

THÈSE de DOCTORAT de l'UNIVERSITÉ PARIS 6

Spécialité

PHYSIQUE THÉORIQUE

présentée par **Grégoire MISGUICH**

pour obtenir le titre de **DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS 6**

Modèle d'échange multiple sur le réseau triangulaire :
Liquide de spins quantiques en deux dimensions et
magnétisme des films d'³He solide

soutenue le 21 juin 1999 devant le jury composé de

Mme Claire LHUILLIER	LPTL, Paris	Directeur de thèse
M. Thierry JOLICŒUR	SPhT, CEA Saclay	Rapporteur
M. Timothy ZIMAN	ILL, Grenoble	Rapporteur
M. Benoît DOUÇOT	LP THE, Paris	Examineur
M. Henri GODFRIN	CRTBT, Grenoble	Examineur
M. Michel ROGER	SPEC, CEA Saclay	Examineur
M. Subir SACHDEV	Yale University, USA	Examineur extérieur

Remerciements

Je remercie Claire Lhuillier de m'avoir accueilli au Laboratoire de Physique Théorique des Liquides et d'avoir encadré cette thèse avec talent. J'ai beaucoup apprécié de travailler avec toi, tu m'as beaucoup appris. Ton aide, tes conseils et ta disponibilité furent d'une grande valeur.

Thierry Jolicœur et Tim Ziman ont accepté la charge d'être rapporteurs de ce travail. Votre temps est précieux et je vous remercie d'en avoir consacré une partie à la lecture du manuscrit. Thierry, je te suis reconnaissant pour ce que les Houches et ton cours à l'institut H. Poincaré m'ont apporté, et, d'avance, pour tout ce que j'apprendrai à Saclay.

Benoît Douçot, Henri Godfrin et Michel Roger et Subir Sachdev ont bien voulu être les examinateurs de ce travail. Je vous remercie pour toutes les discussions que nous avons eues, à Paris, Trieste, Grenoble, Saclay ou ailleurs.

Un grand merci à Bernard Bernu, Laurent Pierre et Philippe Sindzingre. Sans votre aide, peu de choses dans cette thèse auraient été possibles. J'ai eu beaucoup de plaisir à travailler avec vous. Je veux aussi remercier Antoine Georges. Travailler avec toi m'a beaucoup apporté, merci pour tes conseils aussi.

Jean-Claude Leicknam, Michel Quaggetto et Pascal Viot, vous m'avez souvent dépanné ou conseillé. Merci pour vos coups de main, et tout le reste bien sûr. Merci aussi à Christian Waldtmann, je garde un bon souvenir de mon passage à Hanovre.

Olivier Benichou, Jean-Baptiste Fouet, Sylvain Grollau, Mathieu Grousson, Sébastien Phan, Ludovic Pricoupenko, Jean-Marc Sixdeniers, Mathias Van Den Bossche, Gilles Vincent et Rodolphe Vuilleumier, chers homologues et compagnons de route. Je vous remercie pour les moments passés ensemble. J'adresse une pensée particulière à celles et ceux dont j'ai partagé, avec joie, le bureau et la bonne humeur. Puis, que tous les membres du LPTL reçoivent l'expression de ma profonde sympathie, c'est grâce à vous que ces trois années furent si agréables, je vous dois donc énormément.

Enfin et surtout, je remercie mes parents, mes grands-parents, Adélaïde et Fabienne. Vous savez pourquoi.

Table des matières

Introduction	1
1 Modèle d'échange multiple	5
1.1 L'échange comme hamiltonien effectif	5
1.2 Échange multiple dans l' ³ He sur le graphite	8
1.3 Diagramme de phases classique	11
1.3.1 Décomposition des permutations	11
1.3.2 Minimisation de l'énergie d'une hélice plane	13
2 Bosons de Schwinger	17
2.1 Idée générale	17
2.1.1 Représentation de l'algèbre des spins	17
2.1.2 Symétries et invariance de jauge	18
2.1.3 Champ moyen	19
2.2 Équations d'auto-cohérence	20
2.2.1 Hypothèses	20
2.2.2 Diagonalisation de l'hamiltonien	21
2.2.3 Équations d'auto-cohérence à $T = 0$	23
2.2.4 Cas réel $\mathcal{B}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$	24
2.3 Bosons de Schwinger pour l'échange multiple	25
2.3.1 Découplage	25
2.3.2 Équations d'auto-cohérence à $T = 0$	26
Critère de stabilité de l'état ferromagnétique	26
2.3.3 L'algorithme	27
2.3.4 Résultats	29
Différents ordres de Néel	29
Paramètre d'ordre	29
Excitations	33
2.3.5 Spin critique $S_c < \frac{1}{2}$	34
2.3.6 Solution désordonnée pour $S = \frac{1}{2}$?	36

2.4	Conclusions	37
3	Diagonalisations exactes et diagramme de phases	39
3.1	La méthode	39
3.1.1	Algorithme de Lanczös	39
	Erreurs d'arrondis	41
3.1.2	Nombres quantiques	41
	Nombres quantiques spatiaux	42
	Spin total	42
3.2	Ferromagnétisme ou spin nul	42
	La deuxième couche d' ³ He	43
3.3	Antiferromagnétisme - Tour des états d'ANDERSON	46
4	Absence d'ordre à longue distance	51
4.1	Absence de tour des états	51
4.1.1	Conditions aux bords périodiques	51
4.1.2	Conditions aux bords tournées	56
4.2	Corrélations à T=0 ($J_2/J_4 = -2$)	58
4.2.1	Corrélations spin-spin	58
4.2.2	Corrélations dimère-dimère	61
	Définition de la fonction de corrélation	61
	Ordre local à $\pm\frac{\pi}{3}$	61
	Décroissance des corrélations	63
4.2.3	Corrélations chirales : $\langle \text{Im}(P_{i,j,k})\text{Im}(P_{i',j',k'}) \rangle$	64
	Ordre chiral à température finie dans le modèle classique	64
	Fluctuations locales	64
	Ordre chiral quantique	65
4.3	Gap de spin	67
4.3.1	Effets de taille finie sur l'énergie du fondamental	67
4.3.2	Gap de spin	68
	Remarque sur le spectre $N = 36$	69
5	Structure locale de la fonction d'onde	73
5.1	Liaisons fortes	73
5.1.1	Spectres de très petits systèmes	74
5.1.2	Triangles à six spins $S = 0$	74
5.2	Moment magnétique local	80
5.3	Losanges $S = 1$	82
5.4	État "valence-bond solid" variationnel	84

5.4.1	Construction	84
5.4.2	Énergie	85
6	Physique de basse énergie	87
6.1	Symétrie du fondamental	87
6.1.1	Premiers états singulets	89
6.1.2	Pas de brisure de symétrie “spin-Peierls”	91
6.1.3	Dégénérescence topologique	93
	Dimères et boucles	93
	Hypothèse des petites boucles	94
	Coupure sur le tore et dégénérescence quatre	95
	Interprétation topologique du spectre $N = 36$	96
6.1.4	Liquide de spins chiral ?	96
6.1.5	État VBS	98
6.2	Excitations élémentaires	100
6.2.1	Spinons dans les liquides de spins	100
6.2.2	Relations de dispersion	102
6.2.3	Excitations de spin 1 ou de spin $\frac{1}{2}$?	102
7	Champ magnétique extérieur	107
7.1	Généralités sur les plateaux d’aimantation	108
7.1.1	Réponse magnétique et spectre à champ nul	108
	Ordre de Néel	108
	Plateaux et métamagnétisme	109
7.1.2	Spins classiques : condition de colinéarité	111
	État non colinéaire	111
	État colinéaire	111
	État colinéaire d’aimantation nulle	112
7.1.3	Plateaux pour des spins quantiques	113
	Plateau quantique à $m = 0$ et gap de spin	113
	Condition d’OSHIKAWA	114
	Colinéarité dans le cas quantique	115
7.2	Aimantation du modèle d’échange multiple	116
7.2.1	Plateau à $m = \frac{1}{2}$	116
7.2.2	État uuud	118
	Losanges de spin 1	119
7.2.3	Comparaison classique/quantique	119
7.2.4	Physique à champ faible	122
7.3	Conclusions	123

8	Thermodynamique et résultats expérimentaux	125
8.1	Chaleur spécifique	126
8.1.1	Données expérimentales	126
8.1.2	Chaleur spécifique par les diagonalisations exactes	126
	Effets de taille	127
	Bosse de basse température	128
	Excitations de basse température	130
8.2	Transition de phase sous champ magnétique	131
8.3	Fréquences d'échange $^3\text{He}/^4\text{He}$ /graphite	133
8.3.1	Aimantation	134
8.3.2	$\chi(T)$ et $C_v(T)$	135
	Conclusions	141
	Annexes	145
A	Théorie des groupes dans une tour des états	145
B	Hamiltoniens de Klein : fondamentaux exacts	148
C	Dégénérescence topologique sur un tore	150
C.1	Pavages de dimères	150
C.2	Produit scalaire $\langle C C' \rangle$: diagrammes de boucles	151
C.3	Hypothèse de décroissance du poids des grandes boucles	152
C.4	Composante "paire" et composante "impaire"	153
C.5	Orthogonalité des composantes paires et impaires	153
C.6	Impulsion	154
C.7	Action d'une permutation cyclique sur les boucles	155
C.8	Conclusion	155
D	Méthode des traces pour la thermodynamique	157
D.1	Idée générale	157
D.2	Maximum d'entropie	159
D.3	Trace de H^n dans une représentation irréductible	162
	Bibliographie	165
	Publications	175

Table des figures

1.1	L'abaissement des barrières d'énergie qui séparent les cavités dans l'espace des phases lève la dégénérescence $N!$ du fondamental.	6
1.2	Les énergies constituant la bande la plus basse sont reproduites par un hamiltonien effectif de saut.	7
1.3	Diagramme de phases classique dans l'approximation des hélices planes . .	14
1.4	Énergies classiques pour l'hamiltonien J_2/J_4	15
1.5	Première zone de Brillouin du réseau triangulaire	15
2.1	$\ \vec{S}(\mathbf{q})\ ^2$ pour $J_2/J_4 = 4$ et $N = 432$	30
2.2	Facteur de structure à $J_2/J_4 = 2$, $N = 432$	30
2.3	Corrélation $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ à $J_2/J_4 = 2$, $N = 432$	31
2.4	$\ \vec{S}(\mathbf{q})\ ^2$ en fonction de \mathbf{q} pour $J_2/J_4 = -2$, $N = 192$. État de Néel colinéaire à deux sous-réseaux. On distingue aussi deux maxima au voisinage de $\mathbf{q} = \pm \frac{1}{2}\mathbf{B}$ qui renseignent sur la période des corrélations locales.	31
2.5	Paramètre d'ordre et énergie par site à $J_2/J_4 = -1$ en fonction de la taille du système : $N = 48, 64, 112, 144, 192$ et 1732	32
2.6	Paramètre d'ordre $\ \vec{S}(\mathbf{q})\ $ en fonction de J_2/J_4 pour $J_5 = 0$	33
2.7	Spectre $\omega(\mathbf{q})$ pour $N = 1732$ et $J_2/J_4 = -1$	35
2.8	$\ \vec{S}(\mathbf{A})\ ^2$ en fonction du spin S . $J_2/J_4 = -2$ et $N = 432$	36
2.9	Corrélation $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ en fonction de la distance $ j - i $ pour un spin $S = 0.15$: ordre à courte portée ($J_2/J_4 = -2$, $N = 432$).	37
3.1	Ligne de transition à $T = 0$ entre ferromagnétisme et une phase où le fondamental est de spin $S = 0$	44
3.2	Spectres $N = 16$ pour $J_2/J_4 = -2$ et $J_5/J_4 = 0.5, 0.35, 0.25$ et 0.20	45
3.3	États de Néel à 2 et 3 sous-réseaux	48
3.4	Spectre avec tour des états, modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau triangulaire ($N = 16$)	49
4.1	Spectre sans tour des états $J_2 = -2$, $J_4 = 1$, $N = 24$	52
4.2	Proposition de diagramme de phases du modèle d'échange multiple $J_2 - J_4 - J_5$ sur le réseau triangulaire	53

4.3	Spectre du modèle d'Heisenberg antiferromagnétique ($N = 27$)	54
4.4	Spectre du modèle d'Heisenberg perturbé par de l'échange à quatre corps $J_4/J_2 = 0.1$ ($N = 27$)	55
4.5	Spectre avec les conditions aux bords tournées qui minimisent l'énergie du fondamental pour $N = 19$ sites à $J_2/J_4 = -2$	57
4.6	Valeur absolue de la corrélation $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ à $J_2/J_4 = -2$ en fonction de la distance $ j - i $	59
4.7	Corrélations dimère-dimère dans le fondamental du modèle d'échange mul- tiple $J_2/J_4 = -2$, représentées sur le réseau $N = 28$	62
4.8	Corrélations dimère-dimère dans le fondamental du modèle d'échange mul- tiple $J_2/J_4 = -2$ en fonction de la distance pour $N = 16$ et 28	63
4.9	Corrélations chirales à $J_4 = 1$	66
4.10	Énergie par site et gap de spin pour $J_2 = -2$ et $J_4 = 1$ en fonction de $1/N$	70
4.11	Gap de spin et énergie par site pour $J_2 = -2$ et $J_4 = 1$	71
4.12	Gap de spin en fonction de l'énergie du fondamental à $J_2 = -2, J_4 = 1$. .	72
5.1	Spectre du triangle à 6 spins $J_2/J_4 = -2$	75
5.2	Spectre $J_2 = -2, J_4 = 1$ pour $N = 2 \times 3$	76
5.3	Spectre $J_2 = -2, J_4 = 1$ pour $N = 4$	76
5.4	Spectre $J_2 = -2, J_4 = 1$ pour $N = 8$	77
5.5	Spectre du modèle J_2, J_4 sur un triangle à 6 spins	78
5.6	Énergie d'un pavage de triangles pris chacun dans leur état fondamental libre	79
5.7	Gap d'un pavage de triangles	79
5.8	Écrantage des spins dans un fondamental ordonné et dans le modèle d'échange multiple ($J_2/J_4 = -2$)	81
5.9	État pavage de losanges de spin 1	83
5.10	Projection dans un sous-espace engendré par des losanges de spin 1	84
5.11	État VBS pour des spins $S = 2$ sur le réseau carré.	85
5.12	États "pseudo-VBS" sur le réseau triangulaire	86
6.1	Gap de spin et gap $\Delta S = 0$ vers le premier état d'impulsion $\mathbf{k} = \mathbf{A}$. $J_2 = -2$, $J_4 = 1$ et $N = 20, 24, 28, 30, 36$	91
6.2	État dimérisé le plus simple sur le réseau triangulaire	92
6.3	Un état dimérisé du réseau triangulaire	92
6.4	Analogie entre un changement de phase le long d'une coupure enroulée sur le tore (Δ) et l'insertion d'un $\frac{1}{2}$ quantum de flux	96
6.5	Premiers états du spectre $N = 36$ à $J_2 = -2, J_4 = 1$	97
6.6	Dispersion des états $S = 1$ et $S = 0$ pour $N = 16, 28$ à $J_2/J_4 = -2$	103
6.7	Dispersion des états $S = 1$ et $S = 0$ pour $N = 30, 24$ à $J_2/J_4 = -2$	104

6.8	Énergie de liaison de 2 spinons, évaluée à partir des énergies des tailles N et $N \pm 1$ ($J_2/J_4 = -2$).	105
7.1	Réponse magnétique d'un spectre $e(m) \sim m^2$.	109
7.2	Plateau d'aimantation à $m = 0$ et $e(m)$ linéaire en $m = 0$.	110
7.3	$e(m)$ typique pour un plateau d'aimantation	110
7.4	Transition métamagnétique associée à une concavité de $e(m)$.	110
7.5	$e(m)$ et $m(B)$ pour $J_2 = -2$ et $J_4 = 1$	117
7.6	$m(B)$ pour $J_2 = -2, J_4 = 1, J_5 = 0.2, J_6 = 0.08$	117
7.7	État $uuud$ à quatre sous-réseaux	118
7.8	Spectre $N = 28, J_2 = -2, J_4 = 1$ pour $S = 4, \dots, 9$	120
7.9	$e(m)$ et $m(B)$ dans les cas classique (traits fins) et quantique (épais) au voisinage de $J_2 = -2, J_4 = 1$.	121
7.10	$e(m)$ et $m(B)$ quantiques au voisinage de $J_2 = -2, J_4 = 1$: éventualité d'un plateau $m = 0$ plus petit que le gap	122
8.1	Chaleur spécifique expérimentale de la seconde couche d' ^3He adsorbée sur du graphite mesurée par ISHIDA <i>et al.</i> [65].	127
8.2	Chaleurs spécifiques $N = 16, 20$ et 24 pour $J_2/J_4 = -2, J_5/J_4 = 0.2$ et $J_6/J_4 = 0.08$	129
8.3	Chaleur spécifique $N = 20$ pour $J_2/J_4 = -1.6, J_5/J_4 = 0.3, J_6/J_4 = 0.5$	129
8.4	Chaleurs spécifiques sous champ magnétique pour $N = 16, 20$ et 24 à $J_2/J_4 = -2$	132
8.5	Aimantation en fonction de la température à $B=113\text{mT}$: données expérimentales de BÄUERLE <i>et al.</i> [13,14] et calculs de taille finie	136
8.6	Aimantation à $T = 0$ pour $N = 16, 20$ et 24 . $J_2 = -2.72\text{mK}, J_4 = 1.42\text{mK}, J_5 = 0.497\text{mK}$ et $J_6 = 1.92\text{mK}$	137
8.7	Chaleurs spécifiques pour $N = 20$ et 24 comparées avec les séries et Padé haute température	138
8.8	Susceptibilités pour $N = 20$ et 24 comparées avec les séries et Padé haute température	138
8.9	Spectre pour $N = 24, J_2 = -2.72\text{mK}, J_4 = 1.42\text{mK}, J_5 = 0.497\text{mK}$ et $J_6 = 1.92\text{mK}$	139
B.1	Réseau triangulaire avec un site sur sept manquant	149
D.1	Densité d'état dans une représentation irréductible d'un système à 20 sites	158
D.2	$C_v(T)$ calculés à partir de spectres $N = 20$ et 24 à $J_2/J_4 = -2$.	160
D.3	Chaleurs spécifiques exacte et approchée par la méthode des traces pour le modèle d'Heisenberg sur le réseau kagome ($N = 18$)	160

Liste des tableaux

1.1	Fréquences d'échange (en mK) dans une monocouche d' ^3He solide adsorbé sur du graphite. Simulations Monte-Carlo de BERNU et CEPERLEY [16]. . .	9
1.2	Processus d'échange dominants dans les films d' ^3He et énergies associées BÄUERLE <i>et al.</i> [14]	10
1.3	Constantes d'échange (en mK) fonction de la densité. ROGER <i>et al.</i> [109] .	10
4.1	Corrélations $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ dans le fondamental du modèle d'échange multiple $J_2/J_4 = -2$	59
4.2	Corrélations chirales pour $J_2/J_4 = 0$ et $J_2/J_4 = -2$	65
5.1	Spectre d'un losange à 4 sites	75
6.1	Quelques théories de liquides de spins en deux dimensions sans brisure de symétrie spatiale	101
8.1	Gap de spin à taille finie pour l'hamiltonien $J_2 = -2.72\text{mK}$, $J_4 = 1.42\text{mK}$, $J_5 = 0.497\text{mK}$ et $J_6 = 1.92\text{mK}$. $J_{C_v} = 2\text{mK}$	135

Introduction

Les problèmes de magnétisme quantique en deux dimensions occupent une place importante parmi les enjeux actuels en théorie de la matière condensée. Les fluctuations de spins jouent un rôle incontournable dans les oxydes, et tout particulièrement dans les supraconducteurs à haute température critique, mais aussi dans les isolants de Mott en général : des matériaux magnéto-résistants à l' ^3He solide.

Le modèle abordé dans cette étude est celui de l'*échange multiple*, généralisation de l'hamiltonien d'Heisenberg à des processus d'échange impliquant simultanément plus de deux particules. Ces processus d'échanges se traduisent par un hamiltonien effectif de spins sur réseau qui est une somme d'opérateurs de permutations. Dans le langage des matrices de Pauli, les interactions ne contiennent pas seulement des termes à deux spins $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$, comme dans le modèle d'Heisenberg, mais aussi des termes à quatre, six spins et plus : $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)(\vec{S}_k \cdot \vec{S}_l)$, $(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)(\vec{S}_k \cdot \vec{S}_l)(\vec{S}_m \cdot \vec{S}_n)$. Pourquoi s'intéresser à des interactions si complexes ? Tout d'abord, les échanges à plus de deux particules sont naturellement engendrés dans les isolants magnétiques quand on intègre les degrés de liberté de charge. C'est par exemple le cas dans le modèle de Hubbard à demi remplissage et forte répulsion [84], et ce avec des amplitudes qui sont loin d'être négligeables devant les énergies des termes d'Heisenberg, dans les cuprates notamment [34, 111, 130].

Par ailleurs, une part importante de l'intérêt du modèle d'échange multiple provient de sa réalisation expérimentale dans l' ^3He solide. Le diagramme de phases magnétique de l' ^3He à trois dimensions est aujourd'hui compris dans le cadre du modèle d'échange multiple [36, 49, 113]. Dans ce solide quantique, les mouvements de point zéro des atomes sont tels que les échanges tunnel, où jusqu'à quatre atomes échangent leurs positions par permutation cyclique, sont fréquents. Ces échanges d'atomes dans l'espace réel se traduisent de manière effective, dans l'espace des degrés de libertés de spins, par les interactions à plusieurs spins évoquées plus haut. Il est maintenant de plus en plus clair que les mêmes processus d'échange multiple sont à l'œuvre dans l' ^3He *bidimensionnel*, réalisé expérimentalement en adsorbant une, deux ou trois couches atomiques sur un substrat de graphite [50]. L'abondance de propriétés exotiques liées à la frustration dans ce cristal fait du modèle d'échange multiple sur le réseau triangulaire un problème particulièrement riche.

Que sait-on de l'effet des interactions d'échange multiple sur des spins quantiques ? Si beaucoup de travaux traitent du modèle d'Heisenberg et de ses variantes sur plusieurs réseaux, beaucoup moins fréquentes sont les études qui s'intéressent aux interactions à plus de deux spins. Les résultats concernant la *nature du fondamental quantique* en présence d'échanges multiples, à quatre spins notamment, sont peu nombreux. Il s'agit d'approches de champ moyen et d'ondes de spins [113], de diagonalisations exactes ($N \leq 18$) sur le réseau carré [111] de calculs de "coupled-cluster approximation" [112] ou d'analyses de modèles unidimensionnels (par théorie des champs [96, 119] ou numériquement [23]). Enfin, plus récemment, des diagonalisations exactes ont été réalisées sur le réseau triangulaire [94]. Dans l'ensemble, il ressort des travaux en dimension un et deux que la frustration des interactions à quatre spins affecte profondément les solutions classiques ou de champ moyen, parfois au profit d'états sans ordre magnétique. L'espoir d'obtenir des phases quantiquement désordonnées à température nulle a été une motivation importante de ce travail, même si aucune donnée sur la nature des fondamentaux possibles sur le réseau triangulaire n'était alors disponible.

Par où aborder le problème ? Du point de vue des méthodes théoriques disponibles, la dimension deux est peut-être la situation la plus difficile. Alors qu'il existe différents outils analytiques pour traiter les problèmes quantiques en dimension un (ansatz de BETHE [21], bosonisation ou invariance conforme) et qu'en dimension supérieure ou égal à trois les méthodes de champ moyen sont souvent fiables, la dimension deux est plus problématique. En deux dimensions, les calculs d'ondes de spins permettent l'étude des systèmes ordonnés. Cependant, dans le cas de spins $\frac{1}{2}$ frustrés, il n'est pas rare que les fluctuations quantiques détruisent l'ordre de Néel à longue portée. Des théories de champ moyen (limites $N \rightarrow \infty$ des généralisations $SU(N)$ [6, 10] ou $Sp(N)$ [104] du modèle $SU(2)$) permettent d'aborder ces phases désordonnées mais leur mise en place peut être difficile quand l'hamiltonien possède des interactions à plus de deux spins. Numériquement aussi, la dimension deux est plus délicate que la dimension un où le "density matrix renormalization group" [145] permet d'étudier de grandes tailles. Quant à la frustration du modèle d'échange multiple, par le fameux problème de signe, elle limite fortement les simulations Monte-Carlo.

La plupart des résultats de ce travail ont été obtenus par *diagonalisations exactes*. Il s'agit de calculer numériquement les énergies et fonctions d'onde propres de systèmes de taille finie, par une méthode de type Lanczös associée à une analyse extensive des symétries de l'hamiltonien et des effets de taille. Cette technique s'est avérée puissante pour étudier l'effet de la frustration dans le contexte du modèle d'Heisenberg sur le réseau triangulaire [18]. Il semble qu'une des clés soit de ne pas limiter l'analyse aux calculs de la susceptibilité associée à chaque forme d'ordre envisagée, mais d'exploiter plus en profondeur l'information des spectres. L'étude des symétries des états de basse énergie, parce qu'elle permet d'aborder le problème crucial des brisures spontanées de symétrie, est une des données les plus importantes. Nous l'utilisons chaque fois que c'est utile et

possible.

