obtenus par simulations Monte Carlo, l'échelle des axes vaut $2a$ avec a le pas du réseau. Ces facteurs de structures sont pris le long de la ligne critique d'équation $\delta = 0$ du diagramme de phase. On y observe les différentes phases prédites grâce à l'approximation de Luttinger Tisza.

Les prédictions analytiques obtenues grâce à l'approximation de Luttinger-Tisza et la méthode projective peuvent être confrontées aux facteurs de structure obtenus par

5. Excepté les deux points spéciaux présentant des lignes de contact.

simulation Monte Carlo. On a choisi, contrairement au cas du damier, de se restreindre à quelques couples de paramètres judicieusement choisis, le diagramme de phase 12.3 étant extrêmement riche.

La figure 12.5 présente les facteurs de structure obtenus pour différentes valeurs de γ le long de la ligne critique $\delta = 0$, cette ligne abritant bon nombre de phases intéressantes. On observe notamment que la phase $\Gamma + \textcircled{\Gamma}$ se révèle différente selon que γ appartient au segment $]1/4, 1/2[$ ou à la demi droite $\gamma < -1/2$. Dans le premier cas on voit qu'il faut aller à très basse température pour voir apparaître les lignes de dégénérescence circulaires, et qu'aucun pic de Bragg n'apparaît aux températures les plus basses simulées. Au contraire pour $\gamma < 1/2$ les lignes de dégénérescence apparaissent à plus haute température, mais disparaissent néanmoins ensuite pour laisser place à des pics de Bragg lorsque la température diminue. Il en va de même pour la phase $\Gamma + \textcircled{K}$ observée pour $\gamma > 1/2$, où les lignes de dégénérescence disparaissent tout comme les points de pincement à très basse température. La phase obtenue pour $\gamma = 1/2$, présentant des lignes de dégénérescence de fréquence spatiale π , fait la jonction entre les deux phases discutées précédemment, et semble quant à elle apparaître à très basse température, de manière analogue donc au cas $\gamma \in]1/4, 1/2[$. On constate ainsi qu'un phénomène d'ordre par le désordre peut intervenir, mais que cela n'est pas nécessairement le cas, selon le point du diagramme de phase sur lequel on se trouve. On notera que les facteurs de structure obtenus par Monte Carlo pour $\delta = 0$ n'ont pas été comparés avec ceux obtenus par la méthode projective. Cette comparaison n'est en effet pas pertinente ici puisque la méthode projective ne permet pas de révéler les lignes de dégénérescence, et que les phases qui jalonnent la ligne critique décrite ici ne diffèrent précisément que par des lignes de dégénérescence.

On se propose maintenant de discuter quelques facteurs de structures observés pour des points bien particuliers du diagramme de phase et présentés sur la figure 12.6. Le premier cas présenté correspond aux paramètres $\gamma = \delta = 1/2$, et on observe que le facteur de structure obtenu ne possède pas de points de pincement. Ce cas tout à fait particulier sera discuté en détail dans la section dédiée 12.6. La figure 12.6 présente les deux points $(\gamma, \delta) = (0, -1/2), (-1, 1/2)$ pour lesquels l'approximation de Luttinger-Tisza prévoit des lignes de contact. Ces lignes de contact se manifestent bien sous la forme de lignes fortement corrélées dans le facteur de structure. On peut néanmoins remarquer que les facteurs de structure obtenus par Monte-Carlo pour différents points sur la ligne $\delta = 1/2$ avec $\gamma \neq -1$ présentent eux aussi des lignes de forte corrélations, bien qu'il n'y ait pas de lignes de contact correspondantes dans l'approximation de Luttinger-Tisza. Ce point sera éclairci dans la section 12.5 dédiée aux lignes de dégénérescence. On peut enfin noter que pour les points $(\gamma, \delta) = (-1/2, 1/2)$ et $(0, 1/2)$, un phénomène d'ordre par le désordre apparaît clairement aux températures simulées, sélectionnant le sous ensemble des lignes de dégénérescence. Le facteur de structure résultant ne présente donc plus les points de pincement prédits par la méthode projective, mais seulement des lignes de corrélation.

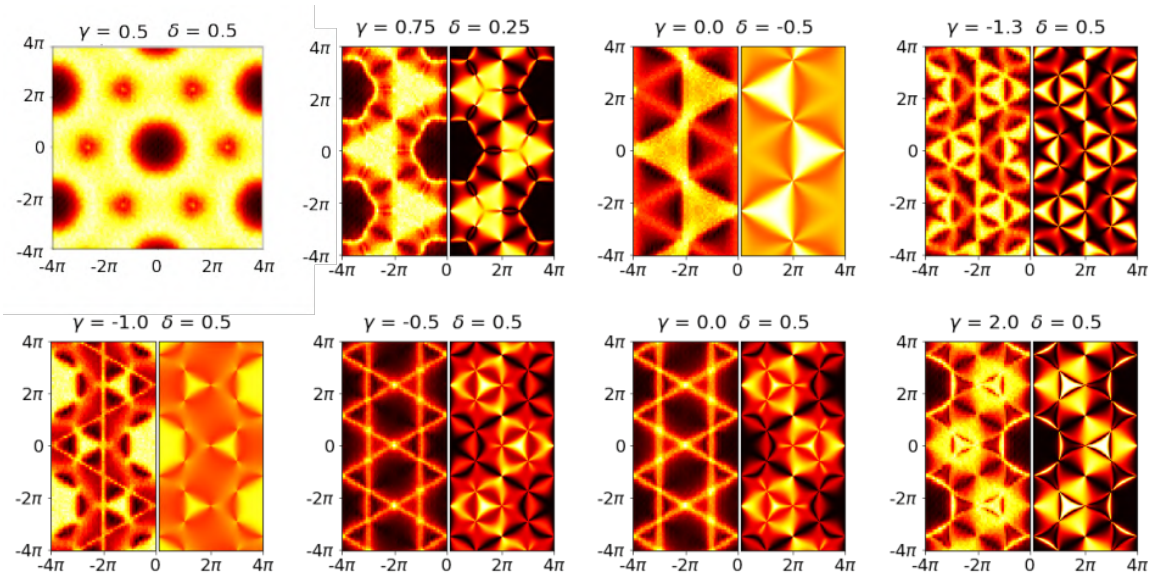


FIGURE 12.6 – Facteurs de structure obtenus pour différents points remarquables du digramme de phase. La partie droite de chaque tracé correspond au facteur de structure obtenu via la méthode projective, tandis que la partie gauche correspond à la version obtenue par simulations Monte Carlo.

Les simulations de Monte Carlo permettent aussi d’obtenir la chaleur spécifique du système en fonction de la température pour un couple de paramètres (γ, δ) choisi. Les résultats obtenus sont donnés sur la figure 12.7. On peut comparer les valeurs asymptotiques des chaleurs spécifiques obtenues à la chaleur spécifique attendu en comptant les modes zéros d’énergie. On a, dans le cas $\gamma = \delta = 0$, un simple réseau de kagomé pour lequel les plaquettes sont des triangles, comportant donc $q = 3$ spins, qui se partagent chacun entre $b = 2$ triangles, voir figure 12.8. Dans le cas où les deux paramètres γ et δ sont non nuls on peut voir sur la figure 12.8 que le ratio $q/b = 3/2 = 9/6 = 15/10$ demeure inchangé. Cela signifie que le nombre de modes zéro vaut toujours

$$F = \frac{q}{b}(n - 1) - n = 0 \quad (12.17)$$

et la chaleur spécifique associée à ces modes 0 vaut ainsi à priori 1,

$$C_v = \frac{bn}{2q} = 1. \quad (12.18)$$

Il faut faire attention ici au fait que dans le cas du kagomé simple $\gamma = \delta = 0$ il existe un phénomène d’ordre par le désordre qui sélectionne les configurations de l’état fondamental qui sont coplanaires[22, 23, 24, 1]. On assiste donc dans ce cas à un régime transitoire correspondant au liquide de spin longue portée discuté extensivement ici, où la chaleur spécifique C_v vaut 1, et qui présente des points de pincements aux points

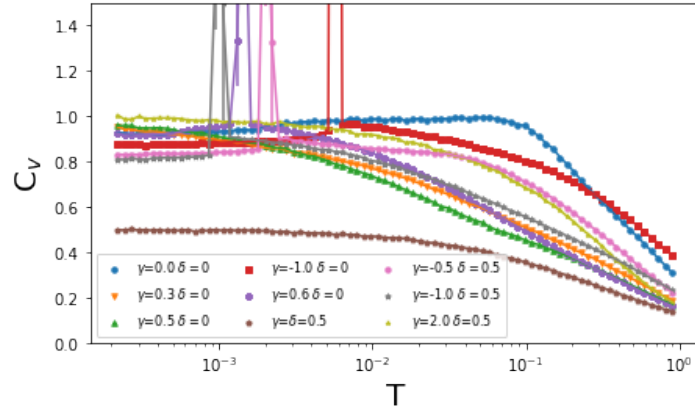


FIGURE 12.7 – Chaleurs spécifiques données en fonction de la température pour différents couples de paramètres (γ, δ) . Ces courbes sont obtenues grâce à des simulations Monte Carlo.

prédits par l'approximation de Luttinger Tisza. Lorsque la température baisse cet état est modifié par le phénomène d'ordre le désordre, impliquant l'apparition de pics dans le facteur de structure, et une chaleur spécifique qui s'abaisse à $11/12$. Ce résultat est bien celui observé sur la figure 12.7 pour $\delta = \gamma = 0$, où la chaleur spécifique passe par un palier valant 1 lorsque l'état est dans un état magnétique coopératif, avant de s'abaisser à $11/12$ à plus basse température lorsque le phénomène d'ordre par le désordre entre en jeu.

Lorsqu'on sort du kagomé simple plusieurs cas de figure se présentent. Dans certains cas comme $(\gamma, \delta) = (0.5, 0), (2, 0.5)$ la chaleur spécifique semble tendre vers 1 lorsque la température descend aux plus basses valeurs simulées, indiquant qu'il n'y a pas de phénomène d'ordre par le désordre et que le système se trouve (classiquement) dans un état magnétique coopérant à très basse température. Pour les autres cas présentés dans la figure 12.7 la chaleur spécifique ne semble pas converger vers 1, indiquant qu'il existe des modes mous et donc probablement un phénomène d'ordre par le désordre pour chacun de ces cas. Le point $(\gamma, \delta) = (0.5, 0.5)$ affiche une chaleur spécifique remarquablement basse, indiquant l'existence d'une phénoménologie toute particulière pour ce point. Ce cas sera discuté en détail dans la section 12.6 qui lui est dédiée.

Il faut faire attention ici au fait que les points présentés sur la figure 12.7, situés quasiment exclusivement le long de lignes critiques du diagramme de phase, ne sont pas représentatifs des phases étendues et donc de la majorité des points du diagramme de phase. Une étude détaillée des modes mous de ce système, permettant une compréhension du phénomène d'ordre par le désordre, et la production d'un éventuel sous diagramme de phase associé, sort cependant du cadre du travail présenté ici.

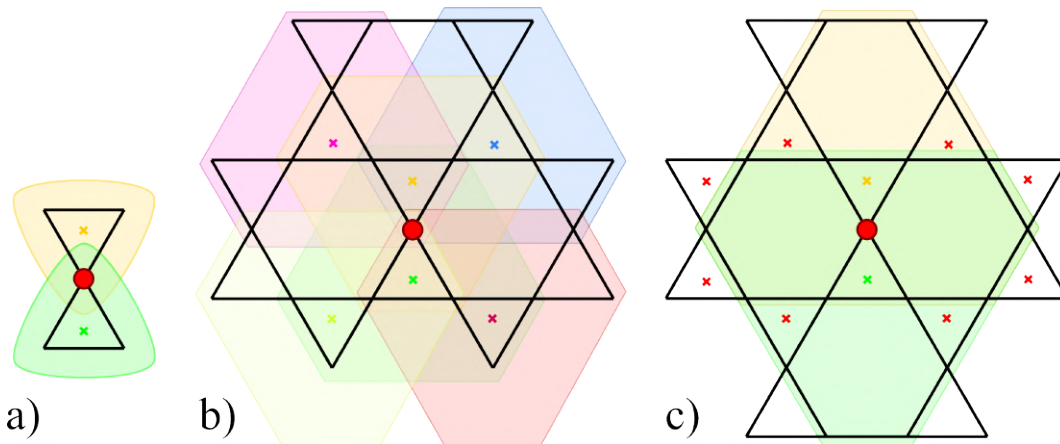


FIGURE 12.8 – Schémas illustrant le nombre de spins par plaquettes, et le nombre de plaquettes dans lequel se trouve chaque spin. On montre en a) que pour $\gamma = \delta = 0$ on a $q = 3$ spins par plaquette, ces dernières étant de simple triangles. Chaque spin appartient à $b = 2$ plaquettes. b) Dans le cas $\delta = 0$ mais γ non nul, on a cette fois des plaquettes étendues qui contiennent $q = 9$ spins. On peut voir que le spin aurolé de rouge est recouvert par les $b = 6$ plaquettes voisines, représentées en couleur. Dans le cas où γ et δ sont non nuls, la plaquette étendue comporte $q = 15$ spins. Chacun de ces spins est recouvert par les $b = 10$ plaquettes voisines, dont les centres constituent deux hexagones complet au regard du réseau bidual qui est ici hexagonal.