Grâce aux diagonalisations exactes, nous montrons que le modèle d'échange multiple sur le réseau triangulaire possède une phase où les fluctuations quantiques détruisent l'ordre de Néel à température nulle. L'approche numérique permet d'aller assez loin dans la caractérisation de ce liquide de spins : depuis son ordre local à sa thermodynamique à température finie, en passant par les symétries de son fondamental ou le spin de ses excitations élémentaires. Parce qu'elle se trouve dans la zone de paramètres pertinente pour l' ^3He , et parce que la découverte d'un nouveau liquide de spins peut avoir des retombées sur d'autres problèmes de magnétisme quantique, c'est sur cette phase du modèle que nous avons concentré nos efforts.

L'organisation de ce mémoire est la suivante :

- Dans le premier chapitre nous présentons l'hamiltonien d'échange multiple et son origine microscopique dans le cadre de la théorie de THOULESS [135] et discutons brièvement l'application aux films d' ^3He .
- Au deuxième chapitre nous abordons une approche de champ moyen quantique pour traiter les spins en interaction, les bosons de Schwinger. Les chapitres suivants nous apprendront que cette théorie de champ moyen ne prend pas bien en compte les très importantes fluctuations quantiques engendrées par la frustration et les interactions à quatre spins.
- Troisième chapitre : Diagonalisations exactes et premier diagramme de phases. La technique et les grandes lignes du diagramme de phases à température nulle dans l'espace des paramètres J_n de l'hamiltonien sont présentées.
- Le quatrième chapitre explique en quoi l'analyse des spectres de taille finie montre que les fluctuations détruisent l'ordre de Néel dans la phase non ferromagnétique.
- Le cinquième chapitre est l'investigation des propriétés du fondamental dans la phase quantiquement désordonnée. La question centrale étant ici de déterminer à quelle famille de liquide de spins le modèle appartient, et en particulier de savoir s'il y a ou non brisure spontanée de symétrie spatiale à $T = 0$.
- Sixième chapitre : comportement du système dans un champ magnétique extérieur. Le rapport entre les énergies d'échange et l'énergie Zeeman¹ permet, dans l' ^3He solide bidimensionnel, d'explorer le diagramme de phase magnétique avec quelques Teslas. Cette question est donc d'un intérêt expérimental direct. Nous discutons l'existence de plateaux d'aimantation.
- Les propriétés du système à température finie sont étudiées au septième chapitre et nous présentons quelques comparaisons quantitatives avec des données expérimentales de chaleur spécifique et de susceptibilité des films d' ^3He .

¹Le moment magnétique de l' ^3He est de $\mu/k_B=1.556\text{mK/Telsa}$ et les échanges typiques, en deuxième couche solide à basse densité, sont de l'ordre du milli Kelvin.

Chapitre 1

Modèle d'échange multiple

Le rôle des processus d'échange à plus de deux particules est depuis longtemps reconnu dans l' ^3He solide tridimensionnel [113]. Plus récemment, les films solides d' ^3He ont aussi été l'objet de nombreuses études pour leurs propriétés magnétiques. Si les premières expériences de RMN sur de l' ^3He adsorbés remontent aux années 70, ce n'est qu'à partir de 1984 (FRANCO *et al.* [45, 46]) que l'existence d'échange magnétique nucléaire dans de l' ^3He 2D a pu être mis en évidence, à Grenoble, de manière définitive par les premières mesures de RMN au milli Kelvin.

Ce chapitre commence par un rappel des arguments de DIRAC et THOULESS [135] qui établissent la pertinence d'un hamiltonien d'échange, dont le prototype est celui d'Heisenberg, pour décrire de manière effective le magnétisme d'un système de fermions quasiment localisés. Nous présentons ensuite un diagramme de phases classique d'un modèle pour l' ^3He incluant des échanges jusqu'à six particules. Les effets quantiques, qui se révèlent capitaux dans ce système extrêmement frustré, font l'objet du chapitre suivant.

1.1 L'échange comme hamiltonien effectif

Introduit par DIRAC [38, 39] et HEISENBERG [58], l'hamiltonien d'échange est une description effective dans l'espace des spins de l'interaction entre fermions quasiment localisés. Nous présentons une explication succincte de la théorie de Thouless [135]. Le point de vue adopté ici est largement inspirée du travail de ROGER *et al.* [105, 113].

Partons d'un système de particules *discernables, sans spin*¹ mais identiques (*i.e* l'hamiltonien est invariant sous toute permutation P des coordonnées des particules $PH = HP$). Nous supposons que dans les états de basse énergie, ces particules sont quasiment localisées et se répartissent sur N sites d'un réseau et forment un cristal. Le problème est donc celui

¹C'est dans un deuxième temps que nous sélectionnerons dans le spectre les états propres qui sont les états physiques de fermions de spin $\frac{1}{2}$.

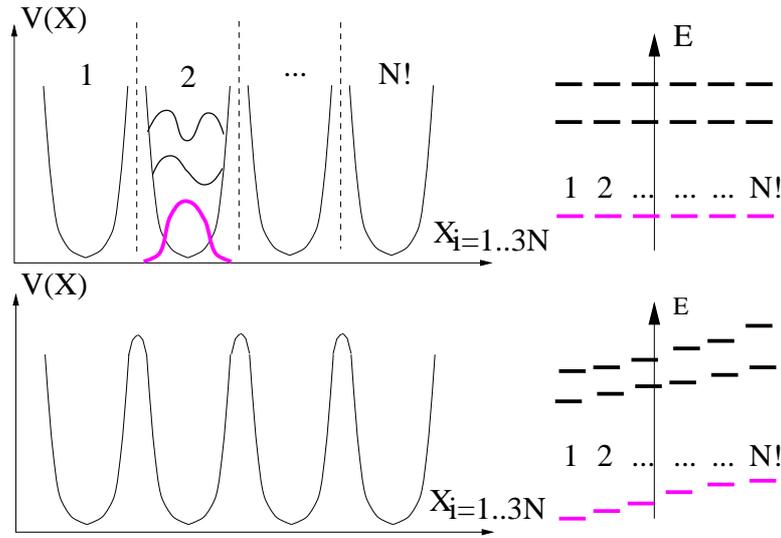


FIG. 1.1: L'abaissement des barrières d'énergie qui séparent les cavités dans l'espace des phases lève la dégénérescence $N!$ du fondamental.

d'une particule quantique fictive dans un espace de dimension $3N$, dont le potentiel possède $N!$ minima équivalents. Chaque minimum correspond à l'une des $N!$ façons de placer N particules discernables sur les N sites du réseau. Si les barrières d'énergie séparant ces $N!$ points de l'espace des phases étaient infinies, l'état fondamental serait $N!$ fois dégénéré. L'abaissement de ces barrières lève la dégénérescence en permettant à la particule fictive de passer d'une cavité à l'autre (Fig. 1.1).

Comme pour un électron dans un solide, on étudie la formation de la bande d'énergie la plus basse par un hamiltonien de saut (Fig. 1.2). Un saut du système d'une cavité à l'autre correspond donc à une permutation des coordonnées (d'espace) des N particules réelles :

$$H = - \sum_{P \in \sigma_N} J_P (P_{\text{espace}} + P_{\text{espace}}^{-1}) \quad (1.1)$$

L'hypothèse de quasi-localisation implique que les processus tunnel de saut d'une cavité à l'autre sont rares. Nous pouvons donc étudier de manière isolée, avec une bonne précision en énergie, un processus de saut particulier. Considérons les termes P et P^{-1} quand ils couplent les cavités $\omega, P\omega, \dots, P^{n-1}\omega$ (où n est l'ordre de la permutation P). Nous savons a priori que la fonction d'onde du fondamental n'a pas de nœuds², et donc qu'elle correspond à la combinaison uniforme $\omega + P\omega + \dots + P^{n-1}\omega$. Cet état doit donc minimiser l'énergie de $-J_P(P + P^{-1})$ et par conséquent $J_P > 0$.

L'indiscernabilité des fermions restreint l'espace de Hilbert aux produits antisymétriques $\mathcal{H}_{\text{fermions}} = \text{Antisym}[\mathcal{H}_{\text{espace}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}]$. Une fonction d'onde physique $|\Psi\rangle$ vérifie donc : $\forall P$

²On peut trouver une démonstration de ce théorème au chapitre 4 de la référence [87]

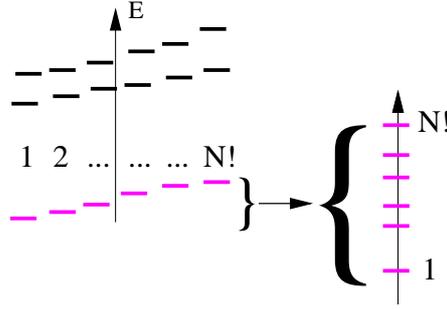


FIG. 1.2: Les énergies constituant la bande la plus basse sont reproduites par un hamiltonien effectif de saut.

$P_{\text{spin}}P_{\text{espace}}|\Psi\rangle = (-1)^{\text{sign}(P)}|\Psi\rangle$ où par définition $P_{\text{spin}} := (1 \otimes P)$ et $P_{\text{espace}} := (P \otimes 1)$. En faisant agir (1.1) sur $|\Psi\rangle$ nous trouvons donc :

$$\begin{aligned} H|\Psi\rangle &= -\sum_P J_P (P_{\text{espace}} + P_{\text{espace}}^{-1})|\Psi\rangle \\ &= -\sum_P (-1)^{\text{sign}(P)} J_P (P_{\text{spin}}^{-1} + P_{\text{spin}})|\Psi\rangle \end{aligned}$$

Nous en déduisons une écriture de H en termes d'opérateurs n'agissant que sur la partie spin de la fonction d'onde :

$$H_{\text{spin}} = -\sum_{P \in \sigma_N} (-1)^{\text{sign}(P)} J_P (P_{\text{spin}} + P_{\text{spin}}^{-1}) \quad (1.2)$$

C'est cette forme que l'on désigne par *hamiltonien d'échange multiple*. Il y a égalité *exacte* sur $\mathcal{H}_{\text{fermions}}$ entre les opérateurs (1.2) et (1.1). L'intérêt de la forme (1.2) est qu'elle permet de ne considérer qu'une partie des degrés de liberté, ceux de spin, en se plaçant dans $\mathcal{H}_{\text{spin}}$. Cet espace est de dimension plus faible que $\mathcal{H}_{\text{espace}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}$ et est en bijection avec $\mathcal{H}_{\text{fermions}}$ ³.

³Mathématiquement, voici comment s'opère cette bijection, et d'une manière générale le couplage entre fonctions d'onde de spin et d'espace. La construction explicite d'une base d'états antisymétriques simultanément vecteurs propres de H , \mathbf{S}^2 et S^z se fait en classant les états de spins et les fonctions propres d'espace $|\Phi_n\rangle$ en terme des représentations irréductibles (RI) du groupe des permutations σ_N auxquelles ils appartiennent. Nous décomposons l'espace des spins suivant les nombres quantiques \mathbf{S}^2 , S^z et $f = 1, \dots, f(S) : [D^{\frac{1}{2}}]^N = \bigoplus_{S=0 \text{ ou } \frac{1}{2}}^{N/2} f(S) D^S$. On montre que les $|\mathbf{S}^2, S^z, f\rangle_{f=1 \dots f(S)}$ se transforment sous les permutations suivant une RI de σ_N , ρ_S , de dimension $f(S)$. De manière analogue, un état $|\Phi_n\rangle$ se transforme suivant une RI de σ_N notée ρ_n . Par ailleurs, toute RI de σ_N reste irréductible quand on la multiplie par la représentation $\det : P \rightarrow (-1)^{\text{sign}(P)}$. On vérifie alors, c'est une conséquence directe de l'orthogonalité des RI, que ce sont les fonctions d'onde d'espace $|\Phi_n\rangle$ se transformant suivant $\rho_n = \det \cdot \rho_S$ qui formeront avec les $|\mathbf{S}^2, S^z, f\rangle$ les états totalement antisymétriques recherchés.

1.2 Échange multiple dans l'³He sur le graphite

L'³He adsorbé sur un substrat de graphite constitue un système exemplaire pour étudier le magnétisme en deux dimensions. Le graphite est fortement attractif pour les atomes d'³He. Ainsi, le potentiel d'adsorption d'une surface de graphite pour un atome d'³He présente un puits d'une profondeur d'environ 200K. L'énergie d'adsorption, elle, est de -136.2K (JOLY *et al.* [67] et BRAMI *et al.* [22]). La différence entre ces deux énergies provient de l'importante énergie cinétique (de point zéro) des atomes dans la direction perpendiculaire au substrat.

Ce substrat de graphite permet la cristallisation d'un solide bidimensionnel *triangulaire* de spins $\frac{1}{2}$. ELSER [41] propose en 1989 un modèle pour le magnétisme de la seconde couche commensurée, basé sur un réseau kagome. Ce modèle a été abandonné depuis ⁴. Pour une densité totale $17.8 < \rho_t < 18.5 \text{nm}^{-2}$ on observe deux couches solides d'³He (correspondant à une densité dans la deuxième couche $6.4 < \rho_2 < 7.6 \text{nm}^{-2}$). Pour des densités plus faibles, la deuxième couche est liquide ⁵, tandis que si ρ_t augmente, des atomes sont promus en troisième couche. C'est dans la deuxième couche, puisqu'elle est plus éloignée du substrat et donc moins confinée dans la direction perpendiculaire, que les mouvements de point zéro, et donc les processus d'échange, sont les plus importants ⁶.

L'évaluation des fréquences d'échange à partir des premiers principes est une tâche ardue. ROGER [105] en 1984 effectue un calcul semi-classique (WKB) des échanges dans l'³He tridimensionnel et dans le cristal de Wigner. Il met notamment en évidence l'importance du terme à trois corps sur le réseau triangulaire. Les fréquences d'échange ont plus récemment été calculées par intégrales de chemins Monte-Carlo (PIMC) [16, 17] dans le cas de l'³He sur le graphite. En première couche, ces simulations prédisent des échanges de l'ordre du milli Kelvin aux plus basses densités ($\rho = 6.8 \text{nm}^{-2}$) et descendent au micro

⁴La suggestion d'ELSER est basée la constatation suivante : pour le rapport de densités 4/7 entre la deuxième et la première couche, il existe une structure commensurée, énergétiquement favorable, où un quart des atomes (sites B) de la seconde couche (triangulaire) se trouvent exactement au dessus d'un atome de la première couche, contrairement aux autres atomes de la seconde couche (sites A). ELSER fait l'hypothèse que les échanges les plus fréquents sont ceux entre les sites A, qui forment un réseau kagome. Ce modèle est construit pour expliquer les données de chaleur spécifique de GREYWALL et BUSCH [52]. Depuis, les calculs Monte-Carlo des fréquences d'échange ont indiqué, au contraire, que tous échanges (A-A et A-B) sont à peu près équivalents (BERNU, communication privée). Par ailleurs, le déficit d'entropie que prédit le modèle d'ELSER n'est pas observé expérimentalement [65].

⁵De récentes expériences sur des films liquides (divergence en loi de puissance de la masse effective des quasi-particules lors de la transition liquide/solide) suggèrent que la solidification est une transition de localisation de Mott [27].

⁶Des expériences menées à très basse température sur une monocouche indiquent que l'échange multiple joue un rôle important dès la première couche [64]. Par contre, quand une deuxième couche cristallise sur la première, cette dernière est suffisamment dense pour que les échanges y soient négligeables (μK) devant celles de la deuxième couche (mK).

ρ (nm ⁻²)	J_2	J_3	J_4	J_5	J_6
6.8	1.08	2.19	0.451	0.478	0.471
7.00	0.419	1.6	0.348	0.255	0.215
7.50	0.103	0.476	0.0643		
7.85	0.0366	0.191	0.0217	0.022	0.012
9.00	0.00135	0.011	0.000576	0.00041	0.00022
10.0	0.00014	0.0012			

TAB. 1.1: Fréquences d'échange (en mK) dans une monocouche d'³He solide adsorbé sur du graphite. Simulations Monte-Carlo de BERNU et CEPERLEY [16].

Kelvin pour les fortes densités ($\rho = 9nm^{-2}$) (Tab. 1.1). La variation avec la densité est très rapide puisqu'elle est du type $J_n(\rho) \simeq J_n(\rho_0) \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\alpha_n}$ où l'exposant α est supérieur à 20 (par exemple $\alpha_3 \simeq 20$ et $\alpha_6 \simeq 27$ d'après [16]). On peut également évaluer les constantes d'échanges en comparant des mesures de chaleur spécifique et de susceptibilité magnétique aux séries haute température de l'hamiltonien d'échange multiple [107, 109]. Dans les deux cas on constate l'importance des processus d'échange multiple.

On ne considère dans la suite que les échanges à moins de 6 particules les plus simples. Ceci est motivé par plusieurs raisons :

- D'une manière générale, l'effet tunnel n'est significatif que pour de *petits* objets, pour lesquels l'action peut être comparable à \hbar . Les échanges sont des processus qui peuvent être décrits par le passage par effet tunnel d'une particule fictive de masse nm_0 d'une cavité à une autre dans un espace de dimension $3N$ (N est le nombre total d'atomes et m_0 la masse d'un atome d'³He, cf. § 1.1). La probabilité de ces processus rares est reliée à l'amplitude de la fonction d'onde à N corps dans la barrière de potentiel. Inspiré par l'approche WKB [105] et la discussion de CROSS et FISHER [36], supposons que le passage d'une cavité à l'autre se fait essentiellement au voisinage du chemin qui minimise l'action classique. Si x est une coordonnée le long de ce chemin, la fonction d'onde dans le "conduit" ressemble à $\Psi(x) \sim e^{-\sqrt{\frac{nm_0(V-E)}{\hbar^2}}x}$, où l'énergie E est plus petite que la hauteur V de la barrière. Hauteur et longueur du chemin varient de manière complexe avec le nombre d'atomes impliqués, la forme de l'échange et la densité. Dans la limite de grand n on s'attend à avoir $V \sim n$ et $x \sim \mathcal{O}(1)$. Dans le solide, la dépendance exponentielle en e^{-n} finit donc par interdire l'échange. Les calculs Monte-Carlo [16] et WKB [105] montrent toutefois que les échanges jusqu'à $n = 6$ contribuent.
- Pour des raisons stériques, les échanges les plus probables sont ceux qui sont les moins "anguleux". Ceci est confirmé par les calculs WKB [105] et Monte-Carlo [16, 29]. Cette restriction aux chemins les plus simples trouve une explication intuitive quand

	$J_2 P_{1,2}$	
	$-J_3 (P_{1,2,3} + P_{3,2,1})$	$J_2 - 2J_3 = -2.718\text{mK}$
	$J_4 (P_{1\dots4} + P_{4\dots1})$	$J_4 = 1.42\text{mK}$
	$-J_5 (P_{1\dots5} + P_{5\dots1})$	$J_5 = 0.497\text{mK}$
	$J_6 (P_{1\dots6} + P_{6\dots1})$	$J_6 = 1.92\text{mK}$

TAB. 1.2: Processus d'échange dominants dans les films d' ^3He et le terme correspondant dans l'hamiltonien effectif de spin. Les valeurs des J sont celles obtenues en partie par une analyse haute température des données pour un film d' ^3He sur une monocouche d' ^4He sur du graphite (Papyex ®) (BÄUERLE *et al.* [14]). Cette analyse est faite en fixant le coefficient $J_{C_v} = 2.0\text{mK}$ d'après des données dans l' ^3He pur, et le rapport $J_5/J_4 = 0.35$ d'après les simulations Monte-Carlo [17]. La densité de la couche d' ^3He est entièrement solide et commensurée avec la couche d' ^4He dans un rapport de densités de $\rho_2/\rho_1 = 4/7$. Le chapitre huit présente quelques résultats sur la thermodynamique de cet hamiltonien.

x	$\rho_2(\text{nm}^{-2})$	$ J_{C_V} $	J_χ	J_2^{eff}	J_4	J_5	J_6	J_2^{eff}/J_4	J_5/J_4	J_6/J_4
1.61	6.4	1.8	.03	-3.1	1.9	0.7	1.5	-1.7	0.35	0.8
1.66	6.7		-.46	-4.4	2.6	0.9	1.0	-1.7	0.35	0.4
1.71	7.0	2.4	-.93	-5.0	2.1	0.6	0.6	-2.4	0.3	0.3
1.75	7.3	4.6	-2.8	-8.8	3.3	1.0	1.7	-2.7	0.3	0.5
1.76			-2.3	-9.9	4.5	1.3	1.6	-2.2	0.3	0.4
1.83			-2.7	-12.4	5.7	1.7	1.7	-2.1	0.3	0.3
1.84	7.65	5.6	-3.5	-10.8	4.0	1.2	1.7	-2.7	0.3	0.4
1.90	7.75		-2.9	-9.6	3.9	1.2	1.5	-2.5	0.3	0.4
1.93	7.8	4.4	-3.1	-8.0	2.6	0.8	1.3	-3.0	0.3	0.5
2.02	7.95	2.9	-2.2	-3.8	1.0	0.3	0.6	-3.6	0.3	0.5
2.11		1.8	-1.5	-2.6	0.5	0.2	0.3	-4.9	0.3	0.5

TAB. 1.3: Constantes d'échange (en mK) fonction de la densité (d'après ROGER *et al.* [109]). Ces données sont extraites des données expérimentales de $\chi(T)$ et $C_V(T)$ à l'aide de séries et Padés haute température [107]. La plus basse densité correspond à la solidification de la deuxième couche. x est la couverture mesurée en nombre de couches, elle est définie comme la densité totale ρ_t divisée par la densité maximale d'une première couche saturée : $x = \rho_t/\rho_1^{\text{max}}$.

on se représente les atomes d' ^3He par des sphères dures.

Dans la suite des études précédentes [106], on ne retient dans l'équation (1.2) que :

$$H = J_2 \sum_{\text{---}} P_{1,2} - J_3 \sum_{\triangle} (P_{1\dots 3} + P^{-1}) + J_4 \sum_{\text{---}} (P_{1\dots 4} + P^{-1}) \quad (1.3)$$

$$- J_5 \sum_{\text{---}} (P_{1\dots 5} + P^{-1}) + J_6 \sum_{\text{---}} (P_{1\dots 6} + P^{-1})$$

Sur un réseau triangulaire, l'échange à trois corps autour d'un triangle (J_3) peut se ramener à trois échanges à deux corps sur les trois cotés du triangle. On définit dans la suite $J_2^{\text{eff}} = J_2 - 2J_3$, de sorte que :

$$H = J_2 \sum_{\text{---}} P_{1,2} - J_3 \sum_{\triangle} = -2NJ_3 + J_2^{\text{eff}} \sum_{\text{---}} P_{1,2} \quad (1.4)$$

La physique du modèle dépend de trois paramètres sans dimension : J_2^{eff}/J_4 , J_5/J_4 et J_6/J_4 . La théorie de THOULESS impose aux J_n d'être positifs. Le signe de J_2^{eff} , qui est une différence, n'est pas contraint. Souvent dans la suite, nous noterons J_2 au lieu de J_2^{eff} pour l'échange à deux corps effectif.

1.3 Diagramme de phases classique

La limite classique du modèle d'Heisenberg fait correspondre aux opérateurs de spin des vecteurs classiques de longueur fixée. On procède de la même façon pour étudier le système classique d'échange multiple. En face d'un hamiltonien complexe comme Eq. (1.3), trouver le fondamental classique est une première étape, d'autant plus pertinente que cette approche donne la bonne image dans le cas Heisenberg simple. Pour le modèle d'échange multiple, même l'étude du fondamental classique est difficile. Il n'existe quasiment aucun résultat exact et nous faisons au § 1.3.2 une approximation variationnelle simple pour "dégrossir" le diagramme de phases.

1.3.1 Décomposition des permutations

Comment définir l'analogie pour des spins classiques d'une permutations cyclique agissant sur des spins $\frac{1}{2}$ quantique ? On commence par écrire les opérateurs de permutations en termes d'opérateurs de spin. Par exemple pour deux particules de spin $\frac{1}{2}$ on a :

$$P_{i,j} - \frac{1}{2} = 2\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.5)$$

Il est possible d'écrire la partie réelle d'une permutation cyclique comme somme de produits de $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ où tous les couples (i, j) d'un terme sont deux à deux disjoints [72]. Concrètement, pour des échanges jusqu'à cinq corps on trouve :

$$P_{i,j} = 2\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \frac{1}{2} \quad (1.6)$$

$$P_{1,2,3} + P_{3,2,1} = P_{1,2} + P_{2,3} + P_{3,1} - 1 \quad (1.7)$$

$$P_{1,2,3,4} + P_{4,3,2,1} = P_{1,2}P_{3,4} + P_{1,4}P_{2,3} - P_{1,3}P_{2,4} + P_{1,3} + P_{2,4} - 1 \quad (1.8)$$

$$\begin{aligned} P_{1,\dots,5} + P_{5,\dots,1} = & -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} (P_{1,2} + P_{2,3} + P_{3,4} + P_{4,5} + P_{5,1}) \\ & + \frac{1}{2} (P_{1,3} + P_{2,4} + P_{3,5} + P_{4,1} + P_{5,2}) \\ & + \frac{1}{2} (P_{1,2}P_{3,4} + P_{2,3}P_{4,5} + \dots) \\ & + \frac{1}{2} (P_{1,2}P_{3,5} + P_{2,3}P_{4,1} + \dots) \\ & - \frac{1}{2} (P_{1,3}P_{2,4} + P_{2,4}P_{3,5} + \dots) \end{aligned} \quad (1.9)$$

Jusqu'à cinq corps, l'hamiltonien Eq. (1.3) peut donc s'écrire :

$$H = \sum_{i < j} j_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_{i < j, k < l} j_{i,j,k,l} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j) (\vec{S}_k \cdot \vec{S}_l) + \text{cte} \quad (1.10)$$

Plus précisément, on trouve :

$$\begin{aligned} H = & N \left(\frac{3}{2} J_2 - J_3 + \frac{3}{4} J_4 - \frac{3}{4} J_5 \right) + (2J_2^{\text{eff}} + 5J_4 - 7J_5) \sum_{\bullet\text{---}\bullet} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \\ & + (J_4 - 2J_5) \sum_{\begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \end{array}} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 - J_5 \sum_{\bullet\text{---}\bullet\text{---}\bullet} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \\ & + 4J_4 \sum_{\begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \end{array}} [(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4) + (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4) (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3) - (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3) (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4)] \\ & - 2J_5 \sum_{\begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \bullet \quad \bullet \end{array}} [(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4) + (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3) (\mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_5) + (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4) (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_5) \\ & \quad + (\mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_5) (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) + (\mathbf{S}_5 \cdot \mathbf{S}_1) (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3) + (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_5) \\ & \quad + (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3) (\mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_1) + (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4) (\mathbf{S}_5 \cdot \mathbf{S}_2) + (\mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_5) (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3) \\ & \quad + (\mathbf{S}_5 \cdot \mathbf{S}_1) (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4) - (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3) (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4) - (\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_4) (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_5) \\ & \quad - (\mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_5) (\mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_1) - (\mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_1) (\mathbf{S}_5 \cdot \mathbf{S}_2) - (\mathbf{S}_5 \cdot \mathbf{S}_2) (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_3)] \end{aligned} \quad (1.11)$$

Une formule explicite de la décomposition du terme à 6 corps en produit d'échanges de paires se trouve dans la référence [49].