12.4 Loi de Gauss

On a pu voir dans les sections précédentes, que tout comme pour le damier il existe toujours au moins un point de pincement, quelque soit la valeur des deux paramètres γ et δ . Cela suggère qu'il devrait exister un tenseur de polarisation dont la construction demeure valable dans tout l'espace des paramètres. On se propose maintenant d'explicitier cette construction.

Les étapes sont similaires à celles suivies dans le cas du damier. Le réseau bidual du réseau de kagomé est le réseau hexagonal, en forme d'alvéoles de ruche. Ce réseau est bipartite, on a représenté sur la figure 12.9 les deux sous réseau en bleu et rouge. Ce réseau étant bipartite il peut être orienté, en choisissant par exemple de prendre les liens comme allant des sites rouges vers les sites bleus. On peut maintenant attacher un flux à chacun de ces liens tel que la somme des flux entrants en un site bleu soit égale au spin total de la plaquette entourant ce sommet bleu. On peut constituer ces flux avec les spins appartenant à l'intersection entre les deux plaquettes reliées par le lien considéré. Ces spins sont entourés de halos colorés sur la figure 12.9. On se propose de prendre en compte ces spins avec des coefficients α , β , η et χ pris symétriquement par rapport au lien considéré, comme dépeint sur la figure 12.9. On définit ainsi le flux

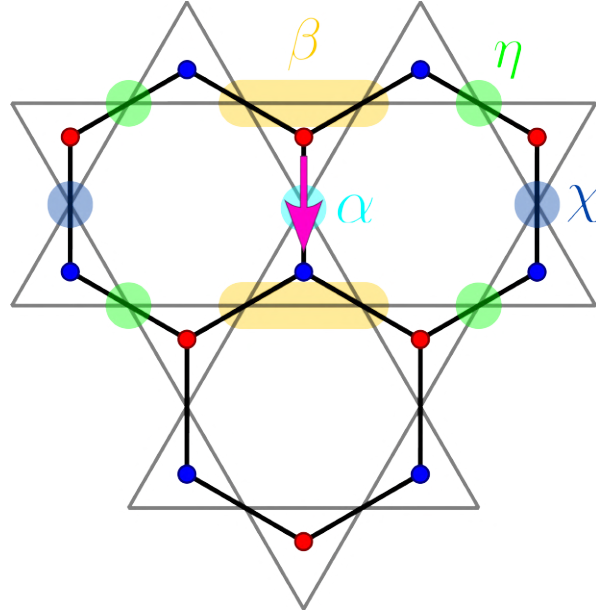


FIGURE 12.9 – Schéma indiquant les notations nécessaires à la construction d'un tenseur de polarisation satisfaisant à une loi de Gauss. On a représenté le réseau bidual du kagome, qui est hexagonal. Ce réseau est bipartite, et on a donc représenté les deux types de sommets en rouge et en bleu. Les liens sont orientés arbitrairement du rouge vers le bleu, comme l'indique la flèche rose. Ce lien orienté est ensuite attaché à un flux constituée d'une somme pondérée des spins voisins, les coefficients de cette somme étant indiqués par quatre lettres grecques.

attaché au lien i (surmonté d'une flèche rose sur la figure 12.9) comme

$$\mathbf{\Pi}(\mathbf{r}_i) = \alpha \mathbf{S}_i + \beta \sum_{j \in \langle i \rangle} \mathbf{S}_j + \eta \sum_{j \in \langle\langle i \rangle\rangle} \mathbf{S}_j + \chi \sum_{j \in \langle\langle\langle i \rangle\rangle\rangle} \mathbf{S}_j. \quad (12.19)$$

On veut maintenant que la somme des trois flux entrant en un sommet bleu soit égale au spin total de la plaquette centrée sur ce sommet. Cela impose alors les conditions

$$\begin{aligned} \alpha + 2\beta &= 1, \\ \beta + \eta &= \gamma, \\ \eta + \chi &= \delta, \end{aligned} \quad (12.20)$$

sur les quatre coefficients α , β , η et χ . On peut observer que ce système n'est pas fermé, il existe donc des constructions valables quelque soient les valeurs des paramètres γ et δ . Maintenant que les flux sont bien définis, le tenseur de polarisation peut être défini sur chaque lien j comme

$$P_{ij}^\alpha = \Pi_j^\alpha u_j^i \quad (12.21)$$

avec \mathbf{u}_j le vecteur donnant la direction et l'orientation du lien j . La version continue de ce tenseur de polarisations sera ainsi de divergence nulle par construction.

On voit qu'on confirme pour ce système aussi que l'observation de points de pincement dans le facteur de structure semble corrélée avec l'existence d'un tenseur de polarisation suivant une loi de Gauss.

12.5 Lignes de dégénérescence

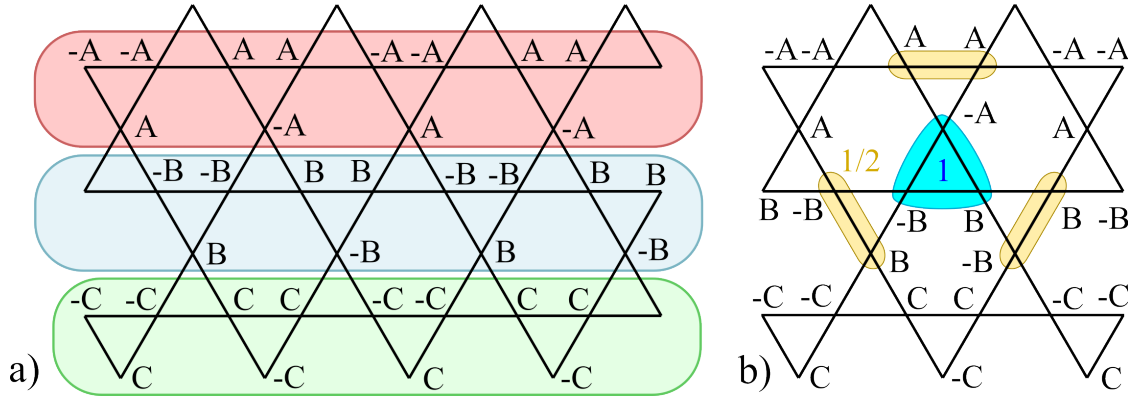


FIGURE 12.10 – Configurations apparaissant pour les valeurs particulières $\gamma = 1/2$ et $\delta = 0$ des deux paramètres du hamiltonien. Ces configurations présentent des lignes répétant un même motif avec une périodicité $4a$ tout le long du système. Ces lignes sont par ailleurs complètement décorréélées les unes des autres.

On a pu observer dans les sections précédentes qu'il existait des lignes de dégénérescence circulaires sur l'axe $\delta = \gamma$. Ces dernières peuvent être décrites exactement de la même manière que dans le cas du damier, voir section 11.7.2. On pourra néanmoins remarquer que pour $\gamma \gtrsim 1/2$ les lignes de dégénérescence adoptent une forme triangulaire arrondie, les structures correspondantes existant dans l'espace réel ne seront donc vraisemblablement pas aussi symétriques que celles correspondant à des lignes de dégénérescence circulaires. La structure devrait néanmoins toujours être constituée d'éléments concentriques présentant des orientations moyennes de spin alternées.

Il existe aussi dans le présent modèle trois configurations présentant des lignes de contact rectilignes dans l'approximation de Luttinger-Tisza, voir figure 12.4. On se propose ici de présenter les configurations correspondantes dans l'espace réel.

On commence par traiter le cas observé pour les paramètres $\gamma = 1/2$ et $\delta = 0$. On y observe des lignes rectilignes, ayant trois orientations orthogonales aux trois directions naturelles du réseau, et étant situées aux abscisses $\pi/2a$. Cela doit donc correspondre dans l'espace réel à la formation de lignes, décorréélées selon une des directions, et présentant une périodicité de $4a$ selon la seconde direction. Une telle configuration est présentée sur la figure 12.10 a), on observe bien que lors d'une translation de longueur $2a$ le long d'une des lignes les 3 spins du triangle considéré changent de signe. Les

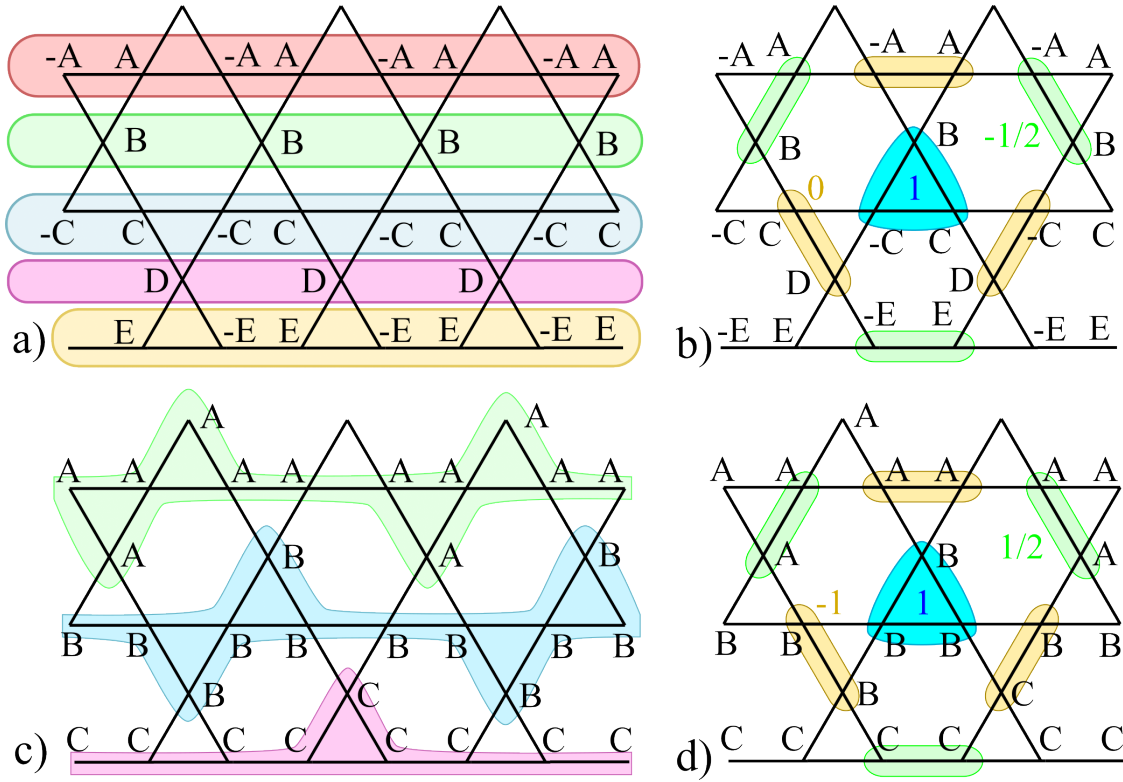


FIGURE 12.11 – Configurations dans l’espace réel responsables de l’apparition de lignes de dégénérescence dans le facteur de structure pour $\gamma = 0$ et $\delta = -1/2$ en **a)**, et $\gamma = -1$ et $\delta = 1/2$ en **c)**. On y observe des lignes étendues le long de l’intégralité du système, mais décorréélées entre elles. Dans le cas **a)** ces lignes possèdent une périodicité de longueur $2a$ avec a le pas du réseau, tandis que dans le cas **c)** on a seulement un mode zéro avec la répétition d’un unique motif. Les figures **b)** et **d)** permettent de facilement constater que les deux configurations présentées respectent bien la contrainte $\mathcal{S}_p = 0$ pour chaque plaquette p .

configurations de ce type respectent bien la condition $\mathcal{S}_p = 0$ pour chaque plaquette, sans imposer de contrainte liant deux lignes voisines. On peut en effet voir sur la figure 12.10 b) qu’on a bien, pour la plaquette étendue considérée

$$\mathcal{S} = \frac{1}{2}(A + A) - A + \left(\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2}\right)(B - B) = 0, \quad (12.22)$$

peu importe la relation entre les spins choisis A et B .

Si on regarde maintenant la structure observée sur la figure 12.4 pour $(\gamma, \delta) = (0, -1/2)$ et $(-1, 1/2)$ on voit qu’on a des lignes de dégénérescence ayant les mêmes trois orientations que dans le cas précédent, mais cette fois situées⁶ en 0. Cela signifie

6. Les centres des zones de Brillouin secondaires sont situés en $n\pi/a$ avec n un entier. Le mode 0 de ces zones de Brillouin secondaires correspond donc aux harmoniques de fréquence $n\pi/a$.

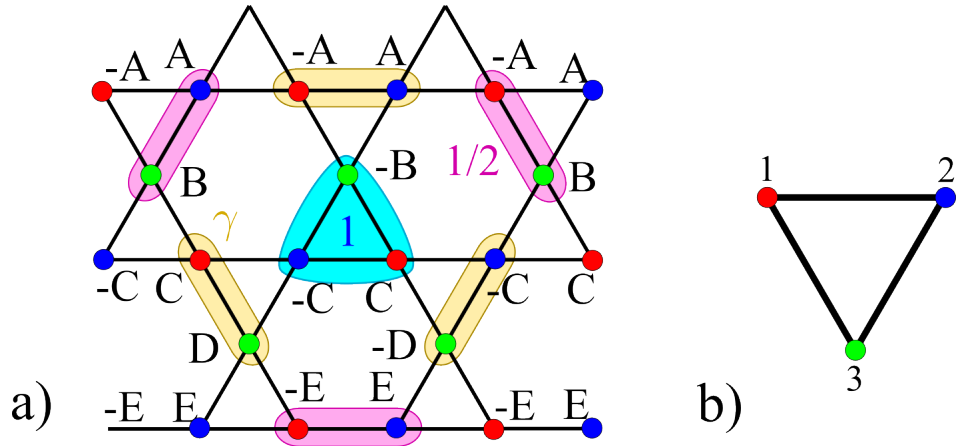


FIGURE 12.12 – Construction dans l’espace réel valable pour $\delta = 1/2$ et γ quelconque. On observe que les différentes lignes horizontales n’ont pas besoin d’être corrélées entre elles pour satisfaire la condition $\mathcal{S}_p = 0$ pour toute plaquette p .

qu’on doit cette fois avoir des lignes ne présentant qu’un unique motif, répété d’une maille élémentaire à la suivante. Il se trouve qu’une telle construction peut bien être réalisée, en particulier dans le cas $\gamma = 0$ et $\delta = -1/2$, comme présenté sur la figure 12.11 a). On y observe des lignes de spin s’étendant selon une des directions préférentielles du réseau, et étant décorrélées les unes des autres. Les lignes contenant des spins de deux sous réseaux alternent un unique spin qui change de signe d’un sous réseau à l’autre. Les lignes contenant les sites du troisième sous réseau ne comportent quant à elle qu’un unique spin. On peut vérifier avec le schéma présenté sur la figure 12.11 b) que cette structure respecte bien la condition $\mathcal{S}_p = 0$ pour chaque plaquette p .

Pour $\gamma = -1$ et $\delta = 1/2$ la situation est un peu différente puisqu’on a cette fois un chevauchement entre des lignes répétant un unique motif, comme présenté sur la figure 12.11 c). De telles configurations doivent bel et bien conduire à l’apparition de raies situées en 0 dans l’espace réciproque, mais devraient aussi conduire à l’apparition de raies situées en $\pi/2a$ à cause des lignes comportant deux motifs répétés successivement et ayant donc une périodicité de $4a$. Ces raies ne sont étonnamment pas observées dans le cadre de l’approximation de Luttinger Tisza, et on va maintenant expliquer pourquoi, mais avant nous allons présenter une construction alternative.

On présente sur la figure 12.12 a) une construction valable pour $\delta = 0.5$ et pour toute valeur de γ . Cette construction fait là encore apparaître des lignes décorrélées selon une direction mais corrélées selon l’autre direction. Les lignes de spin comportant des sites des deux premiers sous réseaux possèdent une périodicité de $2a$, tandis que les lignes ne comportant que des sites du troisième sous réseau possèdent une périodicité de $4a$. Regardons le premier type de ligne, les spins appartenant à cette ligne et au second sous réseau sont opposés aux spins appartenant à la même ligne mais au premier sous réseau. Cela correspond dans l’approximation de Luttinger-Tisza à un mode

$(1, -1, 0)^t$. Le second type de ligne ne contient que des spins appartenant au troisième sous réseau, et correspond donc à un mode indépendant $(0, 0, 1)^t$. Si ces deux types de lignes possédaient la même périodicité na alors cela signifierait que pour la ligne de dégénérescence située en $q_x = 2\pi/na$ on devrait avoir un espace vectoriel associé à la valeur propre $\varepsilon = 0$ qui s'écrit

$$V_0 = \text{Vect} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \quad (12.23)$$

et donc de dimension 2. Cela requiert que la valeur propre $\varepsilon = 0$ soit au moins de multiplicité deux, et cela impose donc que la première bande dispersive touche la bande plate pour former une ligne de contact d'abscisse $q_x = \frac{2\pi}{na}$. Dans la situation présente néanmoins, les deux types de lignes (dans l'espace réel) n'ont pas la même périodicité, et correspondent donc à deux lignes de dégénérescence différentes dans l'espace réciproque. Ces dernières correspondent chacune à un mode différent, et ne nécessitent donc pas l'existence d'une ligne de contact entre la première bande dispersive et la bande plate. Cela explique que dans ce cas on a une configuration de type ligne de dégénérescence dans l'espace réel qui n'est pas observée dans la structure de la première bande dispersive obtenue grâce à l'approximation de Luttinger-Tisza.

Une autre manière de voir les choses serait de dire que lorsqu'il existe une configuration du type ligne de dégénérescence dans l'espace réel similaire à celle présentée sur la figure 12.12 a), mais qu'il n'y a pas de ligne de contact entre les bandes, alors ces configurations de l'espace réel appartiennent à la bande plate. Cela signifie qu'il doit être possible de continûment déformer ces lignes corrélées sans coût énergétique, correspondant à se déplacer dans la bande plate⁷. Au contraire lorsque les configurations de l'espace réel sont associées à l'existence d'une ligne de contact entre bandes, alors cela signifie que ces configurations appartiennent à la bande dispersive, et qu'elles ne peuvent donc pas être continûment déformées sans coût énergétique.

Si on se penche à nouveau sur le cas $\gamma = -1$, $\delta = 1/2$ qui est donc un cas particulier du cas général discuté ci dessus, on voit que le mode attendu avec une périodicité $4a$ appartient à la bande plate, et ne peut donc être repéré par une ligne de contact dans l'approximation de Luttinger Tisza. On voit par contre que les configurations de fréquence nulles corrélerent le troisième sous réseau avec les deux premiers. Utilisons pour le voir les notations de la figure 12.11 c), et prenons l'axe de spin x selon la bissectrice entre les spins A et B . On voit que les deux premiers sous réseaux possèdent un mode de fréquence nulle, correspondant à la répétition du motif A pour la première ligne. Le troisième sous réseau contient aussi un mode de fréquence nulle si on regarde les composantes des spins A et B selon l'axe de spin x . Puisque les spin A et B sont décorrélés, ces deux modes de fréquence nulle le sont aussi. On a donc nécessairement

7. Attention une telle déformation peut correspondre dans l'approximation de Luttinger-Tisza à faire aussi varier la taille des spins du réseau. En effet dans le cadre de cette approximation rien ne garantit qu'il existe une déformation continue préservant la norme des spins.

une ligne de contact associée à l'espace vectoriel $\text{Vect}[(1, 1, 0)^t, (0, 0, 1)^t]$ de dimension 2. Cela impose ainsi l'existence d'une ligne de contact entre la première bande dispersive et la bande plate, qui est bien observée sur la figure 12.4.

On peut terminer en résumant et en généralisant le raisonnement au cas d'un réseau ayant n sous réseaux, ayant une unique bande plate, et présentant des structures corrélées le long d'une des directions du réseau, et décorréelées selon l'autre. Si les spins placés sur les sites de ces n sous réseaux oscillent le long du réseau avec la même périodicité l alors il existe deux cas de figure. Soit les n sous réseaux sont corrélés entre eux, et coïncident ainsi à un unique mode, signifiant que les lignes de dégénérescence (au sens de configurations dans l'espace réel) sont contenues dans la bande plate, et donc indétectables par une analyse de la structure de bande. Si les spins placés sur m sous réseaux sont indépendants et donc décorrélés, alors cela signifie que les $m - 1$ premières bandes dispersives présenteront des lignes de contact rectilignes dont la position sera $2\pi/l$. Si maintenant les différentes lignes corrélées dans l'espace réel ont des périodicités différentes alors l'interprétation est plus compliquée. Il faut regarder le nombre p de lignes ayant la même périodicité l , et regarder parmi elles le nombre de sous réseaux m qui portent des spins indépendants, on aura alors une ligne de contact entre les $m - 1$ bandes dispersives et la bande plate. Cette ligne de contact aura pour abscisse $2\pi/l$.

12.6 Point multicritique

On a mentionné le fait que lorsque $\delta = \gamma = 1/2$ la première bande dispersive apparaît toucher la bande plate en tout point de l'espace réciproque, formant ainsi une seconde bande plate. On est en droit de se demander quelles sont les implications physiques d'un tel phénomène. On peut commencer par remarquer que le facteur de structure observé dans cette configuration, présenté sur la figure 12.6, est le même que celui observé pour le modèle où le réseau de kagomé est vu comme des hexagones se touchant par les coins. Ce système sera discuté en détails dans le chapitre suivant, on y considère comme plaquettes élémentaires les hexagones du kagomé, le hamiltonien étant défini comme la somme des spins totaux de ces plaquettes mis au carré. Le point important est que le facteur de structure observé ne présente pas de point de pincement, alors que la construction d'un tenseur satisfaisant une loi de Gauss présentée à la section 12.4 est valable pour toutes les valeurs de δ et γ .

On peut résoudre ce paradoxe apparent en regardant tout d'abord si le système se comporte bien comme si les plaquettes constitutives étaient hexagonales. Pour cela on peut regarder grâce aux simulations Monte Carlo quel est le spin total moyen des hexagones composant le système, on observe alors que la norme de ces spins totaux est bel et bien proche de 0. Si on compare à d'autres configurations $(\gamma, \delta) \neq (1/2, 1/2)$ on observe en effet que la norme moyenne des spin totaux des hexagones est environ vingt fois plus faible que dans les autres cas. Cela signifie qu'il y a pour ces valeurs précises des

paramètres γ et δ un phénomène d'ordre par le désordre qui impose la contrainte de spin total nul, non pas sur les plaquettes triangulaires étendues, mais sur chacun des trois hexagones qui composent cette plaquette étendue. On peut voir que ces configurations constituent bien un sous ensemble de l'ensemble des états fondamentaux, puisque le spin total d'une plaquette généralisée peut s'écrire, lorsque $(\gamma, \delta) = (1/2, 1/2)$ comme

$$\mathcal{S}_p = \frac{1}{2} \sum_{h \in p} \mathcal{S}_h \quad (12.24)$$

où la somme se fait sur les trois hexagones qui composent la plaquette étendue p . On voit donc bien que si $\mathcal{S}_h = 0$ pour chaque hexagone du système alors $\mathcal{S}_p = 0$ pour chaque plaquette étendue. L'étude détaillée du phénomène d'ordre par le désordre sélectionnant ce sous ensemble d'états fondamentaux est trop longue et compliquée à traiter pour ce manuscrit.

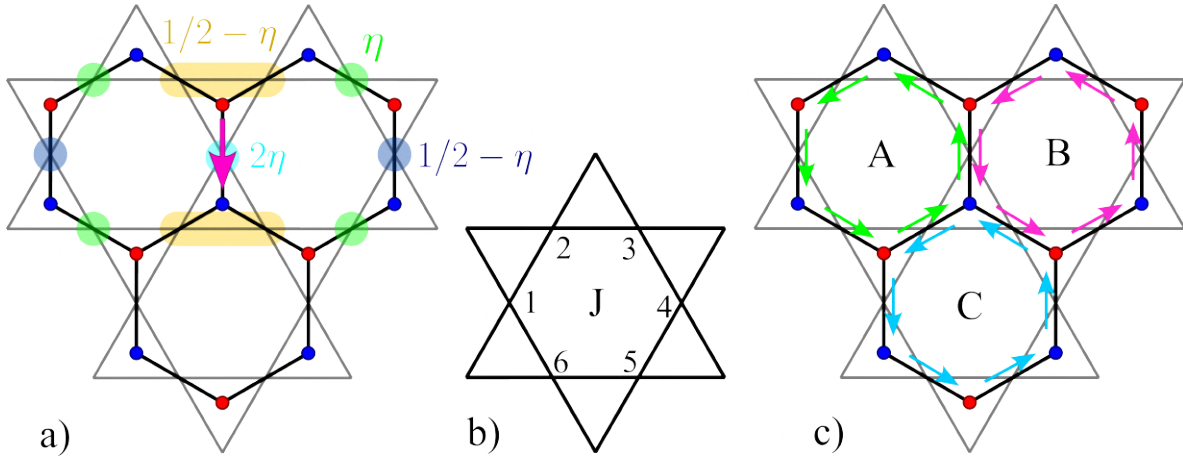


FIGURE 12.13 – **a)** Expression des coefficients pondérant les flux attachés au liens lorsque $(\gamma, \delta) = (1/2, 1/2)$. La flèche rose indique que les liens sont orientés des sites rouges vers les sites bleus. **b)** Choix de numération possible pour les six spins composant l'hexagone J . **c)** Les demi-flux π_i^J , constitués des spins de l'hexagone J , s'enroulent autour de cet hexagone une fois attachés aux liens orientés. Il en résulte l'existence de boucles de champ fermées, coïncidant, dans une limite continue à un tenseur de polarisation uniformément nul.