1.3.2 Minimisation de l'énergie d'une hélice plane

Un calcul exact du fondamental de l'hamiltonien classique ne semble pas possible pour des valeurs générales des fréquences d'échange. Nous cherchons un sous-espace variationnel suffisamment simple pour qu'un tel calcul puisse être mené.

Le voisinage des configurations de grande symétrie dans l'espace des phases est de plus grande dimension. Ces configurations sont donc favorisées par les fluctuations, à la fois quantiques et thermiques. C'est le mécanisme de l'*ordre par le désordre* [138]. On s'attend donc à une sélection des hélices planes, même si le minimum absolu d'énergie se trouve être une configuration des spins moins symétrique. On considère ici les états s'écrivant :

$$\vec{S}_i = \vec{e}_1 \cos(\mathbf{R}_i \cdot \mathbf{q}) + \vec{e}_2 \sin(\mathbf{R}_i \cdot \mathbf{q}) \quad (1.12)$$

L'hamiltonien Eq. (1.11) devient une fonction du vecteur d'onde \mathbf{q} . Elle est minimisée analytiquement jusqu'à 5 corps (Maple V) tandis que la contribution de l'échange à 6 corps a du être en partie calculée numériquement. Le diagramme de phases qui en résulte est présenté Fig. 1.3. Les équations des frontières $\Delta_{1,2,3}$ sont calculées pour un spin arbitraire :

$$\Delta_1 : J_2^{\text{eff}} - (6S^2 + 9/2)J_5 + 3J_4 + (1/2 + 2S^2)J_6 = 0 \quad (1.13)$$

$$\Delta_2 : J_2^{\text{eff}} - 6S^2 J_5 - 3/2 J_4 + (-5/8 + 2S^2)J_6 = 0 \quad (1.14)$$

$$\Delta_3 : J_2^{\text{eff}} - (6S^2 + 4)J_5 + 5/2 J_4 + (3/8 + 2S^2)J_6 = 0 \quad (1.15)$$

La frontière de la zone α est connue quand $J_6 = 0$:

$$J_2^{\text{eff}} - (6S^2 + 17/2)J_5 + 4J_4 = 0 \quad (1.16)$$

$$J_2^{\text{eff}} - (6S^2 + 1/2)J_5 + 2J_4 = 0 \quad (1.17)$$

Dans cette région, les hélices possèdent un vecteur d'onde qui varie continuellement avec les paramètres J_n sur la ligne indiquée Fig. 1.5, c'est-à-dire entre l'origine et un point \mathbf{A}_i milieu de bord de zone.

Les énergies des différentes phases sont représentées Fig. 1.4 à $J_5 = J_6 = 0$. Les énergies des phases *tétraèdre* et *uuud* trouvées par KUBO *et al.* [77] sont aussi représentées. Ces phases ne sont pas des hélices planes et elles possèdent des énergies inférieures dans une grande gamme de paramètres. Toutefois, l'hypothèse sur le rôle stabilisant des fluctuations quantiques vis-à-vis des solutions de plus grande symétrie semble être en partie validée par les résultats obtenus par la méthode des bosons de Schwinger au chapitre suivant. Nous trouvons, à l'aide de cette méthode de champ moyen quantique, que l'état *uuud* au profit de solutions antiferromagnétiques proches de l'état colinéaire trouvé dans la région β de la figure 1.3. Par contre, c'est bien une solution à 4 sous-réseaux analogue à l'état tétraèdre qui est sélectionnée au niveau du champ moyen (Fig. 2.3).

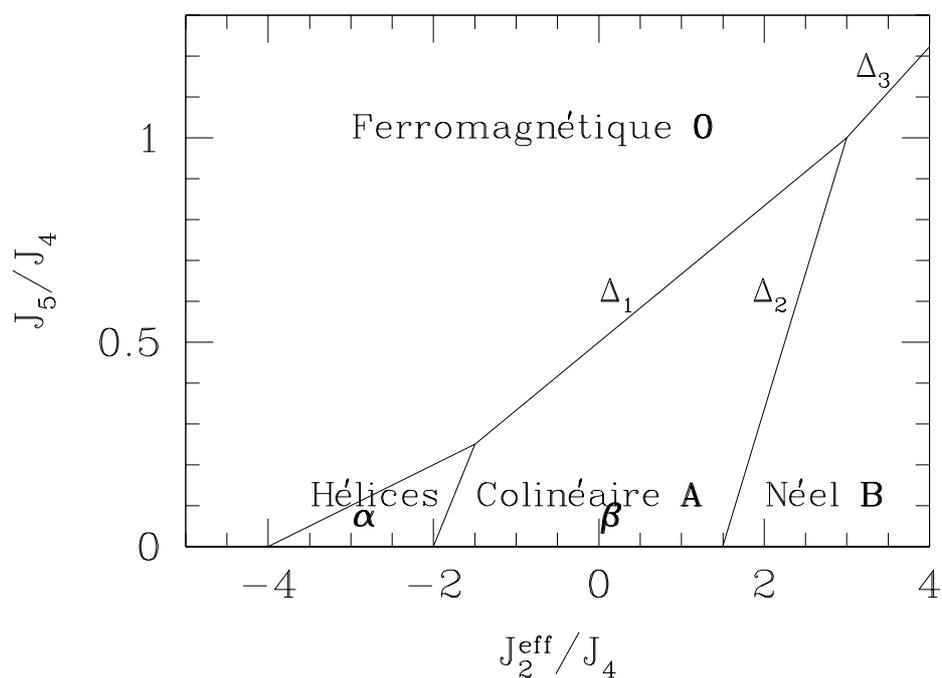


FIG. 1.3: Diagramme de phases classique dans l'approximation des hélices planes. Les lettres indiquent la position du vecteur d'onde \mathbf{q} de l'hélice dans la première zone de Brillouin (Fig. 1.5).

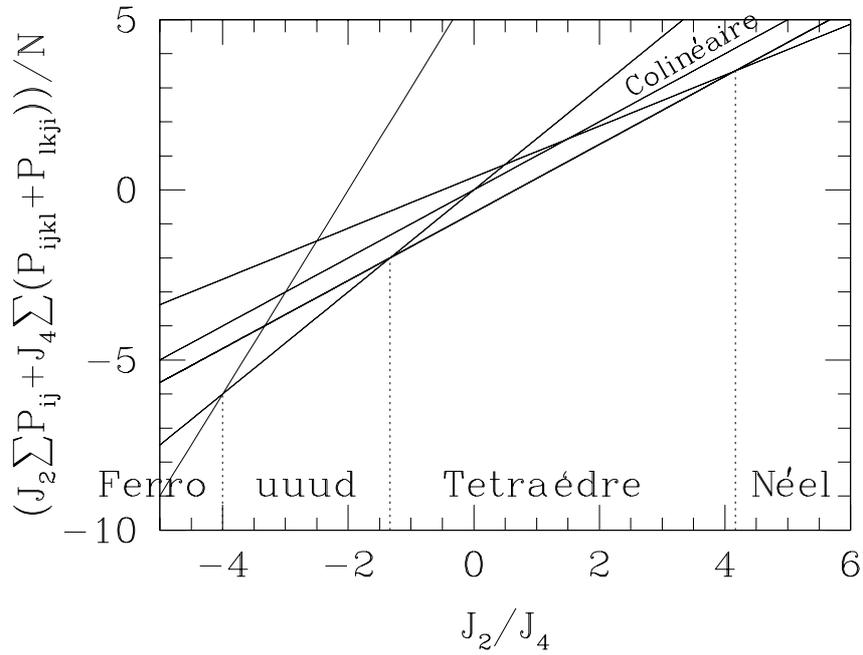


FIG. 1.4: Énergies classiques pour l'hamiltonien J_2/J_4 . On y trouve les hélices planes trouvées précédemment ainsi qu'une solution ferrimagnétique (*uuud*) et une solution non planaire (Tétraédre). KUBO et MOMOI [77], qui ont trouvé ces deux dernières configurations, ont démontré que l'état tétraédre est le fondamental classique exact dans l'intervalle $J_2/J_4 \in [-\frac{1}{4}, 1]$. Leur approche variationnelle prédit pour cet état tétraédre une région de stabilité plus étendue : $J_2/J_4 \in [-\frac{4}{3}, \frac{25}{6}]$. Des résultats Monte-Carlo classique obtenus par MOMOI *et al.* [94] à $J_2/J_4 = -2$ montrent que l'état *uuud* est un des états fondamentaux de cet hamiltonien.

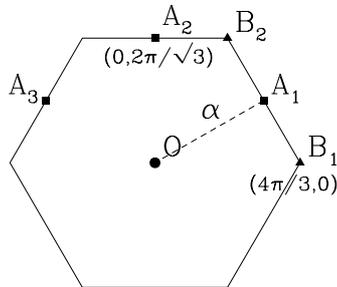


FIG. 1.5: Première zone de Brillouin du réseau triangulaire

Chapitre 2

Bosons de Schwinger

Cette partie décrit la théorie des bosons de Schwinger et son application au problème d'échange multiple. On doit à AROVAS et AUERBACH [10] l'utilisation de cette représentation de l'algèbre des spins pour formuler une théorie de champ moyen. Elle a ensuite été perfectionnée par CECCATTO, GAZZA et TRUMPER [28]¹. Qualitativement, le résultat obtenu est le suivant : les phases classiques trouvées pour l'hamiltonien d'échange multiple sont, dès le niveau du champ moyen, sévèrement affectées par les fluctuations quantiques. Les paramètres d'ordre sont réduits, mais les ordres de Néel trouvés demeurent à longue portée. En revanche, il s'ouvre une fenêtre dans l'espace des paramètres d'échange où aucune solution n'a pu être trouvée numériquement, donnant une première indication de l'existence d'une phase liquide de spins. L'analyse par diagonalisations exactes montrera, en fait, que cette phase désordonnée s'étend sur la plus grande partie du domaine où les solutions classiques sont antiferromagnétiques.

Les paragraphes 2.1 à 2.3.3 sont exclusivement dédiés à une présentation de la théorie. Pour l'exposé des résultats concernant l'échange multiple, il est possible de passer directement au paragraphe 2.3.4.

2.1 Idée générale

2.1.1 Représentation de l'algèbre des spins

Considérons l'hamiltonien d'Heisenberg dans un champ extérieur :

$$H = \sum_{i < j} J(j-i) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - B_{\text{ext}} \sum_i \vec{S}_i \quad (2.1)$$

¹Il s'agit d'éviter l'utilisation de la contrainte Eq. (2.3) pour simplifier l'hamiltonien, dans la mesure où elle n'est satisfaite qu'en moyenne par le traitement de champ moyen. On garde alors explicitement les deux paramètres d'ordre (ferromagnétique et antiferromagnétique) dans l'hamiltonien.

On introduit en chaque site deux opérateurs de création de bosons : a_{\uparrow}^{\dagger} crée un boson portant un quantum de spin vers le haut, tandis que a_{\downarrow}^{\dagger} porte un quantum de spin vers le bas. L'algèbre des opérateurs de spins peut-être représentée en termes de ces opérateurs bosoniques [10, 28] :

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} a_{\uparrow}^{\dagger} & a_{\downarrow}^{\dagger} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{\sigma}_{11} & \vec{\sigma}_{12} \\ \vec{\sigma}_{21} & \vec{\sigma}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{\uparrow} \\ a_{\downarrow} \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

où $\vec{\sigma}$ désigne les trois matrices de Pauli. L'espace de Hilbert d'un spin $\vec{S}^2 = S(S+1)$ est le sous-espace des états de bosons satisfaisant la contrainte :

$$a_{\uparrow}^{\dagger} a_{\uparrow} + a_{\downarrow}^{\dagger} a_{\downarrow} = 2S \quad (2.3)$$

Quant au produit scalaire de deux spins, il s'écrit :

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j =: B_{i,j}^{\dagger} B_{i,j} : - A_{i,j}^{\dagger} A_{i,j} \quad (2.4)$$

où $A_{i,j}$ et $B_{i,j}$ sont définis par :

$$\begin{aligned} A_{i,j} &= \frac{1}{2} \left(a_{\uparrow_i} a_{\downarrow_j} - a_{\uparrow_j} a_{\downarrow_i} \right) \\ B_{i,j}^{\dagger} &= \frac{1}{2} \left(a_{\uparrow_i}^{\dagger} a_{\uparrow_j} + a_{\downarrow_i}^{\dagger} a_{\downarrow_j} \right) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Pour $i \neq j$ on remarque que : $B_{i,j}^{\dagger} B_{i,j} : + A_{i,j}^{\dagger} A_{i,j} = \frac{1}{4} (a_{\uparrow_i}^{\dagger} a_{\uparrow_i} + a_{\downarrow_i}^{\dagger} a_{\downarrow_i}) (a_{\uparrow_j}^{\dagger} a_{\uparrow_j} + a_{\downarrow_j}^{\dagger} a_{\downarrow_j})$. Compte-tenu de Eq. (2.3) on a :

$$\forall i \neq j, : B_{i,j}^{\dagger} B_{i,j} : + A_{i,j}^{\dagger} A_{i,j} = S^2 \quad (2.6)$$

AROVAS et AUERBACH [10] utilisent cette relation pour éliminer $A_{i,j}$ (respectivement $B_{i,j}$) dans (2.4) dans le cas ferromagnétique $J < 0$ (resp. antiferromagnétique $J > 0$). Au contraire, CECCATTO *et al.* [28] conservent les deux paramètres d'ordre puisque le traitement de champ moyen ne satisfait la contrainte (2.3) *qu'en moyenne*. En l'absence de frustration, l'un des deux paramètres d'ordre est nul et on aboutit aux mêmes équations de champ moyen. En revanche la valeur de l'énergie diffère (pour un exemple concret voir [28]). Dans le cas d'un système frustré il faut conserver A et B puisque les deux opérateurs vont acquérir une valeur moyenne non nulle au niveau du champ moyen, sans pour autant que ces valeurs moyennes satisfassent Eq. (2.6).

2.1.2 Symétries et invariance de jauge

La formulation d'un problème de spins avec des opérateurs de création et d'annihilation (bosons ou fermions) introduit en chaque site un degré de liberté supplémentaire lié à la phase de ces opérateurs. Cette phase donne à la théorie une symétrie de jauge $U(1)$, qui vient s'ajouter à l'invariance par rotation $SU(2)$ du problème.

- L'hamiltonien 2.1 est invariant sous les changements de jauge ϕ_i :

$$\begin{bmatrix} a_{\uparrow i} \\ a_{\downarrow i} \end{bmatrix} \longrightarrow e^{i\phi_i} \begin{bmatrix} a_{\uparrow i} \\ a_{\downarrow i} \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

En effet, sous cette transformation $A_{i,j}$ et $B_{i,j}$ deviennent :

$$\begin{aligned} A_{i,j} &\longrightarrow e^{i(\phi_i + \phi_j)} A_{i,j} \\ B_{i,j} &\longrightarrow e^{i(\phi_j - \phi_i)} B_{i,j} \end{aligned} \quad (2.8)$$

- La rotation globale des spins se traduit sur les opérateurs bosoniques par :

$$g \in SU(2), \forall i : \begin{bmatrix} a_{\uparrow i} \\ a_{\downarrow i} \end{bmatrix} \longrightarrow g \begin{bmatrix} a_{\uparrow i} \\ a_{\downarrow i} \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

Par exemple, pour une rotation d'angle θ autour de l'axe z de quantification $g = \begin{bmatrix} e^{i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta/2} \end{bmatrix}$ et :

$$\forall i, \begin{bmatrix} a_{\uparrow i} \\ a_{\downarrow i} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} e^{i\theta/2} a_{\uparrow i} \\ e^{-i\theta/2} a_{\downarrow i} \end{bmatrix} \quad (2.10)$$

2.1.3 Champ moyen

Revenons au hamiltonien Eq. (2.1), il s'écrit de manière exacte :

$$H = \sum_{i < j} J(j-i) (: B_{i,j}^\dagger B_{i,j} : - A_{i,j}^\dagger A_{i,j}) - \frac{B_{\text{ext}}}{2} \sum_i (a_{\uparrow i}^\dagger a_{\uparrow i} - a_{\downarrow i}^\dagger a_{\downarrow i}) \quad (2.11)$$

On fait une hypothèse de champ moyen en découplant ² les termes à quatre bosons de

²On peut aussi obtenir $H_{|MF}$ d'une formulation en termes de champs et d'intégrales fonctionnelles [10] : on exprime la fonction de partition comme une intégrale sur les champs de bosons et sur un champ scalaire qui implémente la contrainte, on découple les termes quartiques par une transformation de Hubbard-Stratanovich. L'approximation de point selle pour les champs scalaires donne alors un hamiltonien effectif pour les bosons qui n'est autre que $H_{|MF}$. Généralisons la méthode à un antiferromagnétique avec des "spins" $SU(N)$. On utilise alors N couleurs de bosons $a_{\sigma,i}$ $\sigma = 1 \dots N$. La contrainte (2.3) devient $\sum_{\sigma=1}^N a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,i} = NS$. Il faut trouver une généralisation des formules (2.5). On commence par éliminer $B_{i,j}$ avec la contrainte. Si le réseau est bipartite et sans interaction frustrante, une redéfinition des opérateurs de bosons "up" sur l'un des deux sous-réseaux ($a_{\uparrow i} \rightarrow -a_{\downarrow i}$ et $a_{\downarrow i} \rightarrow a_{\uparrow i}$ et $a_{\sigma,j} \rightarrow a_{\sigma,j}$) permet de récrire (2.5) sans signe moins pour $A_{i,j}$. On généralise alors (2.5) au cas de N couleurs par : $A_{i,j} = \frac{1}{N} \sum_{\sigma} a_{\sigma,i} a_{\sigma,j}$. Si le système est frustré, il n'est pas possible de trouver une formulation $SU(N)$ avec ces bosons. On peut utiliser un formalisme fermionique [2, 6, 10, 102, 114] ou bien réduire la symétrie entre couleurs de bosons de $SU(N)$ à $Sp(N)$ [104, 116]. L'approximation de point selle est exacte dans la limite $N \rightarrow \infty$ et on peut calculer les corrections en $1/N$ (termes à une boucle) [137].

la manière suivante :

$$\begin{aligned} A_{i,j}^\dagger A_{i,j} &\approx \langle A_{i,j}^\dagger \rangle A_{i,j} + A_{i,j}^\dagger \langle A_{i,j} \rangle - |\langle A_{i,j} \rangle|^2 \\ : B_{i,j}^\dagger B_{i,j} : &\approx \langle B_{i,j}^\dagger \rangle B_{i,j} + B_{i,j}^\dagger \langle B_{i,j} \rangle - |\langle B_{i,j} \rangle|^2 \end{aligned} \quad (2.12)$$

L'hamiltonien Eq. (2.11) devient :

$$\begin{aligned} H_{|MF} &= \sum_{i < j} J(j-i) \left[B_{i,j}^\dagger \langle B_{i,j} \rangle - A_{i,j}^\dagger \langle A_{i,j} \rangle + \langle B_{i,j}^\dagger \rangle B_{i,j} - \langle A_{i,j}^\dagger \rangle A_{i,j} \right. \\ &\quad \left. - |\langle B_{i,j} \rangle|^2 + |\langle A_{i,j} \rangle|^2 \right] - \frac{B_{\text{ext}}}{2} \sum_i (\dots) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Cet hamiltonien est quadratique dans les opérateurs a_\uparrow et a_\downarrow et peut être diagonalisé par une transformation de Bogoliubov. Mais il dépend explicitement des paramètres d'ordre $\langle A_{i,j} \rangle$ et $\langle B_{i,j} \rangle$. Ceux-ci doivent donc être calculés de manière auto-cohérente : à température nulle, les valeurs moyennes $\langle A \rangle$ et $\langle B \rangle$ calculées dans le fondamental de $H_{|MF}$ doivent donner les paramètres d'ordre introduits dans $H_{|MF}$.

La contrainte (2.3) est aussi traitée en champ moyen. On introduit pour cela en chaque site i un multiplicateur de Lagrange λ_i :

$$H_{|MF} \longrightarrow H_{|MF} - \frac{1}{2} \sum_i \lambda_i \left[a_{\uparrow i}^\dagger a_{\uparrow i} + a_{\downarrow i}^\dagger a_{\downarrow i} - 2S \right] \quad (2.14)$$

Puis on ajuste ces potentiels chimiques de sorte que $\forall i$:

$$\frac{1}{2} \langle a_{\uparrow i}^\dagger a_{\uparrow i} + a_{\downarrow i}^\dagger a_{\downarrow i} \rangle = \langle B_{i,i} \rangle = S \quad (2.15)$$

À ce stade, le problème de spin en interaction est ramené, par une approximation de champ moyen, à un hamiltonien quadratique de bosons dont les paramètres sont les amplitudes des fluctuations ferromagnétiques et antiferromagnétiques pour chaque paire de spins couplés par l'échange. Il reste à déterminer les équations que doivent satisfaire ces paramètres d'ordre. Elles peuvent l'être en minimisant l'énergie libre, ou bien en imposant une condition d'auto-cohérence. Ces deux chemins conduisent bien sûr aux mêmes équations et c'est la seconde approche qui est expliquée dans le paragraphe qui suit.

2.2 Équations d'auto-cohérence

2.2.1 Hypothèses

Pour établir les équations d'auto-cohérence on suppose ici l'invariance par translation :

- $\langle A_{i,j} \rangle = \mathcal{A}(j-i)$
- $\langle B_{i,j} \rangle = \mathcal{B}(j-i)$
- $\forall i \lambda_i = \lambda$

de sorte que l'Eq. (2.13) devienne :

$$\begin{aligned}
H_{|MF} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} J(j-i) \left[\frac{1}{2} \left(a_{\uparrow i}^\dagger a_{\uparrow j} + a_{\downarrow i}^\dagger a_{\downarrow j} \right) \mathcal{B}(j-i) + \text{h.c} - |\mathcal{B}(j-i)|^2 \right] \\
&\quad - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J(j-i) \left[\frac{1}{2} \left(a_{\downarrow j}^\dagger a_{\uparrow i}^\dagger - a_{\downarrow i}^\dagger a_{\uparrow j}^\dagger \right) \mathcal{A}(j-i) + \text{h.c} - |\mathcal{A}(j-i)|^2 \right] \quad (2.16) \\
&\quad - \frac{B_{\text{ext}}}{2} \sum_i \left[a_{\uparrow i}^\dagger a_{\uparrow i} - a_{\downarrow i}^\dagger a_{\downarrow i} \right] - \frac{\lambda}{2} \sum_i \left[a_{\uparrow i}^\dagger a_{\uparrow i} + a_{\downarrow i}^\dagger a_{\downarrow i} - 2S \right]
\end{aligned}$$

Il n'est pas possible, même avec la liberté de jauge $U(1)$ sur les opérateurs a_i et b_i de rendre réels les paramètres d'ordre \mathcal{B} et \mathcal{A} . En particulier s'il existe un *flux* autour d'une plaquette $(i, j, k) : \mathcal{B}(j-i)\mathcal{B}(k-j)\mathcal{B}(i-k) \notin \mathbb{R}$, il ne peut pas être absorbé dans une redéfinition des bosons. Anticipant sur la suite, nous mentionnons ici que toutes les solutions que nous trouvons avec le modèle d'échange multiple ont un flux nul.