Maintenant qu'on a clairement établi que pour ces paramètres le spin total de chaque hexagone est nul, on peut regarder comment cela affecte la construction de la loi de Gauss. Si on reprend les équations (12.20) dans le cas $(\gamma, \delta) = (1/2, 1/2)$ on obtient que

$$\begin{aligned} \beta &= \chi, \\ \frac{\alpha}{2} &= \eta, \\ \eta + \chi &= \frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (12.25)$$

comme illustré sur la figure 12.13 a). On peut maintenant considérer chaque flux $\mathbf{\Pi}_i$ placé sur un lien i comme étant constitué de deux demi-flux π_i^J , l'un contenant les spins d'un des deux hexagones jouxtant le lien i , et l'autre contenant les spin de l'autre hexagone. Dans ce cas on voit notamment que chacun de ces deux demi-flux peut s'exprimer comme

$$\begin{aligned}\pi_i^J &= \frac{\alpha}{2}\mathbf{S}_1^J + \beta(\mathbf{S}_2^J + \mathbf{S}_6^J) + \eta(\mathbf{S}_3^J + \mathbf{S}_5^J) + \chi\mathbf{S}_4^J \\ &= \eta(\mathbf{S}_1^J + \mathbf{S}_3^J + \mathbf{S}_5^J) + \chi(\mathbf{S}_2^J + \mathbf{S}_4^J + \mathbf{S}_6^J),\end{aligned}\tag{12.26}$$

selon les notations de la figure 12.13 b), et où on a considéré le lien sur lequel est placé le spin numéro 1. Or puisque le spin total de chaque hexagone est nul on a $\sum_{i=1}^6 \mathbf{S}_i^J = 0$ pour tout J , et ainsi

$$\pi_i^J = (\eta - \chi)(\mathbf{S}_1^J + \mathbf{S}_3^J + \mathbf{S}_5^J) = \left(\frac{1}{2} + 2\eta\right)(\mathbf{S}_1^J + \mathbf{S}_3^J + \mathbf{S}_5^J).\tag{12.27}$$

Maintenant qu'on a ce résultat, on peut voir sur la figure 12.13 c) que si on considère par exemple le site i situés entre les hexagones A et B , et le site j situé entre les hexagones B et C alors on a

$$\pi_i^B = -\pi_j^B = \left(\frac{1}{2} + 2\eta\right)(\mathbf{S}_1^B + \mathbf{S}_3^B + \mathbf{S}_5^B).\tag{12.28}$$

Or puisque par construction les liens sont orientés des sites bleu vers les sites rouges du réseau hexagonal, on en déduit que les demi-flux orientés associés à un hexagone circulent autour de cet hexagone, comme représenté sur la figure 12.13 c)⁸. On en déduit que le tenseur de polarisation, obtenu en prenant une limite continue de ces flux orientés, sera uniformément nul puisque constitué de boucles de flux fermées et microscopiques. Dans cette situation on voit que le tenseur de polarisation obtenu est bien de divergence nulle mais que cela importe peu puisqu'il est uniformément nul, correspondant à une fonctionnelle énergie de la forme

$$H = E_0\delta(\mathbf{P}) \simeq \lim_{\kappa \rightarrow \infty} E_0 \frac{\kappa}{2} \int d^2x P_i^\alpha P_\alpha^i.\tag{12.29}$$

Les corrélateurs assimilés à une telle énergie ne présenteront donc pas de point de pincement, comme observé dans le facteur de structure grâce aux simulations Monte Carlo.

Ce point de l'espace des phases est donc réellement très particulier, puisqu'il permet d'illustrer comment un phénomène d'ordre par le désordre peut conduire à une situation finalement plus désordonnée avec uniquement des corrélations à courte portée. Il constitue de plus le seul cas présenté ici où on observe une transition entre un

8. On a pris sur la figure 12.13 c) le demi-flux π_i^B comme un scalaire positif, afin de représenter les flux orientés comme des vecteurs. En réalité la situation est un peu plus compliquée puisque le demi-flux π_i^B est un vecteur, mais on peut faire le même raisonnement pour chaque composante de spin du demi-flux π_i^B séparément.

système à deux bandes dispersives vers un système possédant une unique bande dispersive, comme si le système devenait spontanément centrosymétrique, ce qui est bel et bien le cas puisque les plaquettes effectives sélectionnées par le phénomène d'ordre par le désordre, hexagonales, sont centrosymétriques.

On peut noter au passage que dans les équations portant sur les coefficients des flux dans les constructions des lois de Gauss, telles que (12.20), on a toujours un paramètre au moins qui demeure libre. Il apparaît maintenant à la lumière de cette discussion que le choix de ces paramètres ne fait que conditionner l'amplitude de flux formant des lignes fermées, et n'impacte donc pas la structure du tenseur de polarisation obtenu en prenant la version gros grains de ces flux orientés. On peut donc simplement voir le choix de ces paramètres libres comme un choix de jauge.

13 Le réseau de kagomé vu comme composé d'hexagones

Ce chapitre porte sur le troisième et dernier exemple traité dans ce manuscrit, le réseau de kagomé mais cette fois vu comme composé d'hexagones se touchant par les coins. Cet exemple se révèle très différent des deux premiers, puisque la phase dominante est ici un liquide de spin à courte portée. On commencera par établir le diagramme de phase du système, avant de décrire en détail les phases critiques, isolées, présentant des corrélations dipolaires.

Contenu du chapitre

| | |
|---|------------|
| 13.1 Propriétés du vecteur de contrainte | 211 |
| 13.2 Approximation de Luttinger Tisza | 212 |
| 13.3 Simulations Monte Carlo | 213 |
| 13.4 Construction des lois de Gauss | 217 |
| 13.4.1 Cas $\gamma = 1/2$ | 217 |
| 13.4.2 Cas $\gamma = -1$ | 221 |

On va étudier dans ce chapitre un troisième exemple de système décrit par un hamiltonien sur plaquette, et placé sur un réseau composé d'hexagones se touchant par les coins. Ce système se révèle produire une phénoménologie qualitativement différente des deux exemples précédents.

On considère là encore le hamiltonien (10.1) défini comme une somme sur des plaquettes avec un spin total qui est défini comme

$$\mathbf{S}_p = \sum_{i \in p} \mathbf{S}_i + \gamma \sum_{i \in \langle p \rangle} \mathbf{S}_i \quad (13.1)$$

pour la plaquette p , où les coefficients 1 et γ sont pris suivant la figure 13.1. Les six spins appartenant au coeur de la plaquette sont comptés avec un coefficient 1 tandis que les six spins entourant cet hexagone central sont pris avec un facteur γ .

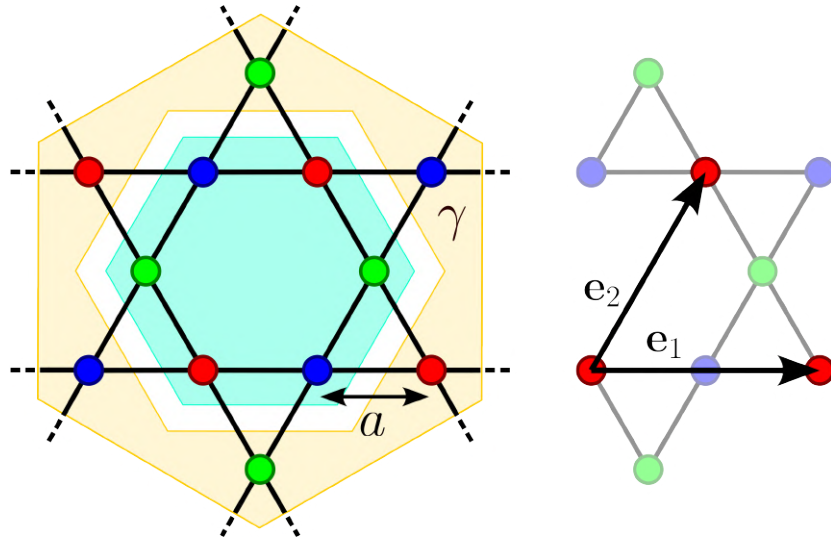


FIGURE 13.1 – Plaquette étendue pour le réseau de kagomé vu comme composé d’hexagones. Les spins de l’hexagone central, auréolé de bleu, entrent avec un coefficient 1 dans le spin total \mathcal{S}_p de la plaquette représentée, tandis que les spins appartenant à la couronne, représentée en jaune, sont pris avec un facteur γ . Ce réseau possède trois sous réseaux, dont les sites sont représentés avec des points de trois couleurs différentes, bleu, vert et rouge.

Il est important de noter que le réseau considéré ici est construit à partir du réseau de kagomé, où les hexagones se touchent par les **coins**. Ce réseau ne doit pas être confondu avec celui construit à partir d’un réseau hexagonal, où les hexagones se touchent par les **côtés**, qui se trouve être analogue seulement dans le cas spécifique $\gamma = 1/2$, comme il sera discuté plus bas.

Ce système a déjà été étudié[25] dans le cas $\gamma = 0$ et s’est révélé héberger un liquide de spin à courte portée à température nulle. Ce liquide de spin présente des corrélations spin-spin décroissant exponentiellement dans l’espace réel, et ne présente donc pas de points de pincement dans son facteur de structure.

On se propose de commencer, comme pour les exemples précédents, par décrire le vecteur de contrainte.

13.1 Propriétés du vecteur de contrainte

Tout comme dans le cas du réseau de kagomé vu comme composé de triangles le réseau possède trois sous réseaux, représentés via des points de couleur rouge, bleu ou verte sur la figure 13.1. Cette fois cependant la plaquette possède une symétrie centrale, ce qui implique que le vecteur de contrainte $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ ait toujours trois composantes, mais

réelles cette fois. On peut en déduire que les défauts topologiques associés au vecteur de contrainte sont des skyrmions. On rappelle que la norme du champ $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ n'a pas besoin de s'annuler au centre d'un skyrmion. Cela signifie qu'on va pouvoir, non pas associer une singularité à un nombre de skyrmions non nul, mais à un saut du nombre de skyrmions. En effet une modification du nombre de skyrmions dans la première zone de Brillouin correspond par définition au passage d'un secteur topologique à une autre, ce qui ne peut se faire sans que le champ \mathbf{L} ne devienne singulier. La charge topologique contenue dans la zone de Brillouin se calcule comme

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int_{BZ} d\mathbf{q} \tilde{\mathbf{L}}(\mathbf{q}) \cdot \left(\frac{\partial \tilde{\mathbf{L}}(\mathbf{q})}{\partial q_x} \times \frac{\partial \tilde{\mathbf{L}}(\mathbf{q})}{\partial q_y} \right) \quad (13.2)$$

où le vecteur de contrainte $\mathbf{L}(\mathbf{q})$ a été préalablement normalisé

$$\tilde{\mathbf{L}}(\mathbf{q}) \equiv \frac{\mathbf{L}(\mathbf{q})}{\|\mathbf{L}(\mathbf{q})\|}. \quad (13.3)$$

On peut observer sur la figure 13.2 que la charge topologique totale ne varie que pour trois valeurs de γ qui valent respectivement -1, 1/2 et 1. On peut de plus voir sur cette même figure que la norme du vecteur de contrainte s'annule bel et bien uniquement pour ces trois valeurs, et que cette annulation se fait à chaque fois en un point caractéristique différent de la zone de Brillouin.

Le vecteur de contrainte peut être utilisé pour obtenir le facteur de structure à température nulle selon la méthode explicitée dans la section 10.2.1. On a ainsi, selon l'équation (10.16), que le facteur de structure s'écrit dans le cas présent comme

$$\mathbb{S}(\mathbf{q}) \propto 2 - 2 \frac{L_1 L_2 + L_1 L_3 + L_2 L_3}{\|\mathbf{L}\|^2}. \quad (13.4)$$

Les tracés correspondant à ce facteur de structure sont donnés sur la figure 13.4. On observe l'apparition de points de pincement pour $\gamma = -1, 1/2$ et 1, comme attendu après analyse de la charge topologique du vecteur de contrainte. On peut noter que pour $\gamma = -1$ le point de pincement est situé en Γ , tandis qu'ils sont situés aux points K pour $\gamma = 1/2$ et au points M pour $\gamma = 1$.

On se propose maintenant de poursuivre avec une analyse complémentaire du système utilisant l'approximation de Luttinger-Tisza.

13.2 Approximation de Luttinger Tisza

Le vecteur de contrainte possédant trois composantes réelles on aura dans le contexte de l'approximation de Luttinger Tisza trois bandes dont deux bandes plates et une dispersive. La relation de dispersion de la bande dispersive s'exprime simplement comme

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = \frac{J}{2} \|\mathbf{L}(\mathbf{q})\|^2 \quad (13.5)$$

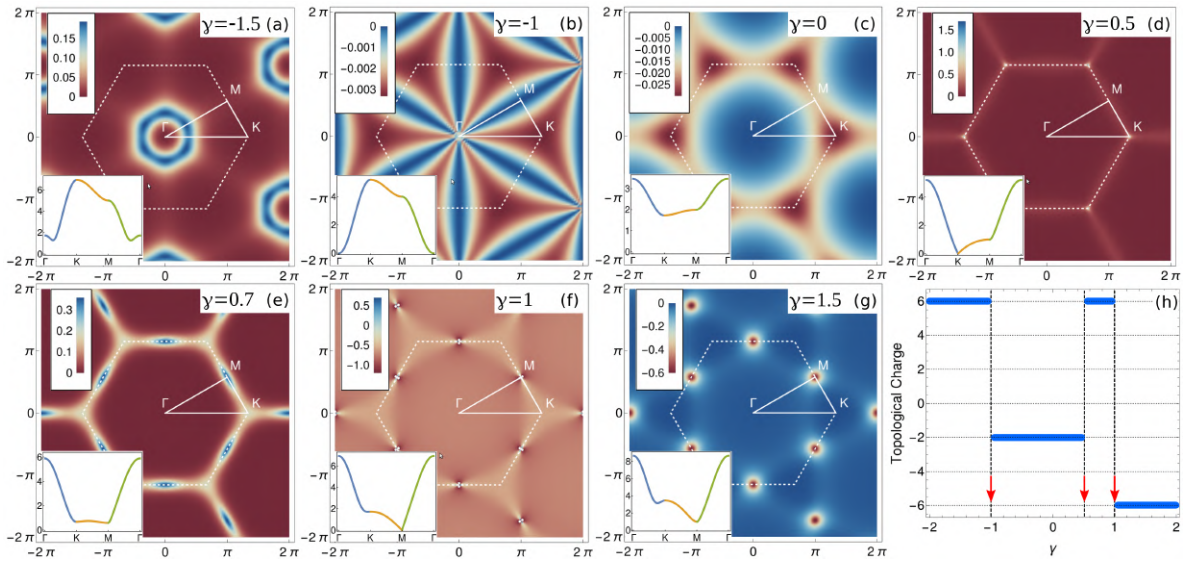


FIGURE 13.2 – On a tracé dans les différentes sous figures la densité de skyrmion, à savoir l’intégrande de l’équation (13.2), pour différentes valeurs du paramètre γ . Dans chaque figure est inséré un tracé de la norme du vecteur de contrainte $\|\mathbf{L}(\mathbf{q})\|$ selon la courbe $\Gamma \rightarrow K \rightarrow M \rightarrow \Gamma$. On a tracé sur la dernière figure la charge topologique totale Q de la zone de Brillouin, en fonction de γ . On peut observer que cette charge totale varie à trois reprises, pour $\gamma = -1, 1/2$ et 1 .

et on voit que l’approximation de Luttinger Tisza ne va faire ici que corroborer ce qu’on a observé concernant la norme du vecteur de contrainte sur la figure 13.2. On présente tout de même sur la figure 13.3 un tracé donnant l’évolution de l’écart minimum entre les bandes plates et la bande dispersive en fonction de γ . On observe bien que cette dernière vient toucher les deux autres bandes pour γ valant $-1, 1/2$ et 1 , sans surprise.

On peut tout de même noter que la dispersion des points de contact n’est pas la même dans les trois cas. Elle est quadratique pour $\gamma = 1/2$ et $\gamma = 1$, mais quartique pour $\gamma = -1$. On peut en déduire que les points de pincements observés dans le facteur de structure pour $\gamma = -1$ devraient présenter quatre bras, et être associés à un tenseur de rang 2.

13.3 Simulations Monte Carlo

On se propose maintenant de compléter cette analyse préliminaire en s’intéressant aux facteurs de structure obtenus grâce à des simulations Monte-Carlo. On présente sur la figure 13.4 les facteurs de structures associées aux valeurs particulières $\gamma = -1, 1/2$ et 1 , coïncidant avec les trois phases présentant des corrélations dipolaires. Ces facteurs de structure présentent des points de pincement situés aux points de la zone

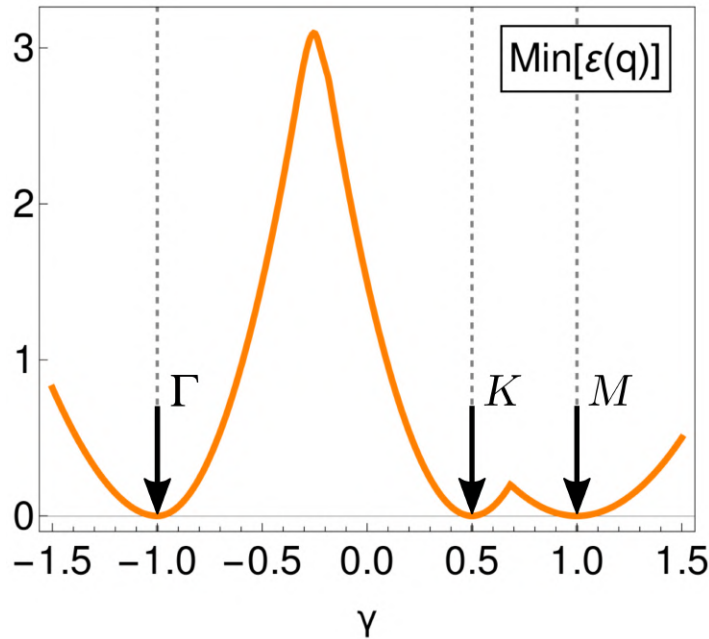


FIGURE 13.3 – Tracé (en unités de J) de la hauteur du minimum de la bande dispersive, en fonction de γ . Ce tracé peut être vu de manière équivalente comme le tracé de l'écart minimum entre les deux bandes plates et la bande dispersive. On observe un contact entre les bandes pour γ valant -1 , $1/2$ et 1 , en bon accord avec les prédictions faites lors de l'analyse des propriétés topologiques du vecteur de contrainte.

de Brillouin prédits par les deux analyses précédentes. Ces points de pincement sont standards pour $\gamma = 1/2$ et $\gamma = 1$, tandis qu'ils présentent quatre bras pour $\gamma = -1$, en bon accord avec les dispersions des points de contact observés dans le contexte de l'approximation de Luttinger-Tisza. On présente aussi sur cette figure les facteurs de structure obtenus lorsque γ diffère de ces trois valeurs critiques. On observe alors pour ces valeurs que le facteur de structure ne présente pas de point de pincement, indiquant que les corrélations spin-spin sont ici de portée finie, correspondant donc au cas d'un liquide de spin dit de courte portée.

La figure 13.4 présente de plus une comparaison de ces facteurs de structure avec ceux prédits par la méthode projective (13.4). On constate que l'accord est excellent, quel que soit le type de liquide de spin considéré.

Ces résultats mis bout à bout confirment que le présent système se révèle héberger trois liquides de spin à longue portée, présentant des corrélations algébriques, séparant à chaque fois des liquides de spin à courte portée caractérisés par des fonctions de corrélation décroissant exponentiellement à température nulle.

Les simulations de Monte Carlo permettent aussi de tracer la chaleur spécifique C_v du système en fonction de la température pour une valeur du paramètre γ donnée. Les résultats sont présentés sur la figure 13.5. Il apparaît que la chaleur spécifique dépend

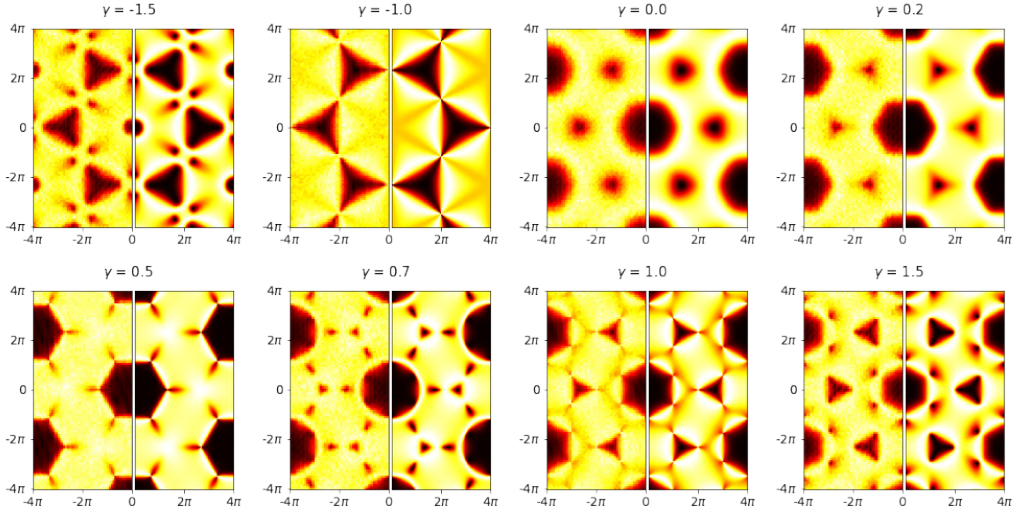


FIGURE 13.4 – Comparaison entre les facteurs de structure obtenus via des simulations Monte Carlo et via la méthode projective (voir équation (13.4)). L'échelle est en $1/2a$. On a divisé chaque figure en 2 parties, pour présenter sur la gauche les résultats obtenus par Monte Carlo et à droite la prédiction analytique donnée par la méthode projective. L'accord est excellent quelle que soit la valeur de γ considérée. Des points de pincement sont observés pour $\gamma = -1, 1/2$ et 1 comme attendu.

peu de la valeur du paramètre γ et semble toujours converger vers la valeur $1/2$. Cette valeur peut être prédite en comptant le nombre de spins par plaquette et en regardant à combien de plaquettes appartient chaque spin du système. Dans le cas où γ est nul, les plaquettes sont de simples hexagones, comportant $q = 6$ spins, chacun de ces spins étant partagé entre $b = 2$ plaquettes. Si on étend la plaquette en prenant γ différent de 0, on a cette fois $q = 12$ spins par plaquettes. On peut voir sur la figure 13.6 que chacun de ces spins se partagent sur $b = 4$ plaquettes. Cela signifie que le ratio $q/b = 3$ est le même que γ soit nul ou non. On en déduit que le nombre de modes d'énergie nulle par plaquette vaut ici

$$F = \frac{q}{b}(n - 1) - n = 3 \quad (13.6)$$

et la chaleur spécifique associée à ces modes 0 vaut ainsi

$$C_v = \frac{bn}{2q} = 1/2. \quad (13.7)$$

Ce résultat correspond donc bien à l'observation qui a pu être faite sur la figure 13.5.

Le fait que les chaleurs spécifiques observées sur la figure 13.5 convergent toutes vers la même valeur prédite par le compte des modes 0 présentées ci dessus suggère qu'il n'y a pas de modes mous pour ce système. Cela signifie qu'il n'y aura pas a priori de phénomène d'ordre par le désordre pour ce système.

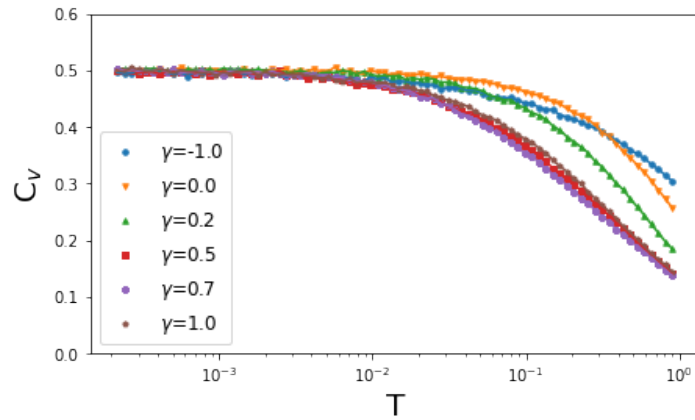


FIGURE 13.5 – Chaleurs spécifiques tracées en fonction de la température, obtenues grâce à des simulations de Monte Carlo pour un réseau de kagomé vu comme composé d’hexagones se touchant par les coins. La chaleur spécifique semble converger vers la valeur $1/2$ quelle que soit la valeur du paramètre γ . Cela suggère qu’il n’y a pas de modes mous et donc pas de phénomène d’ordre par le désordre pour ce modèle.

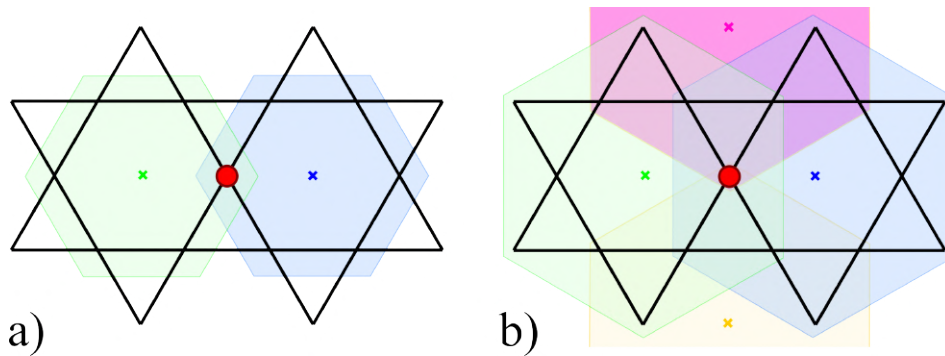


FIGURE 13.6 – Schéma permettant l’identification du nombre de spin par plaquette, et du nombre de plaquettes recouvrant un spin donné. a) Dans le cas $\gamma = 0$ on a une plaquette simple hexagonale, comportant $q = 6$ spins. Chacun de ces spins appartient à $b = 2$ plaquettes. b) Lorsque γ est non nul, on peut voir que les plaquettes étendues comportent maintenant $q = 12$ spins. On peut observer que le spin central représenté en rouge est partagé entre les $b = 4$ plaquettes voisines. On a donc pour cet exemple aussi un rapport q/b qui vaut toujours la même valeur, ici égale à 3.