2.2.2 Diagonalisation de l'hamiltonien

On écrit (2.16) en transformée de Fourier :

$$\begin{aligned}
H_{|MF} &= \lambda N S + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \begin{aligned} &\left[\begin{array}{cc} a_{\uparrow \mathbf{q}}^\dagger & a_{\downarrow -\mathbf{q}} \end{array} \right] h_{\mathbf{q}} \begin{bmatrix} a_{\uparrow \mathbf{q}} \\ a_{\downarrow -\mathbf{q}}^\dagger \end{bmatrix} \\ &+ \sqrt{N} \left(\overline{\mathcal{A}}_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}} - \overline{\mathcal{B}}_{\mathbf{q}} \tilde{\beta}_{\mathbf{q}} \right) - \left(\tilde{\beta}_{\mathbf{q}} - \lambda + B_{\text{ext}} \right) \end{aligned} \right\} \quad (2.17)
\end{aligned}$$

où la matrice $h_{\mathbf{q}}$ vaut :

$$h_{\mathbf{q}} = \begin{bmatrix} \tilde{\beta}_{-\mathbf{q}} - \lambda - B_{\text{ext}} & \alpha_{\mathbf{q}} \\ \overline{\alpha}_{\mathbf{q}} & \tilde{\beta}_{\mathbf{q}} - \lambda + B_{\text{ext}} \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

et avec :

$$\begin{aligned}
\alpha_{\mathbf{q}} &= \sum_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x}) \mathcal{A}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \\
\tilde{\beta}_{\mathbf{q}} &= \sum_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x}) \mathcal{B}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \in \mathbb{R}
\end{aligned} \quad (2.19)$$

tandis que $\mathcal{A}_{\mathbf{q}}$ et $\mathcal{B}_{\mathbf{q}}$ sont les transformées de Fourier ³ $\mathcal{A}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \mathcal{A}_{\mathbf{x}}$ et $\mathcal{B}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \mathcal{B}_{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}$. Puisque $\mathcal{B}_{\mathbf{x}} = \mathcal{B}_{-\mathbf{x}}^\dagger$, on peut décomposer $\tilde{\beta}_{\mathbf{q}}$ en une partie paire et une partie impaire en \mathbf{q} , toutes deux réelles :

$$\begin{aligned}\beta_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{2} \left(\tilde{\beta}_{\mathbf{q}} + \tilde{\beta}_{-\mathbf{q}} \right) = \sum_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x}) \mathcal{B}(\mathbf{x}) \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}) \\ \delta\beta_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{2} \left(\tilde{\beta}_{\mathbf{q}} - \tilde{\beta}_{-\mathbf{q}} \right) = i \sum_{\mathbf{x}} J(\mathbf{x}) \mathcal{B}(\mathbf{x}) \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{x})\end{aligned}\quad (2.20)$$

Pour les solutions où $\mathcal{B}(\mathbf{x})$ est réel on a $\delta\beta_{\mathbf{q}} = 0$, mais dans le cas le plus général $h_{\mathbf{q}}$ s'écrit :

$$h_{\mathbf{q}} = \begin{bmatrix} \beta_{\mathbf{q}} - \lambda & \alpha_{\mathbf{q}} \\ \overline{\alpha_{\mathbf{q}}} & \beta_{\mathbf{q}} - \lambda \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -B_{\text{ext}} - \delta\beta_{\mathbf{q}} & 0 \\ 0 & +B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}} \end{bmatrix}\quad (2.21)$$

Pour déterminer le spectre de (2.17) on cherche à écrire cet hamiltonien comme une somme d'hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques :

$$\begin{bmatrix} a_{\uparrow\mathbf{q}}^\dagger & a_{\downarrow-\mathbf{q}} \end{bmatrix} h_{\mathbf{q}} \begin{bmatrix} a_{\uparrow\mathbf{q}} \\ a_{\downarrow-\mathbf{q}}^\dagger \end{bmatrix} = \omega_{\mathbf{q}}^\uparrow \left(P_{\uparrow\mathbf{q}}^\dagger P_{\uparrow\mathbf{q}} \right) + \omega_{\mathbf{q}}^\downarrow \left(P_{\downarrow-\mathbf{q}} P_{\downarrow-\mathbf{q}}^\dagger \right)\quad (2.22)$$

On diagonalise $h_{\mathbf{q}}$ par un changement de base qui préserve les relations de commutation canoniques des opérateurs.

$$\begin{bmatrix} P_{\uparrow\mathbf{q}} \\ P_{\downarrow-\mathbf{q}}^\dagger \end{bmatrix} = M_{\mathbf{q}} \begin{bmatrix} a_{\uparrow\mathbf{q}} \\ a_{\downarrow-\mathbf{q}}^\dagger \end{bmatrix}\quad (2.23)$$

avec :

$$\left[P_{\sigma,\mathbf{q}}, P_{\sigma',\mathbf{q}'}^\dagger \right] = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \delta_{\sigma,\sigma'} \text{ etc...}\quad (2.24)$$

La matrice $M_{\mathbf{q}}$ donnant cette rotation de Bogoliubov est dans le cas présent :

$$M_{\mathbf{q}} = \begin{bmatrix} e^{-i\gamma_{\mathbf{q}}} \cosh \theta_{\mathbf{q}} & e^{i\gamma_{\mathbf{q}}} \sinh \theta_{\mathbf{q}} \\ e^{-i\gamma_{\mathbf{q}}} \sinh \theta_{\mathbf{q}} & e^{i\gamma_{\mathbf{q}}} \cosh \theta_{\mathbf{q}} \end{bmatrix}\quad (2.25)$$

où les angles $\gamma_{\mathbf{q}}$ et $\theta_{\mathbf{q}}$ sont définis par ⁴ :

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{q}} &= |\alpha_{\mathbf{q}}| e^{2i\gamma_{\mathbf{q}}} \\ \tanh 2\theta_{\mathbf{q}} &= \frac{|\alpha_{\mathbf{q}}|}{\beta_{\mathbf{q}} - \lambda}\end{aligned}\quad (2.26)$$

³À l'exception d' $\alpha_{\mathbf{q}}$ et $\beta_{\mathbf{q}}$, on adopte partout la convention suivante pour les transformées de Fourier : $f(\mathbf{q}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}$

⁴On remarque que le deuxième terme de Eq. (2.21) n'intervient pas dans la transformation puisque ni $\delta\beta_{\mathbf{q}}$ ni B_{ext} n'interviennent dans le choix de l'angle $\theta_{\mathbf{q}}$ ni de la phase $\gamma_{\mathbf{q}}$.

En termes des opérateurs P_{\uparrow} et P_{\downarrow} , l'hamiltonien Eq. (2.17) prend la forme :

$$H_{MF} = \lambda NS + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left[\omega_{\mathbf{q}} \left(P_{\uparrow \mathbf{q}}^{\dagger} P_{\uparrow \mathbf{q}} + P_{\downarrow -\mathbf{q}} P_{\downarrow -\mathbf{q}}^{\dagger} \right) - (B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}}) \left(P_{\uparrow \mathbf{q}}^{\dagger} P_{\uparrow \mathbf{q}} - P_{\downarrow -\mathbf{q}} P_{\downarrow -\mathbf{q}}^{\dagger} \right) + \sqrt{N} \left(\overline{\mathcal{A}}_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}} - \overline{\mathcal{B}}_{\mathbf{q}} \tilde{\beta}_{\mathbf{q}} \right) - (\tilde{\beta}_{\mathbf{q}} - \lambda + B_{\text{ext}}) \right] \quad (2.27)$$

Les énergies sont donc $\omega_{\mathbf{q}} \pm (B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}})$ avec des $\omega_{\mathbf{q}}$ donnés par :

$$\omega_{\mathbf{q}} = \text{signe}(\beta_{\mathbf{q}} - \lambda) \sqrt{(\beta_{\mathbf{q}} - \lambda)^2 - |\alpha_{\mathbf{q}}|^2} \quad (2.28)$$

Le spectre devant être borné inférieurement, les modes ont tous des énergies ≥ 0 . Nécessairement $\forall \mathbf{q} \omega_{\mathbf{q}} \geq |B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}}|$ et donc $\beta_{\mathbf{q}} - \lambda \geq |B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}}|$. Les quasi-particules de Bogoliubov ont alors des énergies :

$$\omega_{\mathbf{q}}^{\uparrow\downarrow} = \sqrt{(\beta_{\mathbf{q}} - \lambda)^2 - |\alpha_{\mathbf{q}}|^2} \pm (B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}}) \quad (2.29)$$

2.2.3 Équations d'auto-cohérence à $T = 0$

Calculons les valeurs moyennes de (2.5) dans un fondamental de (2.27). Cet état est le vide pour les bosons P_{\uparrow} dont les énergies $\omega_{\mathbf{q}}^{\uparrow}$ sont > 0 . Si par contre il existe des modes où $\omega_{\mathbf{q}}^{\uparrow} = \omega_{\mathbf{q}} - (B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}}) = 0$, ils sont susceptibles d'être occupés par $P_{\uparrow \mathbf{q}}^{\dagger} P_{\uparrow \mathbf{q}} = n_{\mathbf{q}}^{\uparrow}$ bosons. De même pour les bosons P_{\downarrow} , seuls les modes où $\omega_{\mathbf{q}}^{\downarrow} = \omega_{\mathbf{q}} + (B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}}) = 0$ pourront être occupés. Un fondamental s'écrit donc simplement à partir du vide des bosons P_{\uparrow} et P_{\downarrow} :

$$|\Psi\rangle = \prod_{\mathbf{q} \in \{\omega_{\mathbf{q}} = B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}}\}} \left[P_{\uparrow \mathbf{q}}^{\dagger} \right]^{n_{\mathbf{q}}^{\uparrow}} \prod_{\mathbf{q} \in \{\omega_{\mathbf{q}} = -(B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}})\}} \left[P_{\downarrow -\mathbf{q}}^{\dagger} \right]^{n_{-\mathbf{q}}^{\downarrow}} |vide_{P_{\uparrow}, P_{\downarrow}}\rangle \quad (2.30)$$

Pour calculer les paramètres d'ordre, on exprime les opérateurs a_{\uparrow} et a_{\downarrow} en fonction des opérateurs P_{\uparrow} et P_{\downarrow} en inversant la relation Eq. (2.25).

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\mathbf{q}} &= \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} \langle \Psi | a_{\uparrow 0} a_{\downarrow \mathbf{x}} - a_{\downarrow 0} a_{\uparrow \mathbf{x}} | \Psi \rangle e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} \\ &= \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi | a_{\uparrow \mathbf{k}} a_{\downarrow \mathbf{q}} - a_{\downarrow \mathbf{k}} a_{\uparrow \mathbf{q}} | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{2\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi | \left\{ e^{i(\gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{-\mathbf{q}})} \left[\cosh \theta_{\mathbf{k}} P_{\uparrow \mathbf{k}} - \sinh \theta_{\mathbf{k}} P_{\downarrow -\mathbf{k}}^{\dagger} \right] \right. \\ &\quad \left. \left[-\sinh \theta_{\mathbf{q}} P_{\uparrow -\mathbf{q}}^{\dagger} + \cosh \theta_{\mathbf{q}} P_{\downarrow \mathbf{q}} \right] - \text{idem}_{\mathbf{q} \leftrightarrow \mathbf{k}} \right\} | \Psi \rangle \end{aligned} \quad (2.31)$$

Utilisant (2.26) et (2.30) on trouve finalement :

$$\mathcal{A}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2\sqrt{N}} \frac{\alpha_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} \left(\frac{n_{\mathbf{q}} + n_{-\mathbf{q}}}{2} + 1 \right) \quad (2.32)$$

où on a posé : $n_{\mathbf{q}} = n_{\mathbf{q}}^{\uparrow} + n_{\mathbf{q}}^{\downarrow}$. On obtient par la même méthode la deuxième équation d'auto-cohérence :

$$\mathcal{B}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2\sqrt{N}} \left(\frac{\beta_{\mathbf{q}} - \lambda}{\omega_{\mathbf{q}}} \left(1 + \frac{n_{\mathbf{q}} + n_{-\mathbf{q}}}{2} \right) - 1 - \frac{n_{\mathbf{q}} - n_{-\mathbf{q}}}{2} \right) \quad (2.33)$$

La dernière équation d'auto-cohérence provient de la contrainte (2.15), son expression se déduit de (2.33) puisque $\mathcal{B}(\mathbf{x} = 0) = S = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \mathcal{B}(\mathbf{q})$.

$$\begin{aligned} \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\beta_{\mathbf{q}} - \lambda}{\omega_{\mathbf{q}}} \left(1 + \frac{n_{\mathbf{q}} + n_{-\mathbf{q}}}{2} \right) - 1 \right) &= S \\ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\beta_{\mathbf{q}} - \lambda}{\omega_{\mathbf{q}}} (1 + n_{\mathbf{q}}) &= 2S + 1 \end{aligned} \quad (2.34)$$

2.2.4 Cas réel $\mathcal{B}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$

Dans le cas où on se contente des solutions avec $\mathcal{B}(\mathbf{x})$ réel, on a nécessairement $\mathcal{B}(\mathbf{q}) = \mathcal{B}(-\mathbf{q})$ et donc, d'après Eq. (2.33), $n_{\mathbf{q}} = n_{-\mathbf{q}}$. Les équations (2.32) et (2.33) deviennent alors :

$$\mathcal{B}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2\sqrt{N}} \left(\frac{\beta_{\mathbf{q}} - \lambda}{\omega_{\mathbf{q}}} (1 + n_{\mathbf{q}}) - 1 \right) \quad (2.35)$$

$$\mathcal{A}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2\sqrt{N}} \frac{\alpha_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} (n_{\mathbf{q}} + 1) \quad (2.36)$$

Enfin, l'équation de contrainte (2.34) demeure inchangée. Si on se restreint aux solutions avec \mathcal{B} réel, on peut utiliser un champ extérieur $B_{\text{ext}} > 0$ infinitésimal pour régulariser la transformation de Bogoliubov. En effet, avec $\delta\beta_{\mathbf{q}} = 0$, $B_{\text{ext}} > 0$ implique que $\beta_{\mathbf{q}} - \lambda > 0$ et donc l'existence de la matrice Eq. (2.25), (2.26). Compte-tenu de ce choix de régulariser la transformation de Bogoliubov par un champ infinitésimal $B_{\text{ext}} > 0$, les solutions où $\langle S^z \rangle = 0$ sont aussi caractérisées par $\forall \mathbf{q} n_{\mathbf{q}} = 0$. En effet, $\sum_i S_i^z = \sum_{\mathbf{q}} (n_{P_{\uparrow}} - n_{P_{\downarrow}}) = \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q}}$. Pour les solutions d'aimantation nulle, le fondamental est le vide des bosons P_{\uparrow} et P_{\downarrow} . Il est donc invariant par rotation et la symétrie $SU(2)$ n'est pas brisée. Dans ce cas $n_{\mathbf{q}}$ disparaît des Eq. (2.32), (2.33) et (2.34).

À partir de (2.27), on dispose d'une expression pour l'énergie :

$$E_{|MF} = \lambda NS + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} [\omega_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}} + 1) - B_{\text{ext}}(n_{\mathbf{q}} - 1)] \quad (2.37)$$

$$+ \sqrt{N} (\overline{\mathcal{A}}_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}} - \overline{\mathcal{B}}_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{q}}) - (\tilde{\beta}_{\mathbf{q}} - \lambda + B_{\text{ext}})] \quad (2.38)$$

Cette expression se simplifie en utilisant (2.34), (2.35) et (2.36) :

$$E_{|MF} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{1}{2} \omega_{\mathbf{q}}(n_{\mathbf{q}} + 1) - B_{\text{ext}} n_{\mathbf{q}} \right] + \frac{1}{2} N \lambda (S + \frac{1}{2}) \quad (2.39)$$

2.3 Bosons de Schwinger pour l'échange multiple

2.3.1 Découplage

On cherche à traiter l'hamiltonien Eq. (1.10), (1.11), qui contient des échanges jusqu'à cinq corps, par la théorie des bosons de Schwinger. La première étape consiste à se ramener à un hamiltonien d'Heisenberg par un découplage du type :

$$(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)(\vec{S}_k \cdot \vec{S}_l) \simeq \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \langle \vec{S}_k \cdot \vec{S}_l \rangle + \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \langle \vec{S}_k \cdot \vec{S}_l \rangle - \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \langle \vec{S}_k \cdot \vec{S}_l \rangle \quad (2.40)$$

De sorte que (1.10), qui s'écrit

$$H = \sum_{i < j} j_{i,j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_{i < j, k < l} j_{i,j,k,l} (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j)(\vec{S}_k \cdot \vec{S}_l) + \text{cte} \quad (2.41)$$

devienne :

$$H \simeq \sum_{i < j} \left[j_{i,j} + \sum_{k < l} (j_{i,j,k,l} + j_{k,l,i,j}) \langle \vec{S}_k \cdot \vec{S}_l \rangle \right] \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \text{cte}' \quad (2.42)$$

Cette approximation de champ moyen ramène donc l'hamiltonien d'échange multiple Eq. (1.11) à un hamiltonien de la forme (2.1) où le couplage $J_{\text{multi}}(j-i)$ du site j avec le site i dépend des paramètres d'ordre $\langle \vec{S}_k \cdot \vec{S}_l \rangle$ sur les liens $k-l$ environnants :

$$J_{\text{multi}}(j-i) = j_{i,j} + \sum_{k < l} (j_{i,j,k,l} + j_{k,l,i,j}) \langle \vec{S}_k \cdot \vec{S}_l \rangle \quad (2.43)$$

2.3.2 Équations d'auto-cohérence à $T = 0$

Les équations d'auto-cohérence (2.35), (2.36) et de contrainte (2.34) sont inchangées. Par contre $\alpha_{\mathbf{q}}$ et $\beta_{\mathbf{q}}$ ne sont plus des combinaisons linéaires des paramètres d'ordre $\mathcal{A}(\mathbf{x})$ et $\mathcal{B}(\mathbf{x})$ puisque (2.20) devient :

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{q}} &= \sum_{\mathbf{x}} J_{\text{multi}}(\mathbf{x}) \mathcal{A}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \\ \beta_{\mathbf{q}} &= \sum_{\mathbf{x}} J_{\text{multi}}(\mathbf{x}) \mathcal{B}(\mathbf{x}) \cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) \\ \delta\beta_{\mathbf{q}} &= i \sum_{\mathbf{x}} J_{\text{multi}}(\mathbf{x}) \mathcal{B}(\mathbf{x}) \sin(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) \\ J_{\text{multi}}(\mathbf{x}) &= j(\mathbf{x}) + \sum_{k<l} (j_{0,\mathbf{x},k,l} + j_{k,l,0,\mathbf{x}}) (|\mathcal{B}(\mathbf{x})|^2 - |\mathcal{A}(\mathbf{x})|^2)\end{aligned}\tag{2.44}$$

Les inconnues sont :

- λ
- $\mathcal{A}(\mathbf{x}) = -\mathcal{A}(-\mathbf{x})$
- $\mathcal{B}(\mathbf{x}) = \mathcal{B}(-\mathbf{x})^\dagger$

où \mathbf{x} sont les vecteurs qui relient l'origine aux sites qui lui sont couplés par les échanges.

Critère de stabilité de l'état ferromagnétique

L'état complètement ferromagnétique ($S^z = \frac{N}{2}$) est caractérisé par $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle = S^2$ pour $i \neq j$. Il peut être représenté par la solution réelle $\forall i, j$ $\mathcal{A}_{i,j} = 0$ et $\mathcal{B}_{i,j} = S$. L'équation d'auto-cohérence (2.36) est automatiquement vérifiée puisque $\mathcal{A}_{\mathbf{q}} = 0 = \alpha_{\mathbf{q}}$. Les énergies prennent la forme : $\omega_{\mathbf{q}}^{\downarrow\uparrow} = \beta_{\mathbf{q}} - \lambda \pm (B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}})$. En transformée de Fourier, $\mathcal{B}_{i,j} = S$ donne $\mathcal{B}_{\mathbf{q}} = \sqrt{N} S \delta_{\mathbf{q},0}$ et l'équation d'auto-cohérence (2.35) indique que la totalité des bosons doivent condenser en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$:

$$\forall \mathbf{q} \neq \mathbf{0}, n_{\mathbf{q}} = 0\tag{2.45}$$

$$n_{\mathbf{q}=0} = 2NS\tag{2.46}$$

L'équation de la contrainte (2.34) est automatiquement satisfaite grâce aux conditions Eq. (2.46) ci-dessus. Pour que le ferromagnétisme soit solution du problème, il ne reste plus qu'à s'assurer que $\omega_{\mathbf{q}} - B_{\text{ext}}$ soit minimal en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ et le potentiel chimique vaudra alors $\lambda = \beta_0 - B_{\text{ext}}$. On calcule donc $\beta_{\mathbf{q}}$:

$$\beta_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{x}} J_{\text{multi}}(\mathbf{x}) \mathcal{B}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\tag{2.47}$$

$$= S \sum_{\mathbf{x}} J_{\text{multi}}(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\tag{2.48}$$

$$= S J_{\text{multi}}(\mathbf{q})\tag{2.49}$$

Dans le cas d'échanges à 2, 4 et 5 corps on trouve à l'aide de (1.11) et de (2.41) que l'expression de J_{multi} pour l'état ferromagnétique est :

$$J_{\text{multi}}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}^2 = 1)(2J_2 + J_4(12S^2 + 5) + J_5(52S^2 + 7)) \quad (2.50)$$

$$+ (1 - 4S^2) [\delta(\mathbf{x}^2 = 3)(J_4 + 2J_5) + J_5\delta(\mathbf{x}^2 = 4)] \quad (2.51)$$

Pour des spins $\frac{1}{2}$ cette fonction s'annule au delà du premier voisin :

$$J_{\text{multi}}(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}^2 = 1)(2J_2 + 8J_4 + 20J_5) \quad (2.52)$$

Et donc $J_{\text{multi}}(\mathbf{q})$ est minimum en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ si et seulement si $2J_2 + 8J_4 + 20J_5 < 0$. Ainsi, l'état ferromagnétique satisfait les équations d'auto-cohérence quand

$$J_2^{\text{eff}} < -4J_4 + 10J_5 \quad (2.53)$$

C'est aussi le résultat donné par un calcul d'ondes de spins [107]⁵. On peut enfin vérifier l'énergie de la solution ferromagnétique en remplaçant λ , $\beta_{\mathbf{q}}$ et $n_{\mathbf{q}}$ par leurs expressions dans (2.39). On retrouve bien sûr le résultat exact (auquel il convient éventuellement, dans le cas de spins $\frac{1}{2}$, d'ajouter la constante cte' de l'équation (2.42) :

$$E_{\text{ferro}} = N \left(-B_{\text{ext}} S + \frac{1}{2} S^2 \sum_{\mathbf{x}} J_{\text{multi}}(\mathbf{x}) \right) \quad (2.54)$$

2.3.3 L'algorithme

Le système d'équations à résoudre est donnée par (2.34), (2.35), (2.36) et (2.44). Ce système est résolu numériquement par itérations pour des réseaux de taille finie $N = 48 \cdots 432$, et par endroit jusqu'à $N = 1732$. Cette méthode est différente de celle utilisée habituellement. Plutôt que de se placer directement à $N = \infty$ et d'itérer le calcul numérique d'intégrales ($\sum_{\mathbf{q}}$) de fonctions singulières (condensation de Bose pour certains vecteurs d'onde où $\omega_{\mathbf{q}} = 0$) nous choisissons, comme certains auteurs [86], de travailler avec des sommes finies pour ensuite extrapoler les quantités physiques à $N = \infty$. L'avantage est qu'il n'est pas nécessaire de connaître a priori le(s) vecteur(s) d'onde où pourraient condenser les bosons, ni même de savoir s'il y a condensation ou si la solution possède une aimantation

⁵ On obtient également ce résultat en considérant, sur un échantillon de N sites, les $N-1$ états de spin $S = N/2 - 1$ avec $S^z = N/2 - 1$. Ils s'écrivent $|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle$ où \mathbf{k} est un des $N-1$ vecteurs d'onde $\neq \mathbf{0}$ et $|\mathbf{x}\rangle$ est l'état où tous les spins sont \uparrow à l'exception de \mathbf{x} . $|\mathbf{k}\rangle$ est état propre de H et son énergie vaut : $E/N = E_{\text{ferro}}/N + \frac{2f(\mathbf{k})}{N} [J_2^{\text{eff}} - 10J_5 + 2J_6 + 4J_4]$ avec $f(\mathbf{k}) = \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{u}) + \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}) + \cos(\mathbf{k}\cdot(\mathbf{u}-\mathbf{v})) - 3$. Puisque f varie entre 0 et -4 quand \mathbf{k} parcourt la zone de Brillouin, $J_2^{\text{eff}} - 10J_5 + 2J_6 + 4J_4 < 0$ est nécessaire pour que l'état ferromagnétique soit stable vis à vis des $|\mathbf{k}\rangle$.

totale (ferro- ou ferrimagnétisme). Ceci implique en particulier que les solutions trouvées ne brisent pas la symétrie $SU(2)$ de l'hamiltonien et que l'étude d'un ordre de Néel doit se faire par l'analyse des corrélations ou du facteur de structure $\|\vec{S}(\mathbf{q})\|$. Voici l'algorithme itératif employé pour résoudre les équations d'auto-cohérence :

- Initialisation : on part d'une configuration arbitraire (aléatoire par exemple) des $\mathcal{B}(\mathbf{x})$ et $\mathcal{A}(\mathbf{x})$. Remarquons qu'il suffit de considérer les seuls sites \mathbf{x} couplés à l'origine. On choisit également un décalage initial de potentiel chimique $\delta\lambda$ positif mais arbitraire, par exemple $\delta\lambda = 1$.
- *Première étape.* Calcul des $J_{\text{multi}}(\mathbf{x})$, $\alpha_{\mathbf{q}}$ et $\beta_{\mathbf{q}}$ avec (2.44).
- Calcul du potentiel chimique maximum pour lequel $\forall \mathbf{q} \omega_{\mathbf{q}} - |B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}}| > 0$:

$$\lambda_{\text{max}} = \text{Min}_{\mathbf{q}} \left(\beta_{\mathbf{q}} - \sqrt{|\alpha_{\mathbf{q}}|^2 + (B_{\text{ext}} + \delta\beta_{\mathbf{q}})^2} \right) \quad (2.55)$$

d'après (2.29).