13.4 Construction des lois de Gauss

On vient de voir par différents moyens que le système se révèle héberger trois liquides de spin de longue portée, pour trois points critiques de l'espace des paramètres. Il est ainsi légitime de chercher si à chacune de ces trois valeurs correspond une construction produisant un tenseur de polarisation suivant une loi de Gauss. Puisque ces trois liquides de spins algébriques sont séparés par des liquides de spin à courte portée, il est légitime de s'attendre à ce que ces trois constructions soient qualitativement différentes. Nous ne sommes parvenus à établir de telles constructions que dans les deux cas $\gamma = -1$ et $\gamma = 1/2$, que nous présentons maintenant en détail.

13.4.1 Cas $\gamma = 1/2$

On se propose d'illustrer ce cas par deux chemins différents en apparence mais équivalents. Pour $\gamma = 1/2$ le système peut en effet être vu comme analogue au système plus simple où le réseau est hexagonal. On se propose donc de traiter en premier ce cas, avant de traiter explicitement le cas qui nous intéresse.

Réseau hexagonal

Commençons par montrer que le cas $\gamma = 1/2$ est analogue à celui d'un système décrit par un hamiltonien sur plaquette défini sur le réseau hexagonal

$$H = \frac{J}{2} \sum_{\square} \left(\sum_{i \in \square} \mathbf{S}_i \right)^2 = \frac{J}{2} \sum_{\square} (\mathcal{S}_{\square})^2. \quad (13.8)$$

Pour cela on regroupe, pour chacun des six triangles composant la plaquette de la figure 13.1, les trois spins en un unique spin effectif selon

$$\mathbf{S}_{\Delta} = \sum_{i \in \Delta} \mathbf{S}_i. \quad (13.9)$$

On se retrouve alors avec une plaquette entourées de six spins effectifs, un par triangle. On voit de plus que puisque ces six triangles sont centrés sur les sites du réseau bidual, qui est hexagonal, tout se passe comme si on avait des spins effectifs \mathbf{S}_{Δ} situés sur le réseau hexagonal. Dans une telle situation on voit que si on fait la somme des six spins effectifs entourant une plaquette hexagonale on obtient

$$\mathcal{S}_{\square_p} = \sum_{\Delta \in p} \mathbf{S}_{\Delta} = 2\mathcal{S}_p. \quad (13.10)$$

C'est dû au fait que puisque les six triangles partagent deux à deux un sommet, on se retrouve en sommant sur les six triangles à compter deux fois les spins appartenant à l'hexagone central, et une fois seulement ceux de la couronne. On obtient donc que le

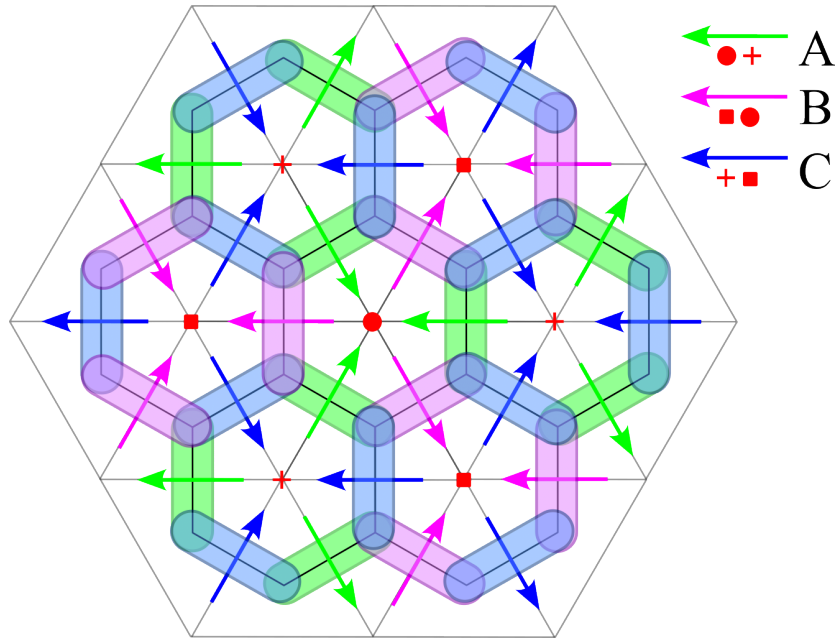


FIGURE 13.7 – Schéma indiquant les flux pertinents à considérer en vue d’obtenir un tenseur de polarisation suivant une loi de Gauss. Le réseau dual du réseau hexagonal est le réseau triangulaire, qui est tripartite. Les trois sous réseau correspondant sont indiqués par des ronds, des carrés et des croix. Les liens de ce réseau peuvent être arbitrairement orientés, comme représenté ici via des flèches de couleur. Chaque lien peut ensuite être attaché d’un flux composé de deux spins, auréolés ici de la même couleur que le lien orienté correspondant.

spin total d’une plaquette hexagonale tel que défini par (13.10) vaut deux fois le spin total de la plaquette correspondant dans le réseau original.

On voit donc qu’il existe une correspondance directe entre le cas d’un réseau hexagonal et l’exemple discuté dans ce chapitre lorsque $\gamma = 1/2$, si ce n’est que les spins placés sur le réseau hexagonal, obtenus par la transformation présentée ici, ne sont plus normés. Le modèle hexagonal a déjà été étudié précédemment [12, 13] et a déjà été classé comme hébergeant un liquide de spin algébrique. Il semble cependant qu’aucun champ obéissant à une loi de Gauss n’ait pu être identifié dans la littérature. Nous proposons maintenant la construction de ce tenseur dans le cas du réseau hexagonal, qui sera donc valable aussi pour notre système.

On considère le réseau dual du réseau hexagonal, qui est un réseau tripartite. Les trois sous réseau sont représentés par des ronds, des carrés et des croix sur la figure 13.7. Les liens de ce réseau peuvent être arbitrairement orientés, en choisissant par exemple que les liens soient dirigés de $+$ vers \circ , de \circ vers \square et de \square vers $+$, comme représenté sur la figure 13.7. On a notamment indexé les trois types de liens à l’aide de lettres capitales. Chaque lien orienté I peut maintenant être attaché par un flux Π^I

composé des deux spins adjacents au lien, soit

$$\mathbf{\Pi}^I = \alpha_I \sum_{j \in \langle I \rangle} \mathbf{S}_j. \quad (13.11)$$

Le coefficient α_I dépend généralement du lien considéré, et on va voir par la suite que ce point se révèle crucial. On rappelle que le but de cette construction est que le tenseur de polarisation construit à partir de ces flux orientés soit de divergence nulle. On demande pour cela que la somme des flux entrant et sortant en un sommet p soit proportionnelle au spin total \mathbf{S}_{\square_p} de la plaquette hexagonale centrée sur ce sommet. En effet ce spin total étant nul dans l'état fondamental, si la somme des flux lui est proportionnelle alors elle doit être nulle aussi. On note n_p le coefficient de proportionnalité entre la somme des flux entrant et sortant au sommet p et la le spin total de la plaquette correspondant. On écrit maintenant la condition

$$\sum_{I \in \langle p \rangle} \mathbf{\Pi}^I = n_p \mathbf{S}_{\square_p} \quad (13.12)$$

pour chaque type de plaquette. On voit que pour toutes les plaquettes chaque spin intervient dans deux flux distincts, l'un sortant et l'un rentrant. Cela mène à trois équations similaires, une pour chaque sous réseau,

$$\begin{aligned} \circ & : & \alpha_A - \alpha_B &= n_{\circ}, \\ \square & : & \alpha_B - \alpha_C &= n_{\square}, \\ + & : & \alpha_C - \alpha_A &= n_{+}. \end{aligned} \quad (13.13)$$

Ce système de trois équations porte sur six degrés de liberté, et n'est donc pas fermé. Sommer les trois équations donne que

$$\sum_I n_I = 0. \quad (13.14)$$

Cette équation est en fait très générale, et la somme comporte n termes pour un réseau n -partite. Cette équation n'apparaît pas explicitement pour les réseaux bipartites puisqu'alors on prend simplement $n_1 = -n_2 = 1$, avec 1 pour les sites où les flux sont rentrants, et -1 pour les sites où les flux sont sortants. Dans le cas tripartite cette équation se révèle fondamentale car on ne peut plus prendre deux coefficients égaux à -1 et $+1$ sans annuler le troisième, qui doit être strictement non nul pour que la construction ait un sens.

Pour chaque choix de coefficients $\{n_I\}$ satisfaisant la contrainte (13.14) on peut exprimer les trois coefficients restants α_I selon

$$\begin{aligned} \alpha_B &= \alpha_A - n_{\circ}, \\ \alpha_C &= \alpha_A + n_{+}, \end{aligned} \quad (13.15)$$

où on a choisi ici de conserver α_A comme un coefficient libre.

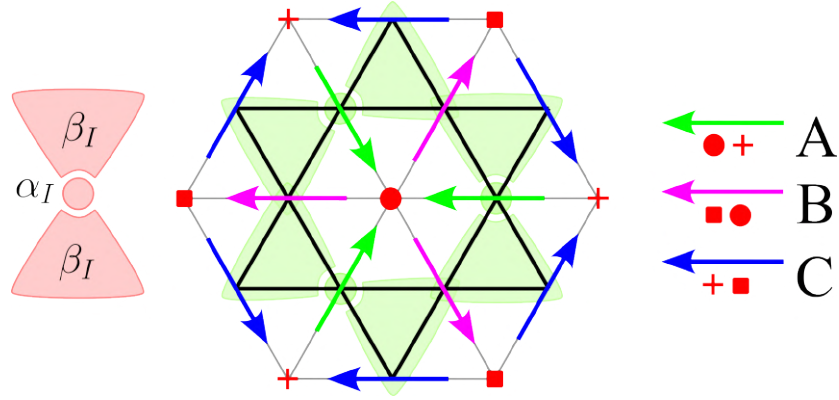


FIGURE 13.8 – Schéma de construction pour le tenseur de polarisation. Le réseau bidual du kagomé, le réseau triangulaire, est tracé en gris. Les trois types de sommets de ce réseau tripartite sont représentés par trois symboles différents. Les liens du réseau triangulaire sont orientés arbitrairement et indexés par des lettres capitales A, B et C. Chaque lien de type I est attaché d'un flux comprenant le spin traversé par le lien, compté avec un coefficient α_I et les quatre spins voisins comptés avec un facteur β_I . On a représenté seulement les flux attachés aux liens de type A par soucis de clarté.

En guise d'illustration on peut par exemple choisir $n_o = n_{\square} = -1$, $n_+ = 2$ et $\alpha_A = 1$, ce qui impose $\alpha_B = 2$ et $\alpha_C = 3$. Si on regarde par exemple les plaquettes \circ et qu'on fait la somme des six flux entrant et sortant, chaque spin rentre une fois, et sort deux fois. Cela signifie que la somme des flux vaut $-\mathcal{S}_{\circ}$, et doit donc être nulle puisque \mathcal{S}_{\circ} vaut zéro dans l'état fondamental.

Les flux étant ainsi définis, le protocole à suivre pour en déduire le tenseur de polarisation est similaire à celui suivi pour les exemples précédents.

On se propose maintenant de faire la construction explicitement dans le cas $\gamma = 1/2$, sans passer par l'intermédiaire du réseau hexagonal.

Construction directe

La construction directe se base sur les notations de la figure 13.8, qui est elle même analogue à celle utilisée dans le cas hexagonal décrit plus haut. On considère le réseau comprenant un site au centre de chaque hexagone, qui se trouve être simplement le réseau triangulaire. Ce réseau étant tripartite il existe trois types de liens, qu'on se propose de repérer avec des lettres capitales A, B et C, et qu'on oriente selon le schéma de la figure 13.8. Pour chaque type de lien I on construit un flux Π^I constitué du spin placé sur le lien, pris avec un coefficient α_I , et des quatre spins voisins comptés avec des facteurs β_I . On a ainsi

$$\Pi_I = \alpha_I \mathbf{S}_I + \beta_I \sum_{j \in \langle I \rangle} \mathbf{S}_j. \quad (13.16)$$

Tout comme pour le réseau hexagonal, les coefficients α_I et β_I sont supposés différents pour chaque type de lien. On demande maintenant que pour chaque site j la somme des flux entrant et sortant soit égale à un coefficient n_j fois le spin total de la plaquette entourant ce site, soit

$$\sum_{I \in \langle J \rangle} \eta_I \Pi_I = n_j \mathbf{S}_j \quad (13.17)$$

avec $\eta_I = \pm 1$ selon si le flux est entrant ou sortant. Cela mène à trois conditions par plaquette, on a par exemple

$$\begin{aligned} \alpha_A - 2\beta_B &= n_\circ \\ -\alpha_B + 2\beta_A &= n_\circ \\ \beta_A - \beta_B &= \gamma n_\circ \end{aligned} \quad (13.18)$$

pour les sites de type \circ , et trois équations de structure similaire pour les deux autres types de sites. Si on résout maintenant ce système de neuf équations en imposant que les trois coefficients n_j soient non nuls, on trouve que cela n'est possible que pour $\gamma = \frac{1}{2}$. Pour cette valeur particulière de γ on trouve alors

$$\sum_j n_j = 0 \quad (13.19)$$

comme pour le réseau hexagonal, et

$$\begin{aligned} \alpha_I &= 2\beta_I \\ \beta_B &= \frac{n_\circ + \alpha_A}{2} \\ \beta_C &= \frac{n_\circ + n_\square + \alpha_A}{2} \end{aligned} \quad (13.20)$$

où on a là encore fait le choix de conserver α_A comme seul paramètre libre (excepté 2 coefficients n_I). Ce résultat correspond en réalité exactement à celui obtenu pour le réseau hexagonal, et le tenseur de polarisation associé est donc identique.

L'intérêt de cette construction directe réside dans le fait qu'on peut en réalité prendre plus de liberté sur les coefficients, et prendre 4 coefficients différents pour les spin entourant un lien I plutôt qu'un unique coefficient β_I . Si on fait un tel exercice on trouve que le système correspondant possède toujours une solution pour $\gamma = 1/2$ mais aussi pour $\gamma = -1$, montrant qu'une construction plus complexe mais analogue est possible dans ce cas aussi. On présente néanmoins une construction alternative pour $\gamma = -1$ dans la section suivante, plus simple et plus sobre que celle présentement discutée qui fait intervenir 3 flux différents faisant chacun intervenir eux mêmes 5 spins pris chacun en compte avec un coefficient différent.

13.4.2 Cas $\gamma = -1$

Pour traiter ce cas on se propose de considérer cette fois le réseau dual du réseau de kagomé, le réseau en dés, représenté sur la figure 13.9. Chaque lien de ce réseau

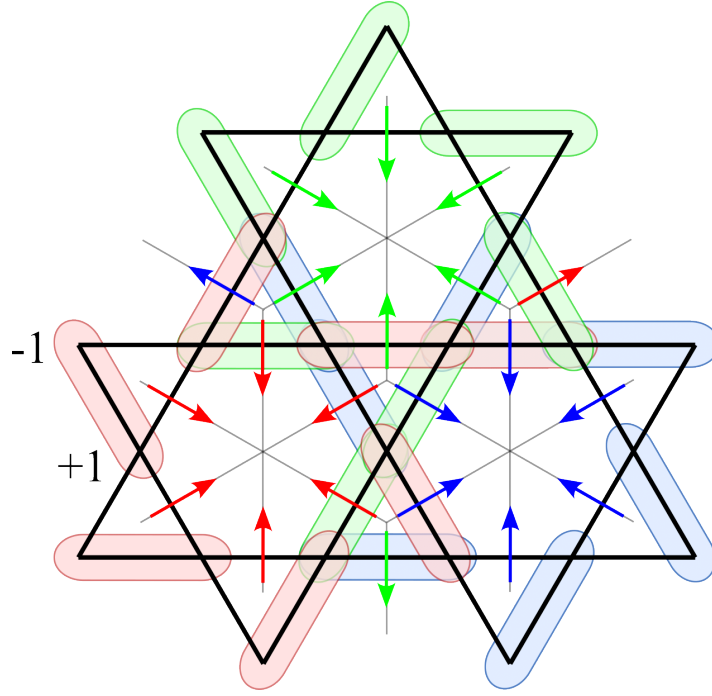


FIGURE 13.9 – Construction pertinente des flux permettant d’obtenir un tenseur de polarisation de divergence nulle dans le cas $\gamma = -1$. On a représenté le réseau dual du réseau kagomé, et orienté arbitrairement les liens comme allant toujours vers les centres des hexagones. Chaque lien orienté est attaché d’un flux composé des spins auréolées de la couleur du lien. Ces deux spins sont pris avec un coefficient $+1$ ou -1 , tel que la projection sur le lien du dipôle associé pointe dans la direction du lien, comme représenté sur la gauche de la figure.

peut être orienté comme montré sur cette même figure. On peut alors attacher un flux composés de deux spins à chaque lien. Ces spins sont entourés de la même couleur que le lien correspondant sur la figure 13.9. Ils sont comptés avec un coefficient $+1$ ou -1 , le spin situé du côté vers lequel pointe le lien étant pris¹ avec un coefficient $+1$. De cette manière on a

$$\sum_{i \in \square} \Pi_i = \mathcal{S}_p \quad (13.21)$$

lorsqu’on somme les six flux entourant une plaquette hexagonale. Cette somme est donc nulle dans l’état fondamental puisqu’alors $\mathcal{S}_p = 0$. Si on somme cette fois les trois flux sortant d’un triangle on voit que que chacun des trois spins composant le triangle est compté une fois avec un signe $+$ et une fois avec le signe $-$, on a ainsi

$$\sum_{i \in \triangle} \Pi_i = \sum_{i \in \triangle} (\mathbf{S}_i - \mathbf{S}_i) = 0 \quad (13.22)$$

1. On peut très bien prendre la convention inverse, l’important étant d’utiliser la même convention pour les six flux pointant vers un même site hexagonal, représentés d’une seule et même couleur sur la figure 13.9.

On en déduit que la somme des flux est nulle en tout sommet du réseau. On rappelle que tenseur de polarisation est obtenu en multipliant chacun de ces flux Π_i par le vecteur \mathbf{u}_i donnant la direction du lien i associé,

$$P_{ik}^\alpha = \Pi_i^\alpha u_i^k, \quad (13.23)$$

puis en prenant la limite continue de ce tenseur. Le tenseur ainsi obtenu est donc de divergence nulle par construction.

Cette section clôt l'étude du troisième et dernier exemple de ce manuscrit. On se propose maintenant de conclure cette seconde partie de la thèse.

14

Discussion et perspectives

On a pu voir avec le traitement de ces trois exemples que les outils analytiques introduits dans les chapitres 9 et 10 sont à la fois complémentaires et très performants pour identifier et classifier les liquides de spin classiques. L'outil clé pour analyser un hamiltonien sur plaquette (10.1) est le vecteur de contrainte, transformée de Fourier du spin total par plaquette. Il s'avère d'une part être l'élément constitutif de la matrice de couplage dans le contexte de l'approximation de Luttinger Tisza, et définit ainsi le nombre de bande plate et la structure des bandes dispersives. Il permet aussi de construire et de calculer le facteur de structure à température nulle en explicitant la contrainte structurelle qui pèse sur les états fondamentaux d'un hamiltonien sur plaquette. Cet outil est remarquablement performant puisqu'il nécessite peu de calculs analytiques et numériques, et permet ainsi de caractériser rapidement les liquides de spin classiques émergeant grâce à un hamiltonien sur plaquette. On a en effet pu voir que les études combinées de la structure de bande et du facteur de structure à température nulle obtenus à partir du vecteur de contrainte permettent d'identifier la position et la nature des points de pincement. L'analyse du facteur de structure permet d'identifier rapidement la structure et ainsi la nature des points de pincement, quand l'étude de la dispersion locale des points de contact correspondants apporte un éclairage complémentaire, permettant notamment d'identifier rapidement quelle est la structure tensorielle de la théorie effective décrivant la physique des basses énergies. L'efficacité de ces deux analyses a pu être confrontée aux résultats de simulations de Monte Carlo, ce qui a révélé que l'étude des propriétés du vecteur de contrainte permet de caractériser parfaitement un liquide de spin classique tant qu'il n'y a pas de phénomène d'ordre par le désordre entrant en jeu.

Les trois exemples traités offrent un panorama très riche des situations que l'on peut rencontrer lors de l'étude des liquides de spin classiques à deux dimensions. Le premier exemple traité, le damier, se révèle héberger des liquides de spin possédant des corrélations dipolaires quelque soit le point du diagramme de phase dans lequel on se situe. On a notamment pu identifier un champ vectoriel effectif suivant une loi de Gauss et expliquant l'existence de corrélations dipolaires. Cet exemple n'a montré aucun signe

de présence de phénomènes d'ordre par le désordre. Le second exemple traité, où le réseau est un réseau de kagomé vu comme composé de triangles, s'avère héberger lui aussi un liquide de spin à longue portée en tout point du diagramme de phase¹. Cette observation est confirmée par la possibilité de construire un champ vectoriel satisfaisant une loi de Gauss en tout point du diagramme de phase, impliquant des corrélations dipolaires entre les spins du système. Ce second exemple diffère cependant du premier car dans son cas la physique à très basse température est impactée par un phénomène d'ordre par le désordre pour une bonne partie des paramètres explorés. Une étude plus approfondie de la structure de l'état fondamental et des modes de déformation associés permettrait de mieux comprendre la manière dont ce phénomène entre en jeu. Il est cependant extrêmement peu probable que l'on puisse caractériser l'ensemble des configurations de l'état fondamental pour des paramètres γ et δ quelconques, ni identifier les modes de déformation de ces configurations, ce qui serait nécessaire pour comprendre pourquoi pour un point donné de l'espace des paramètres on assiste à la sélection d'un sous ensemble de configurations de l'état fondamental. Cela n'empêche pas que cette analyse puisse être réalisée pour quelques couples particuliers de paramètres (γ, δ) dans de futures études.

Le dernier exemple traité se révèle quant à lui très différent des autres puisque dans ce cas la majorité du diagramme de phase est occupée par des liquides de spin de courte portée. On peut identifier quatre phases de ce type, séparées par trois points critiques pour lesquels les liquides de spin émergeant présentent des corrélations dipolaires. Ces trois liquides de spin à longue portée ont pu être caractérisés d'une part par la présence de point de pincement dans leur facteur de structure, et par l'existence d'un champ vectoriel satisfaisant une loi de Gauss pour deux d'entre eux. Le fait que pour tous les liquides de spin à longue portée observés dans ces trois exemples on ait pu construire un champ vectoriel satisfaisant une telle loi, excepté pour ce cas particulier, nous amène à penser qu'il existe aussi une construction pour ce cas, même si nous n'avons pas été capables de la trouver.

On a pu explorer dans ce manuscrit deux exemples pour lesquels il existe un unique type de plaquette et donc un seul vecteur de contrainte, ainsi qu'un cas où il existe deux types de plaquettes reliées par une opération de symétrie centrale, correspondant ainsi à l'existence de deux vecteurs de contrainte conjugués complexes l'un de l'autre. Il serait légitime de compléter cette étude par le cas plus général où il existe plusieurs vecteurs de contrainte, qui ne sont pas conjugués complexe les uns des autres. On pourrait par exemple se pencher sur le cas du réseau rubis, présenté sur la figure 14.1 a), qui est composé de plaquettes carrées se touchant par les coins. Ce réseau comporte trois types de plaquettes carrées, qui sont identiques à une rotation d'angle $2\pi/3$ près. On aura donc dans ce cas trois vecteurs de contrainte distincts, présentant ainsi une

1. Excepté en un unique point $(\gamma, \delta) = (1/2, 1/2)$ qui se révèle correspondre à un liquide de spin à courte portée à cause d'un phénomène d'ordre par le désordre.