- On pose $\lambda = \lambda_{\text{max}} - \delta\lambda$.
- Calcul du spectre $\omega_{\mathbf{q}}$ (2.29). On repère le où les p point(s) $\mathbf{q}_1 \dots \mathbf{q}_p$ où $\omega_{\mathbf{q}}^{\downarrow\uparrow}$ est minimum ⁶.
- On calcule le nombre d'occupation $n = n_{\mathbf{q}_1 \dots \mathbf{q}_p}$ qui satisfait la contrainte ⁷ Eq. (2.34) :

$$n = \frac{2S + 1 - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\beta_{\mathbf{q}} - \lambda}{\omega_{\mathbf{q}}} \right)}{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^p \frac{\beta_{\mathbf{q}_i} - \lambda}{\omega_{\mathbf{q}_i}}} \quad (2.56)$$

- Si n est négatif (non physique), on diminue le potentiel chimique en incrémentant $\delta\lambda$. Si n est positif (tendance à la condensation) on décrémente $\delta\lambda$.

De cette manière, $\delta\lambda$ et λ tendent de manière dichotomique vers la solution physique : soit $\delta\lambda > 0$ et $n = 0$ (et existence d'un gap, éventuellement dû à la taille finie), ou bien $\delta\lambda = 0$ et $n > 0$ (condensation de Bose). Pour les solutions antiferromagnétiques avec ordre de Néel on trouve, à taille finie, $\delta\lambda \sim 1/N$ quand $N \rightarrow \infty$. Ceci est en accord avec le comportement du gap de taille finie prédit par l'existence d'une tour des états (*cf.* § 3.3).

- Calcul de $\mathcal{B}(\mathbf{x})$ et $\mathcal{A}(\mathbf{x})$ avec les équations (2.32) et (2.33) et retour à la première étape.

⁶Remarquons que $\omega_{\mathbf{q}_i}^{\downarrow\uparrow} = 0 \Leftrightarrow \delta\lambda = 0$, il peut alors y avoir condensation.

⁷On fait ici l'hypothèse que la même quantité de bosons condense dans chaque mode. Ceci n'a aucune incidence sur les solutions d'aimantation nulle (puisque on y trouve $n = 0$) ni pour les hamiltoniens ferromagnétiques où $\omega_{\mathbf{q}}$ possède un unique minimum en $\mathbf{q} = 0$.

2.3.4 Résultats

La théorie décrite dans les paragraphes précédents a été appliquée au hamiltonien d'échange multiple sur réseau triangulaire avec des échanges à 2 et 4 corps. Voici les grandes lignes du diagramme de phases obtenu par cette méthode de champ moyen. Une partie de ces résultats est publiée [90].

Différents ordres de Néel

La résolution numérique des équations d'auto-cohérence conduit à la solution ferromagnétique dans le domaine fixé par (2.53). En dehors, les solutions sont de spin nul. À l'exception d'une petite fenêtre autour de $J_2^{\text{eff}}/J_4 = 3$ où *aucune solution n'est trouvée*, les états antiferromagnétiques présentent de l'ordre magnétique à longue portée, mais avec un paramètre d'ordre fortement réduit :

- 3 sous-réseaux (région Néel, Fig. 2.1).
- 4 sous-réseaux (région β , Fig. 2.2 et 2.3).
- configuration hélicoïdale des spins (région α). L'existence dans cette région d'un grand nombre de solutions d'énergies voisines ne nous a pas permis de déterminer sans ambiguïté la valeur du paramètre d'ordre, le vecteur de l'hélice changeant d'une taille à l'autre. La structure la plus stable pourrait toutefois être un état colinéaire à deux sous-réseaux avec un facteur de structure représenté Fig. 2.4. Cette solution particulière fait apparaître un pic (de hauteur $\mathcal{O}(N)$) au vecteur d'onde $\mathbf{q} = \mathbf{A}$ et une structure à $\mathbf{q} = \pm \frac{1}{2}\mathbf{B}$ qui met en évidence l'existence de corrélations *locales* modulées sur une distance de 6 sites. MOMOI *et al.* montrent que le système classique possède une dégénérescence importante [94] au point $J_2 = -2$ et J_4 , et il semble que, dans le voisinage de cet hamiltonien, le champ moyen ne lève pas suffisamment cette dégénérescence pour qu'une solution unique soit stabilisée. Toutefois, contrairement au cas classique, toutes les solutions trouvées sont d'aimantation nulle (pas de ferrimagnétisme).

Paramètre d'ordre

Nous calculons le facteur de structure par transformée de Fourier de la corrélation $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$:

$$\|\vec{S}(\mathbf{q})\|^2 = \left\langle \left\| \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \vec{S}_{\mathbf{x}} \right\|^2 \right\rangle = \sum_{\mathbf{x}} \langle \vec{S}_0 \cdot \vec{S}_{\mathbf{x}} \rangle e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \quad (2.57)$$

S'il y a un ordre de Néel à longue distance caractérisé par un vecteur d'onde \mathbf{q}_0 , alors $\|\vec{S}(\mathbf{q})\|^2 \sim N$ tandis que $\|\vec{S}(\mathbf{q} \neq \mathbf{q}_0)\|^2$ reste de l'ordre de 1. Une normalisation naturelle

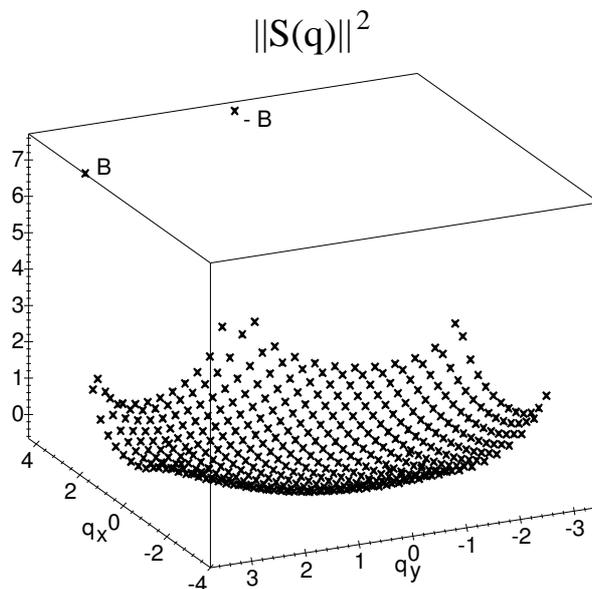


FIG. 2.1: $\|\mathbf{S}(\mathbf{q})\|^2$ pour $J_2/J_4 = 4$ et $N = 432$. C'est une solution de Néel à trois sous-réseaux puisque les deux maxima sont en $\mathbf{q} = \pm\mathbf{B}$. $\|\vec{S}(\mathbf{q})\|^2 \sim 7.55$, soit 13% seulement de la valeur classique.

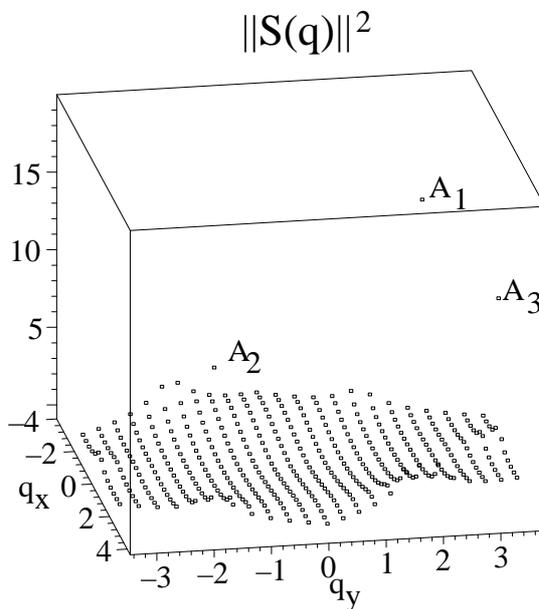


FIG. 2.2: Facteur de structure $\|\vec{S}(\mathbf{q})\|^2$ à $J_2/J_4 = 2$, $N = 432$. C'est une solution à 4 sous-réseaux puisque les 3 maxima ($\sim N$) sont en $\mathbf{q} = A_{i=1,2,3}$. Voir aussi Fig. 2.3.

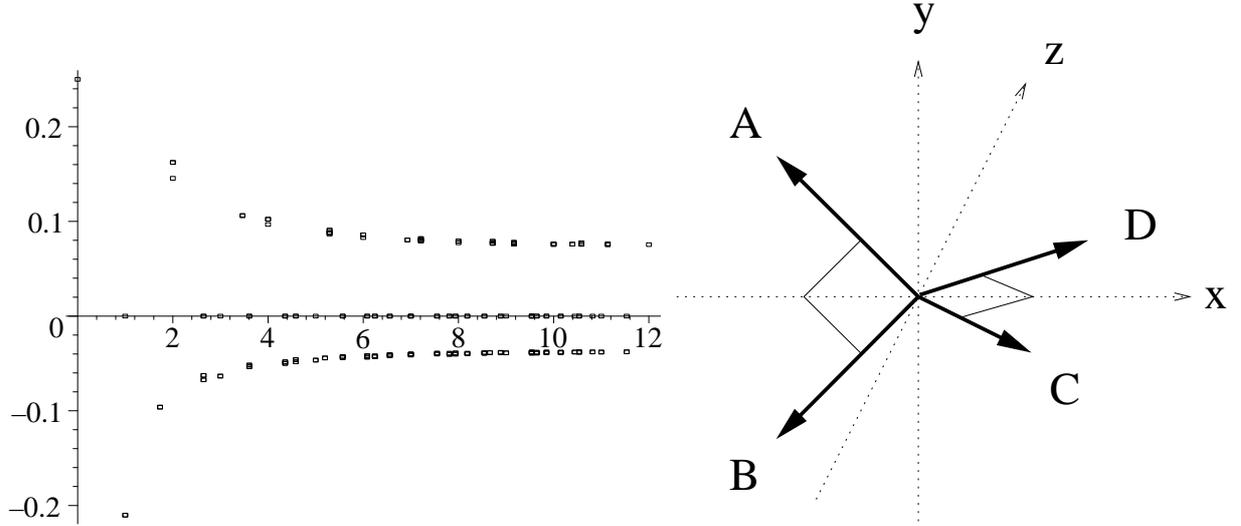


FIG. 2.3: Corrélation $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ à $J_2/J_4 = 2$, $N = 432$. $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ est représenté à **gauche** en fonction de la distance $|j-i|$. $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ vaut exactement 0 une ligne sur deux. La partie **droite** montre les aimantations des quatre sous-réseaux. (A, B) et (C, D) sont orthogonaux tandis que les angles $(A, C) = (A, D) = (B, C) = (B, D)$ valent $2\pi/3$.

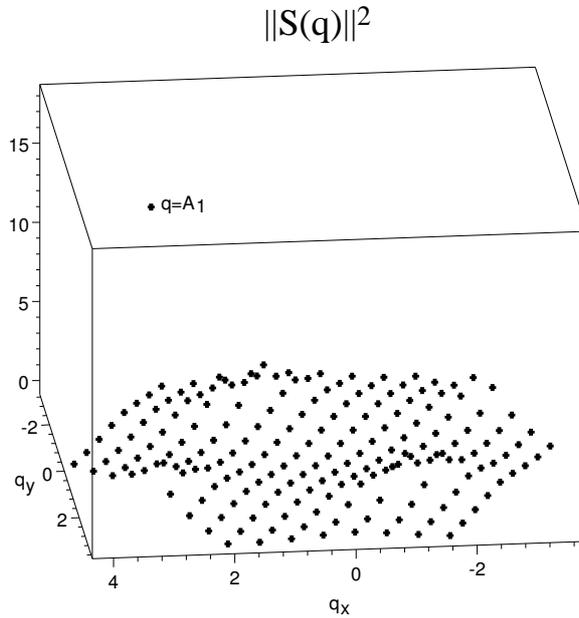


FIG. 2.4: $\|\vec{S}(\mathbf{q})\|^2$ en fonction de \mathbf{q} pour $J_2/J_4 = -2$, $N = 192$. État de Néel colinéaire à deux sous-réseaux. On distingue aussi deux maxima au voisinage de $\mathbf{q} = \pm \frac{1}{2} \mathbf{B}$ qui renseignent sur la période des corrélations locales.

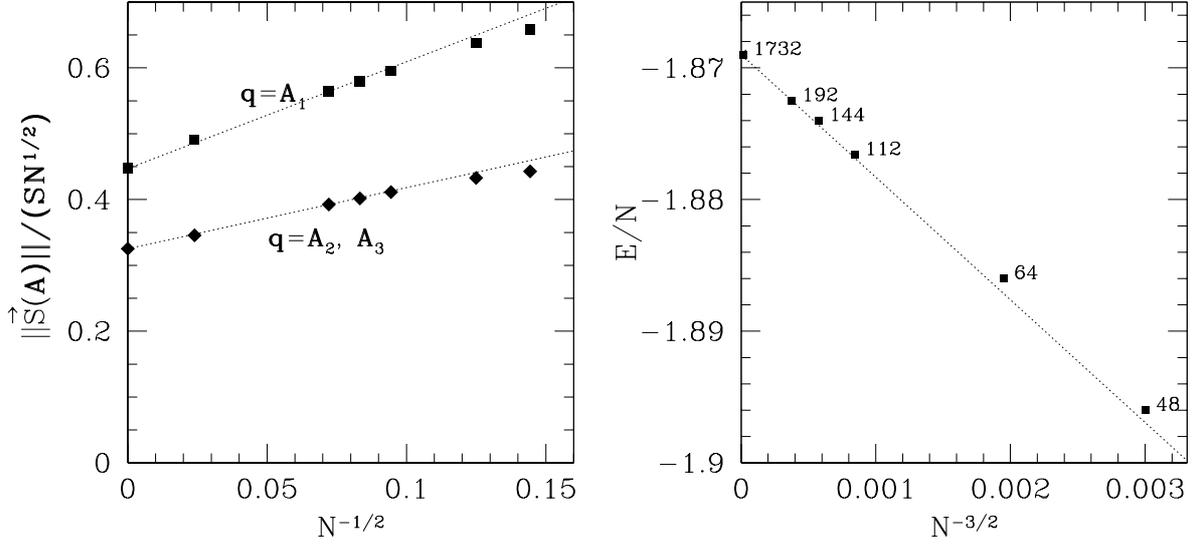


FIG. 2.5: Paramètre d'ordre et énergie par site à $J_2/J_4 = -1$ en fonction de la taille du système : $N = 48, 64, 112, 144, 192$ et 1732 .

est donc la valeur classique maximale de $\|\vec{S}(\mathbf{q}_0)\|^2$ dans un état hélice plane de vecteur d'onde \mathbf{q}_0 , c'est la normalisation ⁸ adoptée dans figure 2.6, qui montre les résultats des extrapolations à $N = \infty$ (pour $J_6 = J_5 = 0$) de $\|\vec{S}(\mathbf{q})\|$. À titre d'illustration, les paramètres d'ordre pour les tailles $N = 192, 144, 112, 64$ et 48 ainsi que la valeur extrapolée sont données Fig. 2.5 pour $J_2 = -1$ et $J_4 = 1$. Les corrections de taille finie au paramètre d'ordre sont en $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

Comme évoqué au paragraphe précédent, l'existence de plusieurs solutions quasiment dégénérées dans la région α ne nous a pas permis d'y extrapoler sans ambiguïté à $N = \infty$ les paramètres d'ordre. Toutefois, il s'agit à chaque fois de solutions ordonnées à longue distance. En revanche, au voisinage du point $J_2/J_4 = 3$, l'algorithme décrit à la section 2.3.3 ne converge pas, même pour de relativement petites tailles $N \simeq 50$. D'autre part, la variation d'amplitude du paramètre d'ordre dans les deux phases voisines (Fig. 2.6) est similaire à ce qui est observé dans d'autres problèmes où les fluctuations ouvrent une région désordonnée à la frontière de deux phases ordonnées. Il est par exemple admis que ce phénomène se produit dans le modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau carré [32, 121, 137]. Ceci suggère que nous avons à faire à une physique différente autour de $J_2/J_4 = 3$. Même si nous ne pouvons pas y exclure l'existence de solutions ordonnées. L'hypothèse d'une région où les seules fluctuations présentes au niveau du champ moyen suffisent à détruire l'ordre

⁸ $\|\vec{S}(\mathbf{q} = \mathbf{B})\|_{\max}^2 = \frac{1}{2}NS^2$ (maximal dans l'état de Néel à trois sous-réseaux) et $\|\vec{S}(\mathbf{q} = \mathbf{A}_i)\|_{\max}^2 = NS^2$ (maximal dans l'état de colinéaire à deux sous-réseaux).

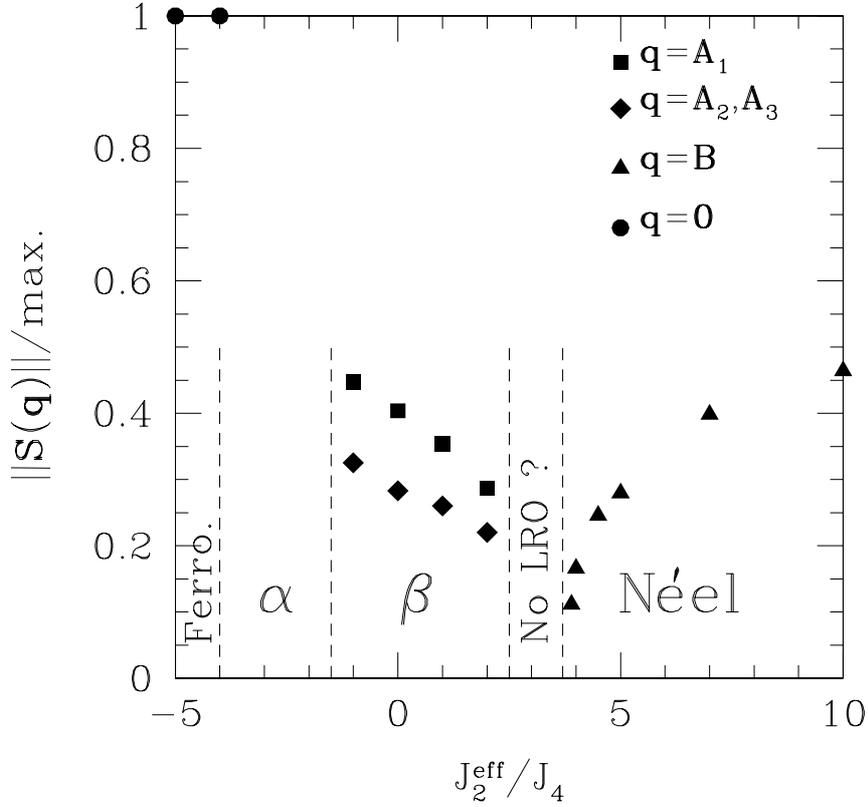


FIG. 2.6: Paramètre d'ordre $\|\vec{S}(\mathbf{q})\|$ en fonction de J_2/J_4 pour $J_5 = 0$. Dans la phase Néel $\|\vec{S}(\mathbf{q})\|$ est maximum pour $\mathbf{q} = \mathbf{B}_{1,2}$ (Fig. 2.1). Dans la région β $\|\vec{S}(\mathbf{q})\|$ a trois pics : Un premier pour $\mathbf{q} = \mathbf{A}_1$ et deux plus petits, identiques, en $\mathbf{q} = \mathbf{A}_{i=2,3}$ (la symétrie par rotation $\mathcal{R}_{2\pi/3}$ est brisée, voir Fig. 2.2 et Fig. 2.3).

est très vraisemblable.

Excitations

La théorie des bosons de Schwinger fournit le spectre de basse énergie du système. Dans les phases avec ordre de Néel que nous trouvons, le gap de taille finie tend vers zéro en $1/N$. La relation de dispersion $\omega(\mathbf{q})$ (*cf.* Eq. (2.28)) des quasi-particules de Bogoliubov est donnée Fig. 2.7 pour les paramètres $J_2 = -1$, $J_4 = 1$. À des effets de taille finie près, $\omega(\mathbf{q})$ s'annule linéairement en quatre points de la première zone de Brillouin : $\pm\mathbf{q}_1$ et $\pm\mathbf{q}_2$. Ceci peut être vérifié dans la partie haute de la figure 2.7. Ce ne sont pas directement les excitations physiques du système puisque les bosons a_{\uparrow} , comme les bosons P_{\uparrow} portent

un spin $\Delta S^z = \pm \frac{1}{2}$ (ce sont des *spinons*). Les excitations physiques sont des magnons qui portent un spin $\Delta S^z = 1$. Les impulsions que l'on peut obtenir en combinant deux spinons d'impulsions $\pm \mathbf{q}_1$ ou $\pm \mathbf{q}_2$ sont :

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_2 = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = \mathbf{A}_1$$

$$\mathbf{q} = 2\mathbf{q}_1 = 2\mathbf{q}_2 = \mathbf{A}_2$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 = \mathbf{A}_3$$

Ainsi, comme il se doit, on trouve que les modes de Goldstone associés à l'ordre de Néel antiferromagnétique à quatre sous-réseaux s'annulent aux quatre points $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ et $\mathbf{q} = \mathbf{A}_{i=1,2,3}$. Autre exemple, dans le cas d'un ordre à trois sous-réseaux, les spinons d'énergie nulle sont au voisinage de $\mathbf{q} = \pm \frac{1}{2}\mathbf{B}$, de sorte que l'on trouve un spectre d'ondes de spins qui s'annule en $\mathbf{q} = \mathbf{0}, \mathbf{B}$ et $-\mathbf{B}$.

Il est aussi possible d'évaluer le spectre des ondes de spins par un calcul de "Single Mode Approximation" (SMA). Si on note $|\Psi_0\rangle$ le fondamental, cette approximation consiste à calculer la valeur moyenne de l'hamiltonien dans l'état $|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum S_{\mathbf{x}}^+ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} |\Psi_0\rangle$. On considère alors $\Omega(\mathbf{k}) = \frac{\langle \Psi_{\mathbf{k}} | H_{MF} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle}{\langle \Psi_{\mathbf{k}} | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle} - \langle \Psi_0 | H_{MF} | \Psi_0 \rangle$. Ce calcul, effectué dans le cadre de la théorie de champ moyen des bosons de Schwinger, donne la structure correcte du spectre des ondes de spins.

2.3.5 Spin critique $S_c < \frac{1}{2}$

Dans le cas de l'hamiltonien d'Heisenberg sur un réseau bipartite, il est possible de calculer analytiquement la solution des équations d'auto-cohérence. Le résultat fait apparaître une valeur critique S_c du spin au dessus de laquelle le système possède le l'ordre de Néel à longue portée et brise la symétrie $SU(2)$, ce qui se traduit par une condensation de Bose⁹. S_c fournit donc une mesure approximative de l'importance des fluctuations dans le système.

Les solutions ordonnées de la section précédente ne doivent pas occulter le fait que les bosons de Schwinger sont aussi capables de décrire des phases désordonnées, soit dans la limite de grand N (voir par exemple SACHDEV [116] pour Heisenberg sur le réseau triangulaire ou kagome) ou dans leur formulation $SU(2)$ (par exemple, avec le modèle $J_1 - J_2 - J_3$ sur le réseau carré, CECCATTO *et al.* [28]). Les solutions ordonnées pour $S = \frac{1}{2}$ que nous trouvons indiquent que le spin critique est inférieur à $\frac{1}{2}$. Même si les spins $S < \frac{1}{2}$

⁹La valeur critique S_c est inférieure à $\frac{1}{2}$ pour le réseau carré : $S_c = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \iint_{-\pi}^{\pi} \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{1}{4}(\sin(q_x) + \sin(q_y))^2}} = 0.197$, ce qui en fait un système ordonné à température nulle pour toute valeur physique du spin $S \geq \frac{1}{2} > S_c$. En dimension trois sur un réseau cubique, le même calcul donne, comme attendu, une valeur beaucoup plus faible : $S_c = 0.078$ (voir par exemple HIRSCH et TANG [60]).

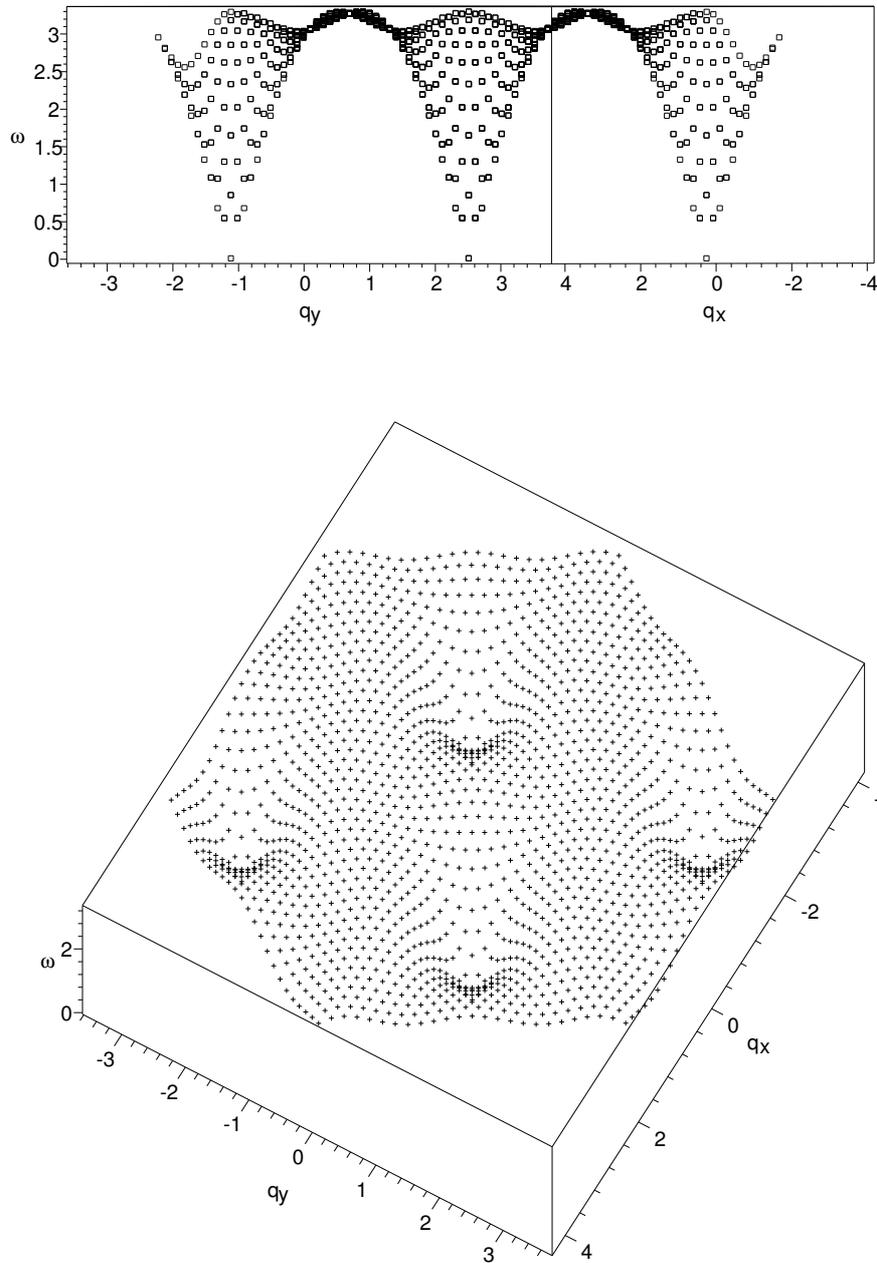


FIG. 2.7: Spectre $\omega(\mathbf{q})$ pour $N = 1732$ et $J_2/J_4 = -1$. Pour ces paramètres, le système possède le même ordre de Néel à quatre sous-réseaux que Fig. 2.2 et 2.3. $\omega(\mathbf{q})$ possède quatre minima (figure du bas) aux points $\pm\mathbf{q}_1$ et $\pm\mathbf{q}_2$. Ces quatre impulsions satisfont $2\mathbf{q} = \mathbf{A}_2$. \mathbf{A}_2 est l'impulsion de milieu de bord de zone, où le facteur de structure statique est maximum (Fig. 2.2). En créant *deux* spinons, de basse énergie, on trouve des branches de magnons qui s'annulent en $\mathbf{q} = 2\mathbf{q}_1 = 2\mathbf{q}_2 = \mathbf{0}$ et $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = \mathbf{A}_1$, $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_1 = \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_2 = \mathbf{A}_2$ et $\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2 = \mathbf{A}_3$.

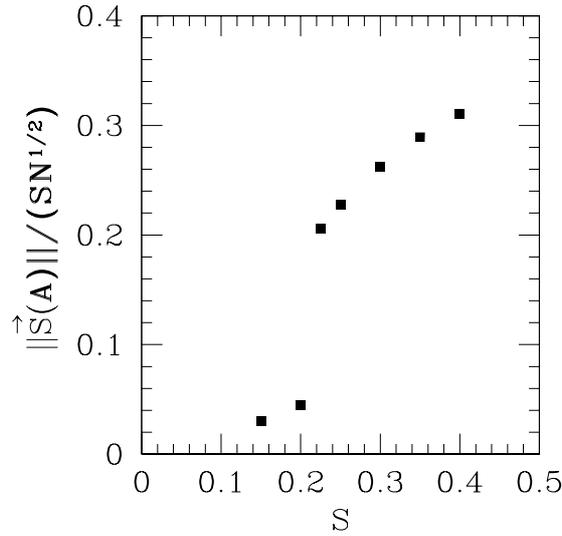


FIG. 2.8: $\|\vec{S}(\mathbf{A})\|^2$ en fonction du spin S . $J_2/J_4 = -2$ et $N = 432$.

n'ont pas de réalisation physique, et a fortiori pas dans l' ^3He , la valeur du spin en dessous de laquelle le système est un liquide de spins au niveau du champ moyen est une information utile pour identifier les régions susceptibles d'être, en réalité, désordonnées quantiquement à $T = 0$. Une étude précise demanderait une analyse des effets de taille et de dépendance dans les paramètres d'échange. Nous donnons ici quelques résultats préliminaires.

Il est nécessaire de normaliser les termes en S^2 et S^4 de l'hamiltonien d'échange multiple (Eq. 2.42) pour qu'ils gardent les mêmes poids relatifs à $S = \frac{1}{2}$ et à $S \neq \frac{1}{2}$, et garantir de retrouver le fondamental classique quand $S \rightarrow \infty$. Le paramètre d'ordre $\|\vec{S}(\mathbf{A})\|^2$ est représenté en fonction du spin S (Fig. 2.8.a). La brusque chute aux alentours de $S = 0.2$ signale la transition vers une solution non magnétique. La fonction de corrélation $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ présente une décroissance rapide en dessous du spin critique (Fig. 2.9).

2.3.6 Solution désordonnée pour $S = \frac{1}{2}$?

Nous avons obtenu *une* solution liquide de spins pour un spin $S = \frac{1}{2}$ au point $J_2/J_4 = 2$ et $N = 432$, et *d'énergie inférieure* ($E/N = .10$, $N = 432$) à la solution ordonnée ($E/N = 0.32$, $N = 432$). Ce résultat, obtenu seulement lors de la rédaction de ce mémoire, n'a pas encore été complètement exploité et demande des vérifications supplémentaires. Il n'a pas encore été possible numériquement de propager cette solution, où les corrélations spin-spin sont à courte portée, à d'autres valeurs des paramètres d'échange ni même à une autre taille de système. Ceci peut signifier que, dans notre approche itérative, le bassin d'attraction de cette solution est très réduit : seules quelques conditions initiales particulières permettent de converger itérativement vers cet état, tandis que les autres conduisent en général à la

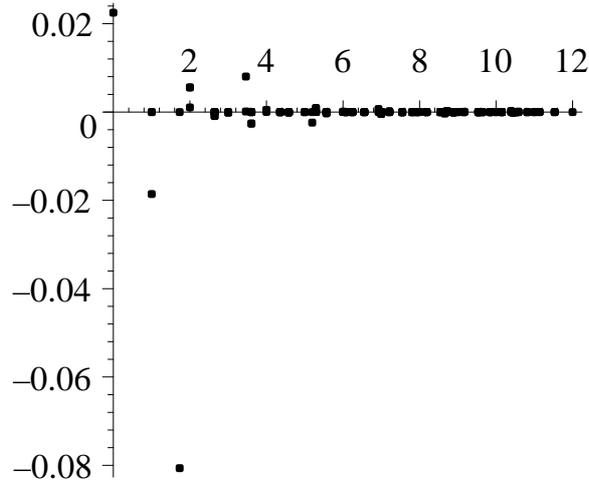


FIG. 2.9: Corrélation $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ en fonction de la distance $|j - i|$ pour un spin $S = 0.15$: ordre à courte portée ($J_2/J_4 = -2$, $N = 432$).

solution avec ordre de Néel. Ce résultat pourrait confirmer que la zone où aucune solution n'est trouvée (autour de $J_2/J_4 \simeq 3$, cf. Fig. 2.6) correspond bien à une phase liquide de spins. La différence d'énergie entre la solution désordonnée et celle avec ordre de Néel indique que l'étendue de la phase liquide de spins est sous-estimée. Ceci sera confirmé par les calculs de diagonalisations exactes dans chapitres suivants.

2.4 Conclusions

La théorie des bosons de Schwinger est une méthode de champ moyen polyvalente, capable de décrire avec un même formalisme des phases magnétiquement ordonnées ou non. Dans le cas de l'échange multiple, elle est une première approche simple au diagramme de phases qui met en avant l'importance de la frustration : compétition entre différentes phases, réduction des paramètres d'ordre par les fluctuations et possibilité d'un liquide de spins. Dans la mesure où les diagonalisations exactes montrent que la quasi totalité des phases ordonnées est détruite par les fluctuations, il a semblé naturel de porter les efforts sur cette dernière méthode, quantitativement plus fiable pour le modèle d'échange multiple, même si de nombreux points restent à explorer dans le cadre de ce champ moyen. Par exemple, l'approche itérative de résolution des équations est-elle adaptée aux phases quantiquement désordonnées ou peut-on la perfectionner ? Comment trouver un découplage des termes à quatre spins plus pertinent pour mieux rendre compte des résonances locales induites par l'échange à quatre corps ? Quelle est la nature des phases non magnétiques trouvées pour $S < S_c$, de leurs symétries, de leurs excitations ou de leur thermodynamique ?

Chapitre 3

Diagonalisations exactes et diagramme de phases

Comment diagonalise-t-on un hamiltonien de spin et que peut-on apprendre de l'analyse de son spectre ? Nous proposons ici une (brève) introduction à ces questions en donnant quelques éléments sur la technique des diagonalisations. Pour commencer avec l'hamiltonien d'échange multiple proprement-dit, nous présentons un premier résultat numérique relatif au spin du fondamental : l'absence de ferrimagnétisme.

Puis, et avant d'aborder l'étude plus complète des chapitres suivants, la notion de *tour des états d'ANDERSON* dans les antiferromagnétiques, est expliquée. Car s'il s'avère que les modèles considérés dans ce travail n'*ont pas* de tour, cette structure qui distingue les antiferromagnétiques ordonnés reste un prototype de spectre dont la connaissance peut être utile à l'étude d'un liquide de spins.

3.1 La méthode

Nous calculons les niveaux de basse énergie de l'hamiltonien d'échange multiple sur le réseau triangulaire Eq. (1.3) pour des systèmes contenant jusqu'à $N = 36$ spins. Jusqu'à $N = 21$ le calcul des 2^N énergies propres est possible, au delà, seuls les premiers états excités sont accessibles (plusieurs centaines avec $N = 24$ et un ou deux seulement pour $N = 36$) par l'algorithme de Lanczös avec les ordinateurs actuels. Nous donnons ici quelques éléments sur la technique employée.

3.1.1 Algorithme de Lanczös

Cet algorithme itératif permet de diagonaliser des matrices *hermitiennes*. Pour une matrice de dimension d , il faut d applications de l'hamiltonien H (et autant d'orthogonalisations) pour écrire la matrice de H dans une base orthonormale $\{|v_n\rangle\}_{n=1\dots d}$ où elle

est tridiagonale. Dans cette base, seuls les termes $\langle v_n | H | v_n \rangle = h_n$, $\langle v_{n+1} | H | v_n \rangle = a_n$ et $\langle v_{n-1} | H | v_n \rangle = a_{n-1}^*$ sont non nuls :

$$H = \begin{vmatrix} h_0 & a_0^* & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_0 & h_1 & a_1^* & \ddots & & \vdots \\ 0 & a_1 & h_2 & \ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & a_2 & \ddots & a_{d-3}^* & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & h_{d-2} & a_{d-2} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{d-2} & h_{d-1} \end{vmatrix} \quad (3.1)$$

On part d'un vecteur unitaire $|v_0\rangle$ aléatoire et on lui applique H . Le vecteur $H|v_0\rangle$ est décomposé en une composante parallèle à $|v_0\rangle$ et une orthogonale :

$$H|v_0\rangle = h_0|v_0\rangle + a_0|v_1\rangle \quad (3.2)$$

On répète l'opération sur $|v_1\rangle$:

$$H|v_1\rangle = h_1|v_1\rangle + a_1|v_2\rangle + a_0^*|v_0\rangle \quad (3.3)$$

où $|v_2\rangle$ est pris unitaire et orthogonal à $|v_0\rangle$ et $|v_1\rangle$. À l'étape 2, on a :

$$H|v_2\rangle = h_2|v_2\rangle + a_2|v_3\rangle + a_1^*|v_1\rangle \quad (3.4)$$

où $|v_3\rangle$ est à nouveau choisi unitaire et orthogonal à $|v_2\rangle$ et $|v_1\rangle$. Vérifions que $|v_0\rangle$ et $|v_3\rangle$ sont orthogonaux. Puisque H est hermitien $\langle v_0 | H | v_2 \rangle = (h_0 \langle v_0 | + a_0^* \langle v_1 |) | v_2 \rangle = 0$ et donc $\langle v_0 | v_3 \rangle = 0$. Les trois premiers vecteurs sont bien deux à deux orthogonaux. L'hermiticité de H permet de poursuivre la construction de cette base orthonormale en ne gardant à chaque étape que les deux vecteurs antérieurs :

$$\forall d > n \geq 1, \quad H|v_n\rangle = h_n|v_n\rangle + a_n|v_{n+1}\rangle + a_{n-1}^*|v_{n-1}\rangle \quad (3.5)$$

Sous cette forme tridiagonale, la matrice possède un polynôme caractéristique dont il est simple de déterminer les racines, c'est-à-dire les valeurs propres de H , par une méthode de type dichotomique.

L'intérêt principal de la méthode est que les n valeurs propres de la matrice tridiagonale générée à l'étape n convergent vers les n plus basses et plus hautes valeurs propres du spectre complet. Ainsi, même si la dimension d du sous-espace est trop grande pour qu'il soit numériquement envisageable d'effectuer d itérations (en pratique on ne peut pas en faire plus de quelques milliers), on dispose, à partir d'un n suffisant, des plus petites valeurs propres, qui sont celles d'intérêt pour la physique de basse énergie. À titre d'illustration, la représentation irréductible triviale $S^z = 0$ (c'est en général celle du fondamental pour un hamiltonien antiferromagnétique) du réseau triangulaire à 36 sites est de dimension supérieure à 10^6 , mais une centaine d'itérations seulement suffit pour obtenir l'énergie du fondamental avec une précision meilleure que 10^{-6} .

Erreurs d'arrondis

L'algorithme de Lanczös est instable numériquement. En raison des erreurs d'arrondis (la précision de la machine est de seize décimales), l'imprécision sur les valeurs propres finales croît de manière exponentielle avec la taille de la matrice. En pratique, ceci limite l'utilisation de la méthode dans sa forme brute à des matrices ayant moins d'une dizaine de milliers d'éléments ($\sim 100 \times 100$). Au delà, la précision sur les valeurs propres risque d'être assez aléatoire. Autre conséquence de cette instabilité : l'apparition de valeurs propres fantômes. Une valeur propre d'un état excité qui est convergée à la $n^{\text{ème}}$ itération peut finir par se "décrocher" quelques dizaines d'itérations plus tard et converger vers l'énergie de l'état du dessous. Il en résulte une apparente dégénérescence.

Nous traitons ces deux problèmes qui empêchent d'avoir accès au spectre des états très excités par :

- La projection sur l'espace de spin *total* S toutes les dix itérations. Ceci filtre les composantes parasites des vecteurs qui sont générées en dehors de l'espace $S^z = S$ qui nous intéresse (*cf.* § 3.1.2).
- La ré-orthogonalisation des vecteurs $|v_n\rangle$ à *tous* les précédents.

Cette méthode est très sûre, elle permet d'avoir le spectre complet d'une RI avec exactement le nombre d'itérations imposées par sa dimension. Le prix à payer est un temps de calcul et une place mémoire accrue.

3.1.2 Nombres quantiques

Pour réduire la dimension des matrices à diagonaliser, les codes employés ¹ traitent individuellement chaque représentation irréductible du groupe de symétrie de l'hamiltonien. Le gain en mémoire et temps de calcul est considérable et cela évite les problèmes de dégénérescences, difficiles à traiter avec l'algorithme de Lanczös. Enfin et surtout, l'utilisation de *toutes les symétries* donne beaucoup plus d'information que les seules énergies propres puisque nous disposons des nombres quantiques, magnétiques et spatiaux, de chaque état.

Nous ne donnons pas ici l'étude mathématique des représentations irréductibles du groupe de symétrie du réseau triangulaire (pour une discussion détaillée, voir BERNU *et al.*

¹L'essentiel des résultats de ce travail a été obtenu avec un code Fortran tournant sur les calculateurs vectoriels Cray C90 et C98 de l'Institut de Développement et de Recherche en Informatique Scientifique (IDRIS) du CNRS sous les contrats 960076/964091. Le code a été développé par Bernard BERNU, Laurent PIERRE et Philippe SINDZINGRE au Laboratoire de physique Théorique des Liquides. C'est aussi le code utilisé dans le travail de doctorat de Philippe LECHEMINANT [79]. L'étude de l'échantillon de 36 sites a, elle, été menée sur un Cray parallèle T3E-256 de l'IDRIS ainsi que sur le T3E-512 du Zentralinstitut für Angewandte Mathematik, Forschungszentrum à Jülich en Allemagne. Le code parallèle a été développé par Christian WALDTMANN dans le cadre de sa thèse de doctorat [139].

[18]), mais résumons les nombres quantiques utilisés pour les décrire. $S \in 0$ ou $\frac{1}{2}, \dots, \frac{N}{2}$ est le spin *total*, défini par $\vec{S}^2 = \left(\sum_i^N \vec{S}_i\right)^2 = S(S+1)$. $S^z \in -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}$ est la projection du spin sur l'axe z ; \mathbf{q} est l'impulsion, elle prend N valeurs dans la première zone de Brillouin du réseau triangulaire.

Nombres quantiques spatiaux

Viennent ensuite les nombres quantiques du groupe ponctuel. Ce groupe est engendré par les rotations et symétries axiales. Suivant les symétries du vecteur \mathbf{q} , certains peuvent ne pas être définis.

- $\mathcal{R}_{2\pi/3} \in \{1, j, j^2\}$ est la phase acquise par la fonction d'onde lors d'une rotation de $2\pi/3$ autour d'un site du réseau. Cette phase n'est définie que si l'impulsion \mathbf{q} est un vecteur invariant par $\mathcal{R}_{2\pi/3}$ c'est-à-dire seulement si $\mathbf{q} \in \{\mathbf{0}, \pm\mathbf{B}\}$.
- $\mathcal{R}_\pi = \pm 1$ est la phase acquise par la fonction d'onde lors d'une rotation de π autour d'un site du réseau. Cette phase n'est définie que si l'impulsion $\mathbf{q} = -\mathbf{q}$. Ce n'est le cas que pour les vecteurs $\mathbf{q} \in \{\mathbf{0}, \mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3\}$.
- $\sigma = \pm 1$, parité de la fonction d'onde par rapport à l'axe de son impulsion, n'est définie que si \mathbf{q} se trouve sur un axe de symétrie du réseau triangulaire. C'est le cas pour les vecteurs d'onde $\mathbf{q} = \lambda\mathbf{B}$ ou $\mathbf{q} = \lambda\mathbf{A}_i$ avec $\lambda \in [-1, 1]$.

Spin total

Techniquement, S est traité d'une manière différente des autres nombres quantiques. Comme il est difficile de construire une base explicite de $S = S_0$ fixé (contrairement aux autres nombres quantiques), nous travaillons dans une base de $S^z = S_0$ et fixons le spin total en projetant les vecteurs dans le sous-espace S_0 en appliquant le projecteur $\prod_{S \neq S_0} \frac{\vec{S}^2 - S(S+1)}{S_0(S_0+1) - S(S+1)}$. La nature instable de l'algorithme de Lanczös vis-à-vis des erreurs numériques d'arrondis force à effectuer cette projection régulièrement au cours des itérations (typiquement toutes les 10 itérations), même si, mathématiquement, la conservation du spin total par l'hamiltonien $[H, \vec{S}^2] = 0$ permettait de ne faire qu'une seule projection du vecteur initial. Par ailleurs, ces projections régulières combinées aux orthogonalisation (§ 3.1.1) assurent une protection complète contre les erreurs d'arrondis et les valeurs propres fantômes.

3.2 Ferromagnétisme ou spin nul

Pour $N = 19$ nous balayons l'espace des paramètres $J_2/J_4, J_5/J_4, J_6/J_4$ afin de d'évaluer l'effet des fluctuations quantiques sur le diagramme de phases de l'hamiltonien Eq. (1.3),

et plus particulièrement sur l'étendue de la zone ferromagnétique. La première information apportée par un spectre est le spin du fondamental. Il apparaît dans le cas de l'hamiltonien d'échange multiple qu'il est soit nul, soit maximal. En fait, seule une étroite région dans l'espace des J , située très près de la frontière, donne sur $N = 16$ un fondamental de spin $S = 1$ ou $S = 2$ mais ceci est un effet de taille finie et la transition vers le ferromagnétisme² est du premier ordre à $T = 0$.

La figure 3.1 représente la ligne de transition pour différentes valeurs de J_6/J_4 pour $N = 19$ sites. Pour l'obtenir, nous calculons l'énergie du fondamental du secteur $S = 0$ (ou $\frac{1}{2}$ si N est impair) pour une cinquantaine de points près de la frontière et nous ajustons ("fit" par moindre carré) cette fonction par un polynôme homogène de degré 2 en J_2/J_4 , J_5/J_4 et J_6/J_4 . L'énergie de l'état ferromagnétique a la même valeur que celle du système classique $\frac{E_{S=N/2}}{N} = 3J_2^{\text{eff}} + 6J_4 - 12J_5 + 2J_6$. La ligne de transition est obtenue en résolvant $E_{S=0} = E_{S=N/2}$. Ces courbes sont, à quelques pour cent près, une bonne approximation du cas $N = \infty$, puisque seul l'effet de taille sur l'énergie du fondamental $S = 0$ influe. Deux exemples de spectres du côté ferromagnétique de la frontière se trouvent en haut de la figure 3.2 tandis que deux spectres dont la plus basse énergie est dans le secteur $S = 0$ apparaissent en bas. Les diagonalisations indiquent que les fondamentaux $S = 0$ ont une énergie inférieure à l'énergie de la phase classique correspondante. Ce gain énergétique dû aux fluctuations réduit légèrement l'étendue de la phase ferromagnétique au profit des états de spin nul dans le cas quantique³. Le problème est maintenant de savoir dans quelle région du diagramme se trouve l'hamiltonien d'échange multiple pertinent pour la seconde couche d'³He.

La deuxième couche d'³He

La comparaison avec les valeurs des J_n (Table 1.3) obtenues par ROGER *et al.* [109] indique que l'hamiltonien effectif traverse la frontière : le système est dans la phase $S = 0$ aux faibles densités et dans la phase ferromagnétique à forte densité. Compte-tenu des barres d'erreur sur la détermination des fréquences d'échange, nous ne pouvons pas déterminer très précisément la densité de transition $\rho_2 \simeq 6.8 \pm 0.4 \text{ nm}^{-2}$. Cette information doit de toute façon être prise avec précaution. Utiliser le modèle d'échange multiple avec un seul jeu de fréquences d'échange à chaque densité suppose que le système soit homogène. Or il

²Les $N+1$ états de spin maximum $S = N/2$ et $S^z = -N/2 \dots N/2$ sont états propres de tout modèle à symétrie $SU(2)$, et des hamiltoniens d'échange en particulier. Ils sont dégénérés et l'énergie possède la valeur classique. Les premières excitations d'un système ferromagnétique sont des magnons : $|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle$ et leur relation de dispersion est connue exactement (voir note 5 page 27). Le ferromagnétisme quantique n'est donc de ce point de vue pas très différent du cas classique et le spin $S = N/2$ du fondamental suffit à l'identifier.

³Cet effet est probablement amplifié par le fait que nous ne connaissons pas la frontière exacte dans le cas classique et que l'approche variationnelle ne peut que surestimer la région ferromagnétique.

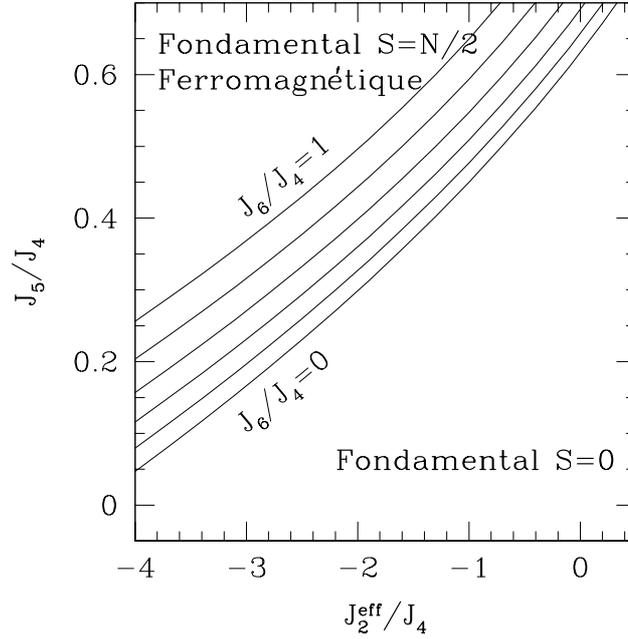


FIG. 3.1: Lignes de transition à $T = 0$ entre ferromagnétisme et une phase où le fondamental est de spin $S = 0$. Six valeurs de J_6/J_4 : $0, \frac{1}{5}, \frac{2}{5}, \frac{3}{5}, \frac{4}{5}, 1$.

n'existe d'indications d'une structure triangulaire et uniforme qu'aux plus basses ⁴ et aux plus fortes densités ⁵.