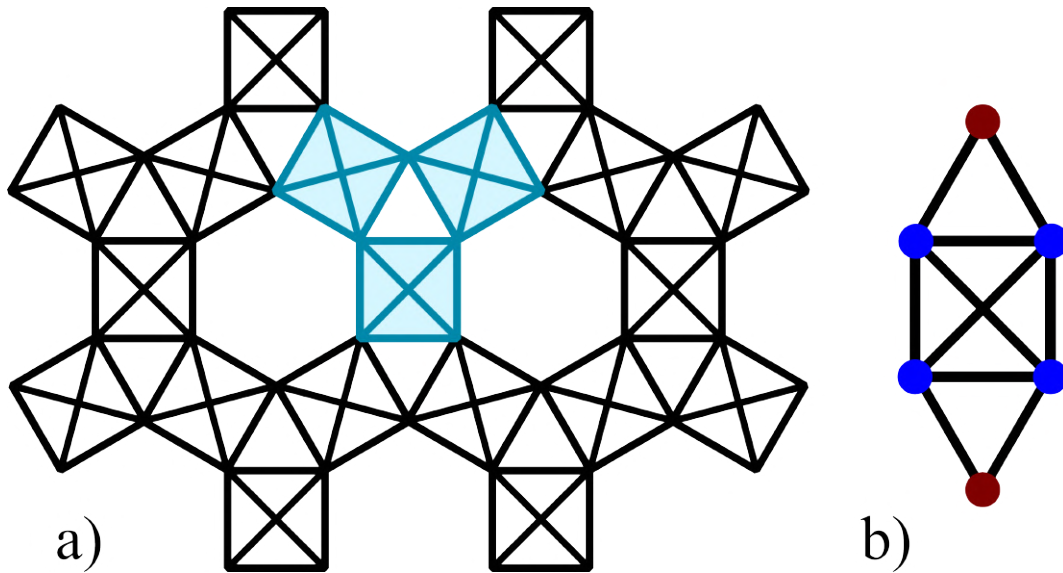


FIGURE 14.1 – a) Réseau rubis, pouvant être vu comme composé de groupes de quatre spins se touchant par les coins. Les trois types de plaquettes élémentaires, présentées en bleu, sont toute trois des carrés de même dimension, mais dont les orientations varient de l'une à l'autre d'un angle $2\pi/3$. Un tel réseau va donc correspondre à l'existence de trois contraintes sur plaquette différentes, chacune associée à un vecteur de de contrainte. Ce réseau comporte 6 sous réseaux élémentaires. b) Extension naturelle des plaquettes élémentaires, en comptant les spins premiers voisins, représentés en rouge, avec un coefficient γ dans le calcul du spin total de chaque plaquette.

configuration qui n'a pas été traitée dans ce manuscrit. On peut de plus noter que ce réseau comporte six sous réseaux, impliquant que les vecteurs de contrainte seront des vecteurs à six composantes complexes, l'analyse sera donc sans doute plus lourde à mener que dans le cas des trois exemples présentés dans ce manuscrit. Ce réseau pourra être généralisé de la même manière que ceux traités jusqu'ici, en prenant par exemple en compte les deux plus proches voisins de chaque plaquette carrée dans le calcul du spin total \mathcal{S} de cette plaquette, voir figure 14.1 b).

Les outils analytiques et numériques utilisés dans le traitement des trois exemples de ce manuscrit ont été appliqués à des systèmes bidimensionnels, mais ils sont tout à fait applicables à des cas tridimensionnels. L'étude de systèmes tridimensionnels pourrait ainsi permettre d'accéder à des nouvelles phénoménologies de généraliser certains résultats obtenus à deux dimensions. On pourra notamment se pencher sur la version tridimensionnelle du damier, le fameux réseau du pyrochlore, représenté sur la figure 14.2 a). Ce réseau constitue l'exemple le plus simple de groupes de spins tridimensionnels se touchant par des sommets, puisque ses constituants élémentaires sont des tétraèdres, ces derniers étant les solides les plus simples d'un point de vue géométrique. On peut aussi penser au cas d'un réseau qui serait constitué de cubes, comme repré-

senté sur la figure 14.2 b), ce dernier étant le second réseau tridimensionnel composé de groupes de spins le plus simple auquel on puisse penser. On peut noter que dans ce cas simple en apparence, chaque spin interagit avec ses 14 plus proches voisins, impliquant déjà une complexité de traitement conséquente.

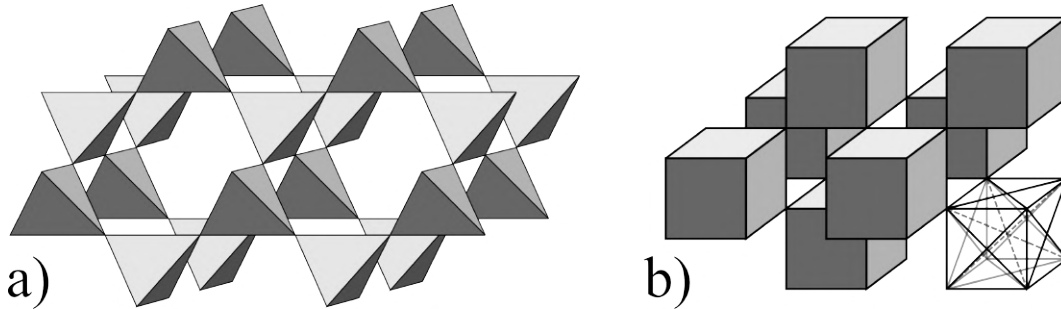


FIGURE 14.2 – a) Réseau du pyrochlore, constitué de tétraèdres se touchant par les coins. Chaque groupe de spin est donc constitué de quatre spin interagissant couplés entre eux, chacun de ces spins étant partagé par deux tétraèdres. b) Réseau constitué de groupes de spins cubiques se touchant par les coins. Chaque spin appartient à deux cubes, et interagit avec les 7 autres spins qui composent chacun de ces deux cubes.

On peut émettre la critique que les réseaux traités ici correspondent à des réseaux réels (carré, kagomé) pour lesquels on aurait pu faire un réglage fin des constantes de couplages, de sorte à ce que le hamiltonien du système puisse se réécrire sous la forme d'une somme sur des plaquettes de spin. Ces situations sont donc très éloignées de ce qu'un expérimentateur pourrait produire ou rencontrer avec de vrais matériaux. Le but de cette étude n'est pas néanmoins de prédire ou introduire de nouveaux prototypes de système réels pouvant abriter des liquides de spin classiques, mais plutôt de présenter une zoologie, la plus complète possible, des liquides de spin pouvant être émulsés avec un hamiltonien ayant une structure analytiquement simple.

Bibliographie

- [1] J. T. Chalker, “Spin liquids and frustrated magnetism,” *Topological Aspects of Condensed Matter Physics*, edited by C. Chamon, GM O., MR, and CLF, pp. 123–162, 2017.
- [2] J. Knolle and R. Moessner, “A field guide to spin liquids,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 10, no. 1, pp. 451–472, 2019.
- [3] Y. Zhou, K. Kanoda, and T.-K. Ng, “Quantum spin liquid states,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 89, p. 025003, Apr 2017.
- [4] C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, *Introduction to Frustrated Magnetism : Materials, Experiments, Theory*. Springer Series in Solid-State Sciences, Springer Berlin Heidelberg, 2011.
- [5] J. Villain, R. Bidaux, J.-P. Carton, and R. Conte, “Order as an effect of disorder,” *Journal de Physique*, vol. 41, no. 11, pp. 1263–1272, 1980.
- [6] J. T. Chalker, P. C. W. Holdsworth, and E. F. Shender, “Hidden order in a frustrated system : Properties of the heisenberg kagomé antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 68, pp. 855–858, Feb 1992.
- [7] T. Kaplan and N. Menyuk, “Spin ordering in three-dimensional crystals with strong competing exchange interactions,” *Philosophical Magazine*, vol. 87, no. 25, pp. 3711–3785, 2007.
- [8] I. Kimchi and A. Vishwanath, “Kitaev-heisenberg models for iridates on the triangular, hyperkagome, kagome, fcc, and pyrochlore lattices,” *Phys. Rev. B*, vol. 89, p. 014414, Jan 2014.
- [9] C. L. Henley, “Power-law spin correlations in pyrochlore antiferromagnets,” *Phys. Rev. B*, vol. 71, p. 014424, Jan 2005.
- [10] C. L. Henley, “The “coulomb phase” in frustrated systems,” *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, vol. 1, no. 1, pp. 179–210, 2010.
- [11] A. Prem, S. Vijay, Y.-Z. Chou, M. Pretko, and R. M. Nandkishore, “Pinch point singularities of tensor spin liquids,” *Phys. Rev. B*, vol. 98, p. 165140, Oct 2018.
- [12] O. Benton and R. Moessner, “Topological route to new and unusual coulomb spin liquids,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 127, p. 107202, Sep 2021.
- [13] J. Rehn, A. Sen, K. Damle, and R. Moessner, “Classical spin liquid on the maximally frustrated honeycomb lattice,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 117, p. 167201, Oct 2016.

- [14] M. Pretko, “Subdimensional particle structure of higher rank $u(1)$ spin liquids,” *Phys. Rev. B*, vol. 95, p. 115139, Mar 2017.
- [15] M. Pretko, “Generalized electromagnetism of subdimensional particles : A spin liquid story,” *Phys. Rev. B*, vol. 96, p. 035119, Jul 2017.
- [16] H. Yan, R. Pohle, and N. Shannon, “Half moons are pinch points with dispersion,” *Phys. Rev. B*, vol. 98, p. 140402, Oct 2018.
- [17] B. Canals and D. Garanin, “Classical spin liquid properties of the infinite-component spin vector model on a fully frustrated two dimensional lattice,” *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, vol. 26, no. 4, pp. 439–447, 2002.
- [18] R. M. Hornreich, M. Luban, and S. Shtrikman, “Critical behavior at the onset of \vec{k} -space instability on the λ line,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 35, pp. 1678–1681, Dec 1975.
- [19] H. Yan, O. Benton, L. D. C. Jaubert, and N. Shannon, “Rank-2 $u(1)$ spin liquid on the breathing pyrochlore lattice,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 124, p. 127203, Mar 2020.
- [20] O. Benton, L. D. C. Jaubert, H. Yan, and N. Shannon, “A spin-liquid with pinch-line singularities on the pyrochlore lattice,” *Nature Communications*, vol. 7, no. 1, p. 11572, 2016.
- [21] N. Niggemann, Y. Iqbal, and J. Reuther, “Quantum effects on unconventional pinch point singularities,” *arXiv preprint arXiv :2212.01318*, 2022.
- [22] J. T. Chalker, P. C. W. Holdsworth, and E. F. Shender, “Hidden order in a frustrated system : Properties of the heisenberg kagomé antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 68, pp. 855–858, Feb 1992.
- [23] M. E. Zhitomirsky, “Field-induced transitions in a kagomé antiferromagnet,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 88, p. 057204, Jan 2002.
- [24] M. E. Zhitomirsky, “Octupolar ordering of classical kagome antiferromagnets in two and three dimensions,” *Phys. Rev. B*, vol. 78, p. 094423, Sep 2008.
- [25] J. Rehn, A. Sen, and R. Moessner, “Fractionalized F_2 classical heisenberg spin liquids,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 118, p. 047201, Jan 2017.

Résumé

On s'intéresse dans ce manuscrit à deux sujets distincts, ayant tout de même pour points communs le fait que ces sujets parlent de magnétisme et de topologie, et qu'on les traite tout deux quasiment exclusivement de manière analytique.

Le premier sujet porte sur l'étude du comportement d'un électron au sein d'un matériau bidimensionnel hébergeant un ordre antiferromagnétique de Néel. On s'intéresse plus particulièrement au cas où ce matériau est habillé par un défaut bien particulier appelé skyrmion, portant intrinsèquement une charge topologique. L'étude se porte ainsi sur l'interaction de l'électron considéré avec le skyrmion, le cas d'un matériau ferromagnétique ayant déjà été étudié et ayant révélé que l'électron est diffusé par le skyrmion, et que cette diffusion dépend de l'orientation du spin de l'électron et de la charge topologique du skyrmion. Le cas antiferromagnétique se révèle ici plus riche, puisqu'on assiste certes à une potentielle diffusion de l'électron par le skyrmion impliquant là encore le spin de l'électron, mais aussi la possibilité de l'existence d'états liés électron-skyrmions. On montre notamment que la structure spatiale, l'énergie et l'existence de tels états liés dépend du profil du skyrmion considéré. On commencera par la construction d'une description quantique de l'interaction électron-skyrmion, avant de l'appliquer à différents profils pertinents, afin d'illustrer les différentes conséquences physiques de cette interaction. Il apparaît que le nombre d'états liés existants croît avec l'extension spatiale du skyrmion, et que la structure spatiale et énergétique de ces états dépend très fortement du profil du skyrmion étudié. Contrairement à ce que pourrait suggérer l'intuition, de l'existence de ces états liés résulte un coût d'énergie global pour le skyrmion et non un gain. Ce coût énergétique se révèle lui aussi dépendre fortement de la structure spatiale du skyrmion, et favorisera donc certains profils de skyrmions au détriment d'autres. Il apparaît aussi que l'appariement d'un skyrmion avec des électrons modifie les propriétés d'absorption optique localement autour du skyrmion, permettant une potentielle détection des skyrmions antiferromagnétique grâce à cette propriété, reposant sur l'interaction avec les électrons.

Le second sujet porte quant à lui sur les liquides de spin classiques, état de la matière ayant des propriétés très particulières et ayant attiré beaucoup d'attention pendant ces dernières années. On s'intéresse en particulier à une famille de hamiltoniens, ayant la particularité d'être définis sur des groupes de spin, et susceptibles d'abriter de tels états. On se concentre sur différentes méthodes d'analyses analytiques et numériques permettant d'identifier et de caractériser les différents liquides de spin classiques obtenus avec cette famille. Ces méthodes sont appliquées à trois hamiltoniens différents, permettant d'illustrer d'une part l'efficacité de ces outils d'analyse, et d'autre part la richesse des liquides de spin engendrés par cette famille de hamiltoniens. Certaines caractéristiques spécifiques des liquides de spin observés sont étudiées en détail, faisant ainsi office de cas d'études pour ces cas inédits.