Le diagramme de phases aux densités intermédiaires n'est pas encore élucidé [50, 110] mais des éléments suggèrent une coexistence de phases solides de densités différentes [15, 120]. L'utilisation d'un unique hamiltonien d'échange ne serait plus justifiée dans une telle situation, puisque les fréquences d'échange dépendent fortement de la densité. La coexistence d'une phase ferromagnétique et d'une phase moins dense où les échanges placeraient l'hamiltonien magnétique dans la région $S = 0$ du diagramme Fig. 3.1 fournit par exemple une interprétation simple aux données de SHIFFER *et al.* [120] sur le comportement linéaire de l'aimantation à température nulle en fonction de la densité.

⁴La structure commensurée $\rho_2/\rho_1 = 4/7$ proposée par ELSER [41] est observée [51] pour une densité voisine de $\rho_1 + \rho_2 = 17.8 \text{nm}^{-2}$. Elle a fait l'objet d'études théoriques [1, 110] et a aussi été proposée pour les films $^3\text{He}/^4\text{He}$ [26].

⁵GODFRIN et RAPP [50] font une revue détaillée de ces questions de structure des couches adsorbées. Il est admis que la structure est triangulaire et incommensurable pour $\rho_{\text{tot}} > 26 \text{nm}^{-2}$.

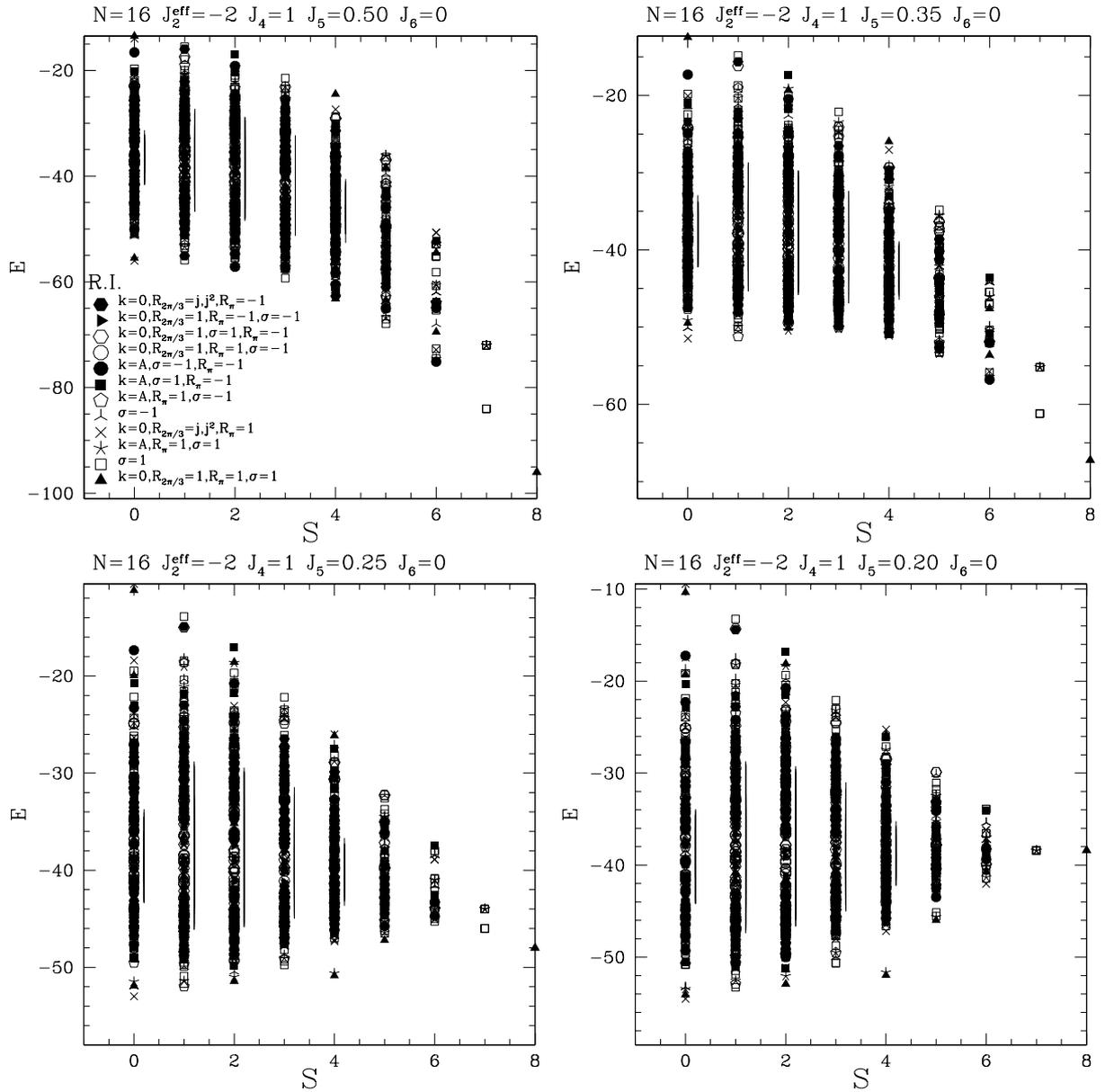


FIG. 3.2: Spectres $N = 16$ ferromagnétiques (haut) et non ferromagnétiques (bas) pour $J_2/J_4 = -2$ et $J_5/J_4 = 0.5, 0.35, 0.25$ et 0.20 . Les symboles indiquent les nombres quantiques spatiaux. σ désigne la symétrie axiale par rapport à l'impulsion. $\mathcal{R}_{2\pi/3}$ la rotation de $2\pi/3$ autour d'un site et \mathcal{R}_π la rotation de π . Quand l'impulsion n'est pas spécifiée il s'agit d'un vecteur $\mathbf{k} \neq \mathbf{0}, \neq \mathbf{A}_i$. L'état ferromagnétique (\blacktriangle à $S = 8$) est état propre dans tous les cas. Son énergie vaut $E(S = 8) = N(3J_2 + 6J_4 + 12J_5 + 2J_6)$.

3.3 Antiferromagnétisme - Tour des états d'ANDERSON

Le spin du fondamental informe si le système est ferromagnétique ($S = N/2$), paramagnétique ou antiferromagnétique ⁶ ($S = 0$) ou si le système est ferrimagnétique ($S = mN/2$, $1 > m > 0$). Le cas le plus riche est celui où $S = 0$, c'est celui où l'on trouve l'antiferromagnétisme (ou ordre de Néel) et les liquides de spins.

Un antiferromagnétique est un système qui s'ordonne en sous-réseaux au sein desquels les spins sont ferromagnétiques. Les fluctuations quantiques réduisent l'aimantation des sous-réseaux mais l'image classique est qualitativement correcte si cette aimantation reste macroscopique. La différence fondamentale avec le ferromagnétisme est qu'*un état de Néel n'est pas un état propre de H* . Il brise à la fois la symétrie $SU(2)$ et l'invariance par translation de H . ANDERSON [7] remarque en 1954 qu'un état de Néel ne peut donc être obtenu que par combinaison linéaire de plusieurs états propres de l'hamiltonien appartenant à des représentations irréductibles différentes du groupe de symétrie, et en particulier de spin total S différents. Les états propres de H à partir desquels on peut construire les états de Néel constituent une *tour d'états* s'ils sont dégénérés avec le fondamental à la limite thermodynamique. Pour un système de grande taille, le coût énergétique de ce paquet d'onde est faible. Puisque les écarts entre les niveaux d'énergie qui le composent décroissent avec la taille de l'échantillon, les composantes du paquet d'onde se déphasent d'autant plus lentement que le système est grand. Autrement dit, l'état de Néel possède une "durée vie" qui croît avec la taille du système. Les premières caractérisations de ces niveaux d'énergie et de leur comportement à taille finie dans les antiferromagnétiques quantiques sont dues, notamment, à NEUBERGER et ZIMAN [97] et FISHER [44]. Les nombres quantiques et dégénérescences auxquels obéissent les états de la tour dans le cas du réseau triangulaire sont discutés par BERNU *et al.* [18, 20] et LECHEMINANT *et al.* [79–81]. Quelques éléments de théorie des groupes appliqués à cette question se trouvent dans l'annexe A.

Quel que soit l'hamiltonien, les états ayant les nombres quantiques requis pour la brisure de symétrie de tout ordre de Néel existent *quelque part* dans le spectre. La question est donc de savoir si ce sont ces états qui sont les niveaux de basse énergie et s'ils suivent les bonnes lois d'échelle quand la taille du système augmente. C'est la symétrie et la dynamique libre du paramètre d'ordre qui déterminent comment se comportent les énergies des états de la tour. Le résultat est le suivant. Le fondamental du secteur de spin S doit avoir une énergie :

$$E(S) \simeq \frac{S(S+1)}{2N\chi_0} = \frac{\vec{S}^2}{2N\chi_0} \quad (3.6)$$

où χ_0 est la susceptibilité magnétique par spin du système. Cette énergie peut être comprise comme l'énergie cinétique d'un rotateur d'inertie $N\chi_0$ et de moment cinétique \vec{S} . Ce rota-

⁶Nous réservons le terme *antiferromagnétique* à un système magnétiquement ordonné, et choisissons d'appeler *paramagnétique* tout système sans ordre magnétique à longue portée.

teur est constitué des vecteurs aimantation des sous-réseaux ferromagnétiques (Fig. 3.3). C'est parce que ces vecteurs sont de longueur proportionnelle à la taille du système que l'inertie du rotateur est macroscopique $\sim N$. Si l'on substituait le moment cinétique par une impulsion, et la susceptibilité χ_0 par une masse m , ce terme est l'analogie directe de l'énergie cinétique du centre de masse d'un solide de N atomes de masse m : $E = \frac{p^2}{Nm}$. La brisure spontanée de l'invariance par rotation dans un antiferromagnétique devient analogue de la brisure de l'invariance de translation dans un solide (le centre de masse est localisé). De même que l'état $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ ne suffit pas à décrire la fonction d'onde d'un solide macroscopique localisé, le fondamental absolu $S = 0$ ne suffit pas à décrire un état de Néel.

Plusieurs approches permettent d'obtenir ce résultat (par exemple le modèle σ non linéaire [11], ou plus simplement, la décomposition de l'hamiltonien expliquée annexe A, qui conduit à un modèle sans fluctuation exactement soluble). À S fixé, ces états s'effondrent sur le fondamental avec une vitesse $1/N$, c'est-à-dire plus rapidement que le magnon d'énergie la plus basse ⁷.

Quant à la dégénérescence du niveau $E(S)$, - elle n'est qu'approchée à taille finie -, nous rappelons en annexe A qu'elle est donnée par une règle d'addition des moments cinétiques (c'est le nombre de secteurs de spin S que l'on obtient en couplant les p spins $\frac{N}{2p}$ des p sous-réseaux).

La tour d'ANDERSON offre une signature particulièrement visible de l'ordre de Néel, même sur de petits systèmes ⁸. Considérons à titre d'exemple le spectre du modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau triangulaire pour $N = 16$ sites et $J_2/J_1 = 0.8$ représenté Fig. 3.4. Pour cette valeur du rapport J_2/J_1 le système s'ordonne à la limite thermodynamique en deux sous-réseaux et les spins forment un état colinéaire (Fig. 3.3). La tour d'ANDERSON est constituée de la famille d'états qui sont nettement séparés du continuum des excitations et leurs énergies sont linéaires en $S(S+1)$, conformément à l'Eq. (3.6). Regardons maintenant les propriétés spatiales de ces états. L'état colinéaire considéré étant invariant par toute translation de deux pas dans n'importe quelle direction, il ne peut être la combinaison linéaire que d'états d'impulsions vérifiant $e^{2i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} = 1$ pour tout vecteur \mathbf{x} du réseau. Les 4 vecteurs d'onde satisfaisant cette condition sont $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ et $\mathbf{q} = \mathbf{A}_i$ (Fig. 1.5). On peut vérifier sur le spectre que ce sont effectivement les seules impulsions présentes dans la tour des états. Une analyse précise [80] des symétries de cet état colinéaire ⁹ permet de prédire

⁷Le magnon le moins énergétique a une énergie totale $E_{\min} = c|\mathbf{k}_{\min}|$, où c est la plus petite vitesse d'onde de spins et $\mathbf{k}_{\min} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$ le plus petit vecteur d'onde permis par les conditions aux bords sur le système de taille finie. Ceci donne $E_{\min} \simeq \frac{c}{\sqrt{N}}$.

⁸À condition que les conditions aux limites ne frustrant pas l'ordre. Si l'ordre n'est pas frustré, alors ce résultat découle de la faiblesse des fluctuations quantiques sur les petits systèmes où l'espace des états est réduit.

⁹La taille $N = 16$, dont le spectre est présenté Fig. 3.4, n'est pas suffisante pour que les fluctuations quantiques sélectionnent parmi les ordres antiferromagnétiques à *quatre* sous-réseaux ceux qui sont des états colinéaires à *deux* sous-réseaux. Ces fluctuations augmentent avec la taille de l'échantillon, c'est à

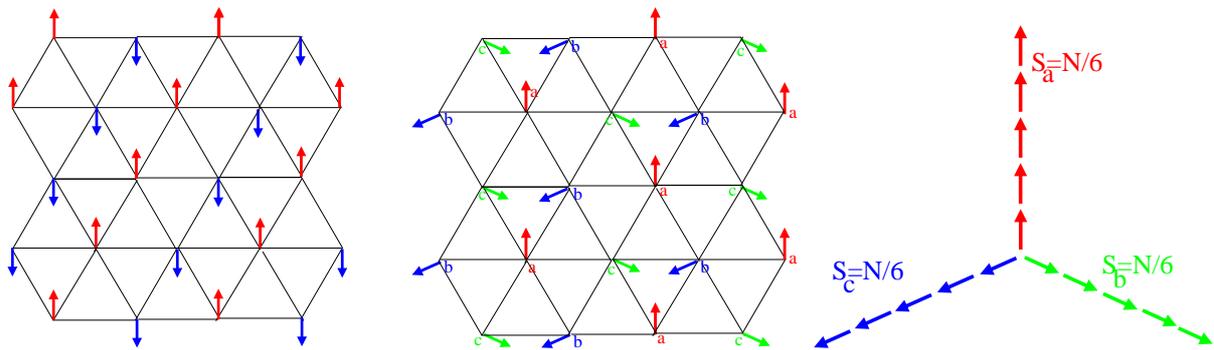


FIG. 3.3: États de Néel à deux (gauche) et trois (milieu) sous-réseaux. À droite sont représentés les 3 spins macroscopiques formés par les moments magnétiques des sous-réseaux de l'état de Néel à 120 degrés (milieu).

tous les états qui y apparaissent. Un autre exemple de spectre de système ordonné est donné au chapitre suivant (Fig. 4.3).

dire quand on accroît le nombre de modes de grande longueur d'onde. La sélection de l'ordre colinéaire est manifeste dès la taille $N = 28$, dont le spectre de basse énergie est donné Réf. [80].

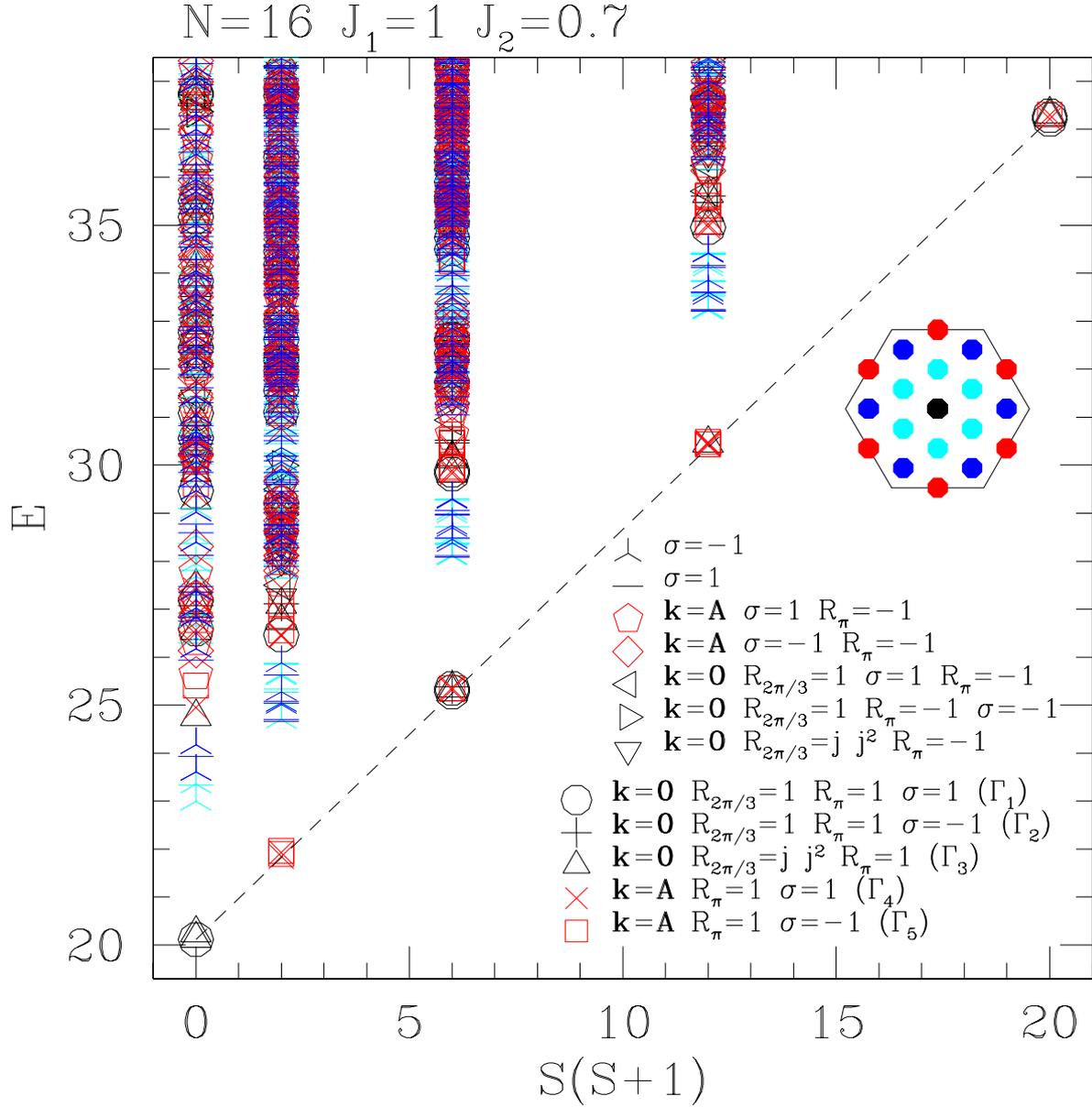


FIG. 3.4: Spectre avec tour des états, modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau triangulaire ($N = 16$). Les symboles légendent les nombres quantiques spatiaux. La ligne en pointillés relie les états de la tour et permet de vérifier que leurs énergies sont proportionnelles à $S(S+1)$. Pour cet échantillon $N = 16$, les symétries des états de la tour sont celles d'un ordre antiferromagnétique à quatre sous-réseaux (RI $\Gamma_{1,\dots,5}$). LECHÉMINANT *et al.* [80] ont montré comment la solution colinéaire à deux sous-réseaux (qui est un cas particulier de solution à quatre sous-réseaux) est sélectionnée pour les plus grandes tailles ($N = 28$).

Chapitre 4

Absence d'ordre à longue distance

Le chapitre précédent a mis en évidence une gamme de fréquences d'échange où les spectres de tailles finies possèdent un fondamental de spin nul $S = 0$. La question posée ici est la nature de cette phase. Nous commençons par montrer que l'hypothèse d'ordre de Néel à température nulle est exclue par l'absence de tour des états d'ANDERSON. Cette structure spectrale (présentée § 3.3) signale la brisure spontanée de la symétrie $SU(2)$ et de symétries d'espace dans un antiferromagnétique par le biais de quasi dégénérescences dans les spectres de taille finie. Nous nous concentrons sur un point particulier du diagramme de phases, le point $J_2/J_4 = -2$. Les spectres y offrent une régularité d'un réseau à l'autre qui permet une meilleure maîtrise des effets de tailles. L'absence d'ordre magnétique à longue portée conduit alors à examiner différentes fonctions de corrélations, dimère-dimère notamment, afin de détecter d'éventuels ordres non magnétiques dans ce liquide de spins. La présence d'un gap de spin est montrée section 4.3 et confirme l'absence d'ordre magnétique. Toutes les données suggèrent que la physique de basse énergie est essentiellement *locale* et dominée par une échelle de longueur finie et petite.

Une grande partie des résultats exposés dans ce chapitre correspondent à la référence [92].

4.1 Absence de tour des états

4.1.1 Conditions aux bords périodiques

Pour un grand nombre de valeurs des J_n dans la région $0 \leq J_6 \lesssim J_5 \lesssim |J_2|$ et $-5 \lesssim J_2/J_4 \lesssim 1$ (plus d'une trentaine) nous calculons le spectre sur un échantillon à 16 sites. Certains points ont aussi été étudiés avec d'autres tailles ($N = 19, 20$ ou 28) ou avec des conditions aux bords tournées, discutées dans la section suivante. Aucun de ces spectres ne possède parmi ses états de basse énergie toutes les représentations irréductibles caractéristiques d'une tour des états correspondant à un ordre à 2, 3 ou 4 sous-réseaux. Aucun non plus n'exhibe de famille d'états avec une énergie $E \sim S(S+1)$ (Eq. 3.6) détachée

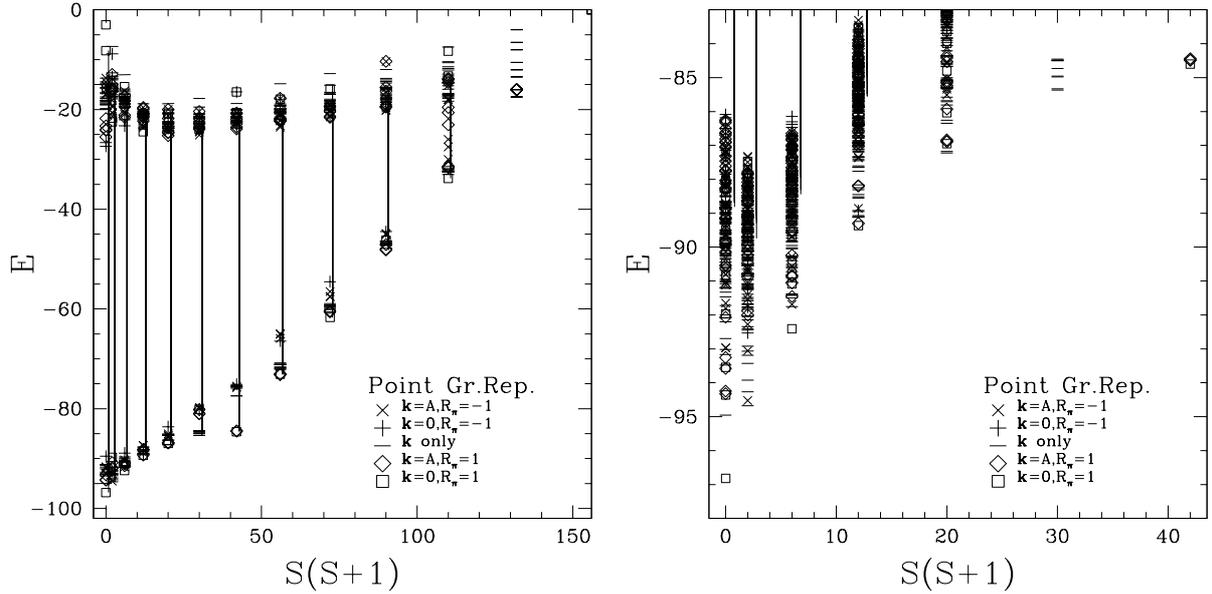


FIG. 4.1: Spectre sans tour des états $J_2 = -2$, $J_4 = 1$, $N = 24$. Le groupe d'espace de ce système à 24 spins (parallélogramme 6×4) est engendré par les 24 translations et la rotation d'angle π par rapport à un site. Le fondamental est non dégénéré et appartient à la représentation triviale du groupe d'espace ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$ et $\mathcal{R}_\pi = 1$). Seul le fondamental de chaque représentation irréductible (RI) est dessiné dans la vue de gauche. Les lignes verticales signalent les intervalles d'énergie où tous les états ne sont pas indiqués.

des autres excitations. Un spectre à $J_4 = 1$, $J_2 = -2$ pour 24 sites est représenté Fig. 4.1. Deux caractéristiques remarquables de ce spectre sont génériques aux hamiltoniens où J_4 est important et où $J_2 \lesssim 0$. Au lieu d'un comportement de E linéaire en $S(S+1)$ on observe une concavité pour $S \leq N/4$ et un changement de pente à $N/4$. Ceci a pour conséquence un plateau d'aimantation à $S = N/4 = S_{\max}/2$ qui est discuté au chapitre 7. Le deuxième point remarquable est l'écart d'énergie important entre le fondamental $S = 0$ et le fondamental $S = 1$ ainsi que la très faible densité d'états au dessus du fondamental dans le secteur singulet.

Ces observations conduisent à l'hypothèse que les phases antiferromagnétiques prédites classiquement (§ 1.3) ou par la théorie des bosons de Schwinger (§ 2.3.4) sont, à l'exception de l'ordre de Néel à trois sous-réseaux pour $J_4 \simeq 0$, détruites par la frustration de l'échange à quatre corps et les fluctuations quantiques. Un scénario pour le diagramme de phases est proposé figure 4.2 ainsi qu'un rappel des frontières des phases classiques. Nous n'avons pas exploré numériquement la transition de l'état de Néel à trois sous-réseaux vers le ferromagnétisme. Le schéma Fig. 4.2 est à cet égard largement spéculatif, il montre une phase désordonnée (ligne $J_2 - J_5$) mais une transition du premier ordre est tout aussi

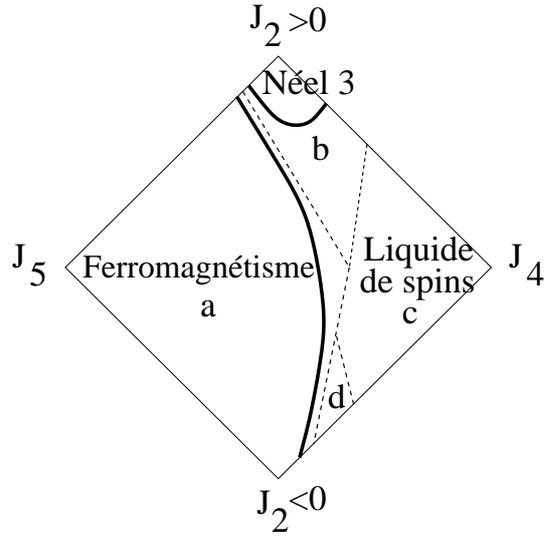


FIG. 4.2: Proposition de diagramme de phases du modèle d'échange multiple $J_2 - J_4 - J_5$ sur le réseau triangulaire. Le coin droit est le modèle à J_4 pur, celui de gauche le modèle de J_5 pur. En bas et en haut se trouvent les modèles d'Heisenberg ferro- et antiferromagnétiques. **Lettres et traits en pointillés** : phases classiques. **a** : ferromagnétique. **b** : État de Néel à trois sous-réseaux. **c** : État de Néel à quatre sous-réseaux. **d** : Hélice incommensurable, état à grand nombre de sous-réseaux ou état *uud* ferrimagnétique [77]. **Traits pleins** : scénario pour les phases quantiques.

possible.

La question de la stabilité de l'ordre de Néel à trois sous-réseaux au voisinage de l'hamiltonien d'Heisenberg $J_2 > 0$ vis-à-vis d'une perturbation J_4 ou J_5 est également ouverte. Les résultats préliminaires dont nous disposons montrent que l'état de Néel est rapidement détruit par l'échange à quatre corps. Les figures 4.3 et 4.4 illustrent la disparition de la tour d'ANDERSON quand on "branche" une perturbation $J_4/J_2 = 0.1$. On constate dans le spectre Fig. 4.4 que ce sont les états constituant la tour dans le spectre Fig. 4.3 qui sont les plus affectés par la perturbation. Ils sont poussés à plus haute énergie dans le continuum d'excitations. L'éventualité qu'un couplage J_4 infinitésimal suffise à supprimer l'ordre à longue distance n'est pas exclue. Cette question est importante si on se rappelle que les interactions à quatre corps peuvent être engendrées par l'intégration de degrés de liberté non magnétiques dans des systèmes a priori décrits par un hamiltonien d'Heisenberg sur réseau triangulaire. Une étude quantitative du type de celle menée par LECHEMINANT *et al.* [81] doit permettre de déterminer le J_4 critique, en suivant l'évolution du nombre d'états de la tour parmi les niveaux de basse énergie en fonction de J_4/J_2 et de la taille du système.

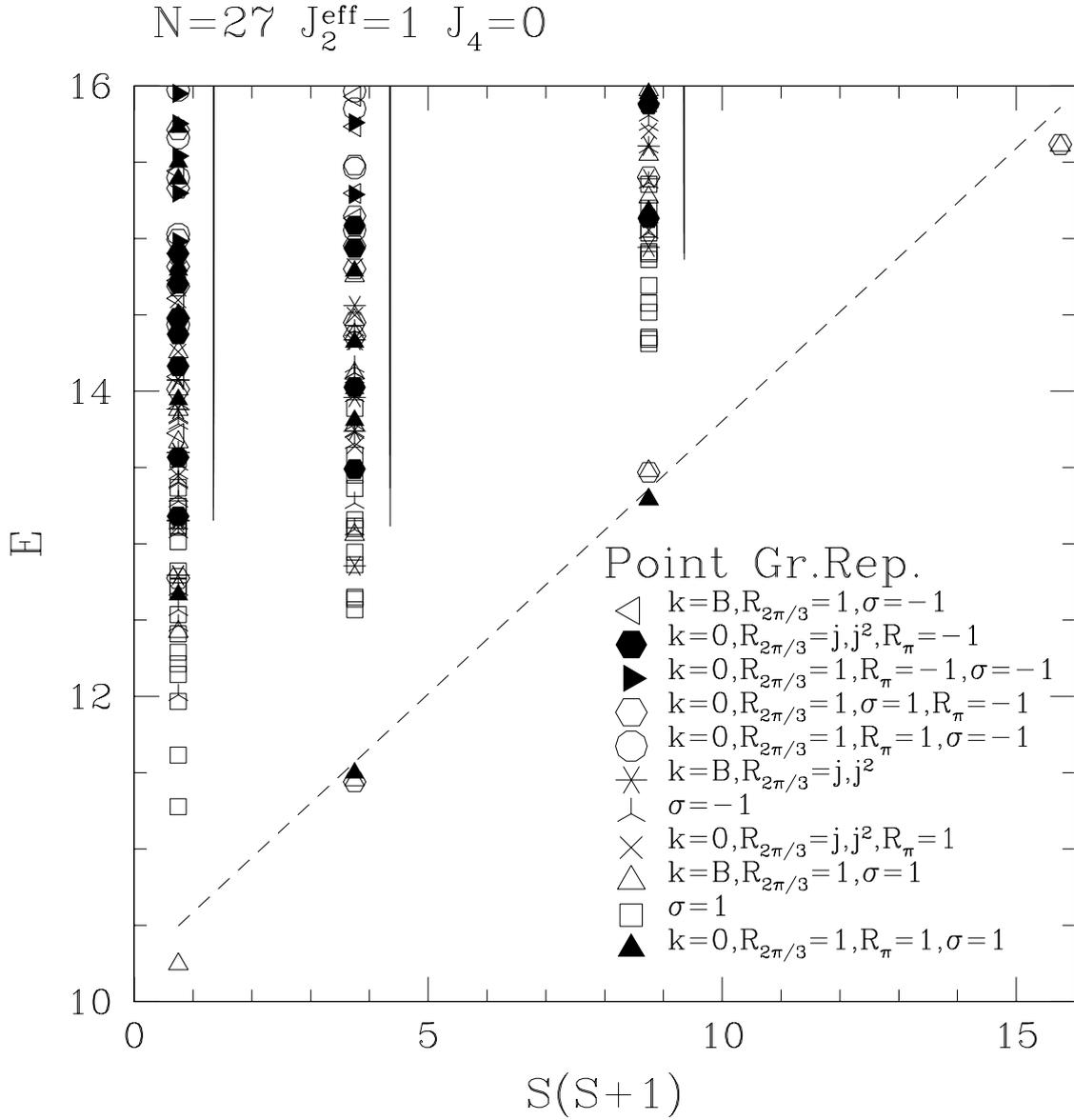


FIG. 4.3: Spectre du modèle d'Heisenberg antiferromagnétique sur le réseau triangulaire ($N = 27$). La brisure de la symétrie $SU(2)$ et de l'invariance par translation due à l'ordre de Néel à longue portée (Fig. 3.3) apparaît comme un ensemble d'états avec une énergie $E(S) \sim S(S+1)/N$ (ligne en pointillés). Les symboles représentent les nombres quantiques des états (voir § 3.1.2 et légende de la figure 3.2). Les lignes verticales indiquent les intervalles d'énergie où toutes les valeurs propres n'ont pas été calculées. Ceci n'a pas de conséquence sur la partie de basse énergie de chaque représentation irréductible, où les états sont connus exactement.

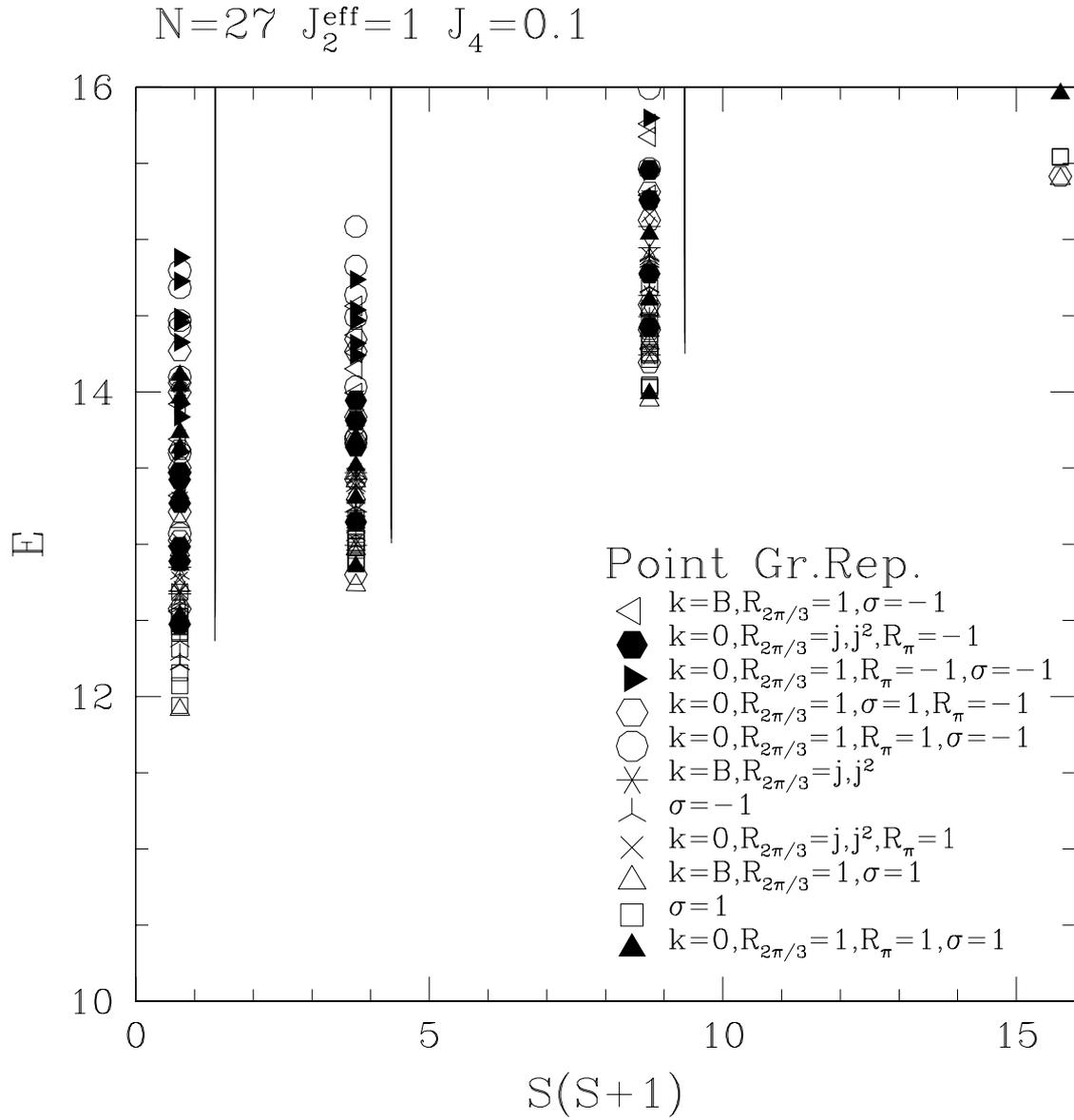


FIG. 4.4: Spectre du modèle d'Heisenberg perturbé par de l'échange à quatre corps $J_4/J_2 = 0.1$ ($N = 27$). La structure de Néel visible Fig. 4.3 est détruite et la densité d'états de basse énergie est accrue.

4.1.2 Conditions aux bords tournées

La structure de tour des états ne peut apparaître dans un spectre de taille finie que si les conditions périodiques ne frustrant pas la structure en sous-réseaux. Ne serait-ce que parce que dans le cas contraire, les vecteurs d'onde qui caractérisent la brisure de symétrie spatiale n'appartiennent pas à la première zone de Brillouin de l'échantillon. Dans ces conditions, une hélice de grande longueur d'onde, ou une spirale incommensurable peuvent être difficiles à détecter avec des conditions périodiques. On utilise pour cela des conditions aux bords *tournées*. Une hélice plane classique de vecteur \mathbf{q} est une configuration du type :

$$\vec{S}_i = \vec{e}_x \cos(\mathbf{i} \cdot \mathbf{q}) + \vec{e}_y \sin(\mathbf{i} \cdot \mathbf{q}) \quad (4.1)$$

où \vec{e}_x et \vec{e}_y sont deux vecteurs orthogonaux dans le plan de l'hélice. On cherche un repère local dans lequel cet hélice serait un état ferromagnétique. On définit :

$$\tilde{S}_i = \mathcal{R}_{-\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}}^z \left[\vec{S}_i \right] \quad (4.2)$$

où \mathcal{R}_θ^z est la rotation d'angle θ autour de l'axe de quantification z . Avec ce choix, l'hélice Eq. (4.1) devient $\tilde{S}_i = \vec{e}_x$, qui est un état $\tilde{\mathbf{q}} = \mathbf{0}$ dans les variables \tilde{S} . L'hamiltonien de départ, qui s'écrit avec des termes $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ dans la base initiale, peut s'écrire, toujours de façon invariante par translation, avec les spins "tournés" :

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \mathcal{R}_{\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}}^z \left[\tilde{S}_i \right] \cdot \mathcal{R}_{\mathbf{q}\cdot\mathbf{j}}^z \left[\tilde{S}_j \right] = \tilde{S}_i \cdot e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{j}-\mathbf{i})S^z} \tilde{S}_j \quad (4.3)$$

Pour un système infini, cette transformation est un pur changement de base et le spectre n'est pas modifié. En revanche, pour un système de taille finie, le nouvel hamiltonien diffère du premier par des termes de bords ¹. Si \mathbf{T}_1 et \mathbf{T}_2 sont deux vecteurs qui définissent la périodicité de l'échantillon, le spectre "tourné" sera différent du spectre périodique dès que $\theta_1 = \mathbf{T}_1 \cdot \mathbf{q} \neq 0 \pmod{2\pi}$ ou bien $\theta_2 = \mathbf{T}_2 \cdot \mathbf{q} \neq 0 \pmod{2\pi}$. Cette méthode a été utilisée, entre autre, pour étudier l'ordre de Néel à trois sous-réseaux sur les échantillons qui n'ont pas un nombre de sites multiple de trois [20]. De manière générale, elle permet d'étudier toutes les hélices *planes*.

Pour $N = 19$ sites avec les paramètres $J_2/J_4 = -2$, nous balayons la zone de Brillouin pour déterminer la torsion \mathbf{q}_0 qui minimise l'énergie du fondamental. Le résultat est un vecteur d'onde qui se trouve à l'intérieur de la zone de Brillouin, à un point sans symétrie particulière. Si le système avait un ordre de Néel à longue portée (commensurable ou non), \mathbf{q}_0 indiquerait le vecteur d'onde de cet ordre magnétique et le spectre correspondant exhiberait une tour des états du type $E \simeq \frac{(S^z)^2}{N\chi_\perp}$. La figure 4.5 montre que ce n'est pas le cas. S'il y avait une tour des états, les premiers états d'impulsion nulle dans chaque secteur de S_{tot}^z (ligne en pointillés Fig. 4.5) en feraient partie et se trouveraient plus bas que les autres états excités de même S_{tot}^z .

¹On remarque que le nouvel hamiltonien n'est plus invariant sous $SU(2)$. \tilde{S}_{tot}^2 n'est plus une quantité conservée mais S_{tot}^z reste un nombre quantique.

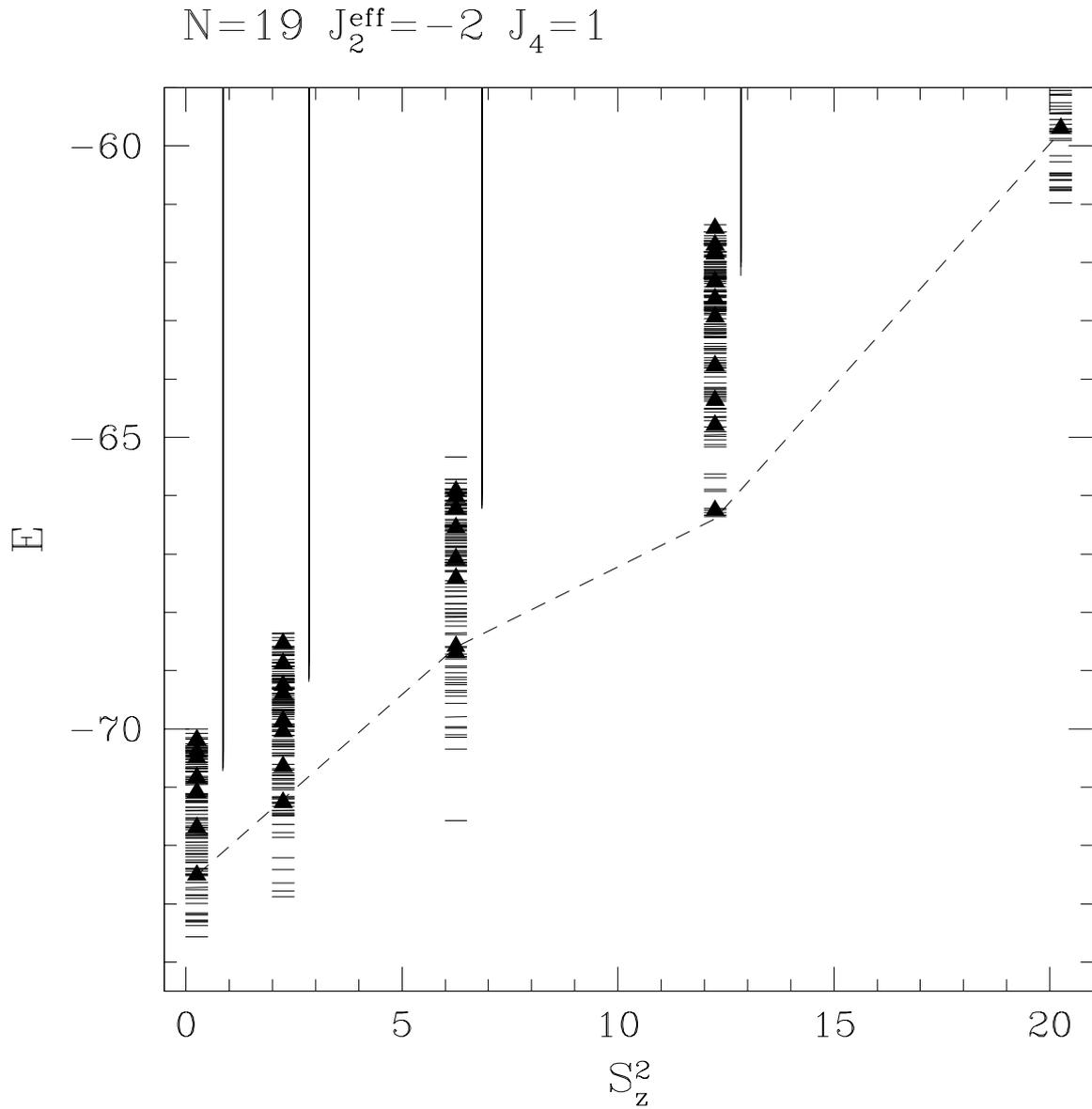


FIG. 4.5: Spectre avec les conditions aux bords tournées qui minimisent l'énergie du fondamental pour $N = 19$ sites à $J_2/J_4 = -2$. La ligne en pointillés relie les premiers états d'impulsion $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ (\blacktriangle) de chaque valeur de S_{tot}^z . Qu'ils ne soient pas les états de basse énergie signifie qu'il n'y pas de tour des états. La torsion \mathbf{q}_0 est $\mathbf{q}_0 = 0.27\mathbf{A}_1 - 0.20\mathbf{A}_2$, où \mathbf{A}_1 et \mathbf{A}_2 sont deux milieux de bords de zone. Par symétrie, il y a douze vecteurs qui donnent le même spectre que \mathbf{q}_0 .

4.2 Corrélations à $T=0$ ($J_2/J_4 = -2$)

L'analyse en termes de tour des états de la section précédente indique que l'échange à quatre corps est capable de déstabiliser les ordres de Néel classiques dans une grande région du diagramme de phases. Afin de caractériser cet état liquide de spins, nous concentrons sur un point particulier : le modèle $J_2 - J_4$ à $J_2/J_4 = -2$. Le choix de cet hamiltonien particulier est motivé par un souci de simplicité et plusieurs raisons expérimentales et théoriques :

- $J_2/J_4 = -2$ correspond aux rapport des paramètres J_2^{eff} et J_4 mesurés dans la seconde couche d' ^3He solide à basse densité dans la phase commensurée $4/7$. (*cf.* Tab. 1.2).
- La similarité des spectres à J_4 fort et $J_2 \lesssim 0$ laisse espérer que les propriétés de basse énergie sont similaires dans une région importante de l'espace des paramètres.
- MOMOI *et al.* [94] montrent que cet hamiltonien avait une grande dégénérescence de son fondamental au niveau classique. Nous nous attendons à ce qu'en ce point particulier les propriétés de la phase liquide de spins liées aux résonances quantiques (gap magnétique en particulier) soient exacerbées par cette dégénérescence.

Nous commençons l'analyse du fondamental du système par le calcul de fonctions de corrélation dans le fondamental. Les corrélations spin-spin confirment l'absence d'ordre de Néel tandis que ni les corrélations dimère-dimère ni chiralité-chiralité n'indiquent la présence d'ordre non magnétique. Au contraire, une chute rapide sur des distances de 2 à 3 pas du réseaux suggère une décroissance exponentielle.

4.2.1 Corrélations spin-spin

Pour deux spins $\frac{1}{2}$, $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ varie entre $-3/4$ dans l'état singulet et $1/4$ dans un état triplet tandis que la moyenne à haute température $Tr[\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j]$ est nulle. Comparées à ces valeurs extrêmes, les corrélations spin-spin du fondamental du modèle d'échange multiple sont faibles. Elles sont données pour des échantillons à $N = 16, 24$ et 28 sites dans la table 4.1. La figure 4.6 présente la valeur absolue de la corrélation en fonction de la distance $|j - i|$. Sur les trois échantillons, les distances disponibles sont assez faibles ($|i - j| \leq 3$) et les données montrent d'importantes dépendances avec la taille du système. Le réseau $N = 24$ est un tore de 6×4 spins qui n'est pas symétrique par rotation de $2\pi/3$ autour d'un site (les réseaux 16 et 28, eux, le sont), il met en évidence une dépendance de la corrélation avec l'orientation du segment $\mathbf{j} - \mathbf{i}$.

À ce stade, il est difficile de tirer une conclusion sur la décroissance des corrélations. Cependant, dans un système de taille finie avec des conditions aux bords périodiques, il faut attendre des effets géométriques particuliers pour les paires de sites (i, j) qui possèdent des symétries spéciales. L'effet le plus important est l'accroissement de $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ sur les

$ i - j $	N=28	N=24			N=16
1	-0.06941	-0.08925	-0.06356	-0.04894	-0.06614
$\sqrt{3}$	-0.08014	-0.11194	-0.03425	-0.01640	-0.02887
2	-0.02534	<u>-0.17823</u>	-0.02560	+0.02051	<u>-0.05996</u>
$\sqrt{7}$	<u>+0.04983</u>	+0.07543	+0.00306	<u>-0.00454</u>	×
3	×	<u>+0.01472</u>			×

TAB. 4.1: Corrélations $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ dans le fondamental du modèle d'échange multiple $J_2/J_4 = -2$. Les trois valeurs pour $N = 24$ correspondent à trois directions inéquivalentes. Les valeurs soulignées indiquent les paires de sites antipodales, elles sont sur-corrélées.

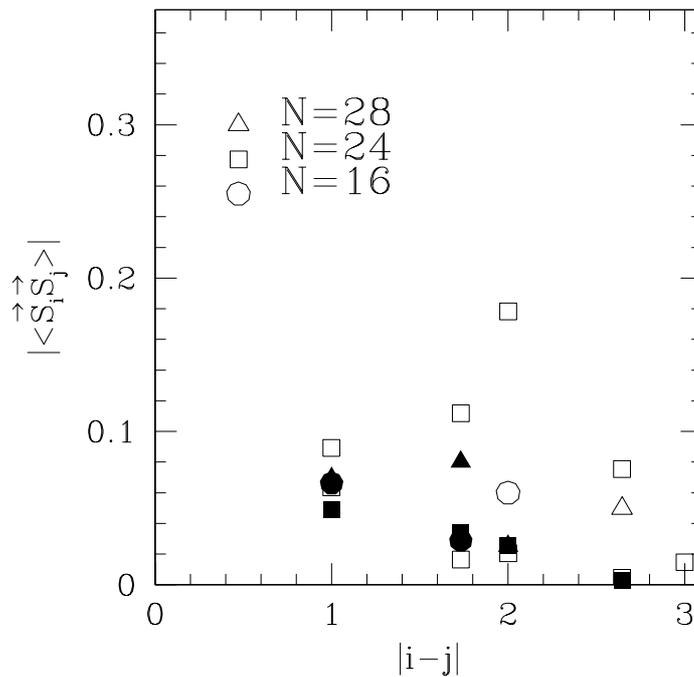


FIG. 4.6: Valeur absolue de la corrélation $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ à $J_2/J_4 = -2$ en fonction de la distance $|j - i|$. L'axe vertical va jusqu'à $\frac{3}{8}$, qui est la corrélation premier voisin dans la chaîne de Majumdar-Gosh. Cette échelle est choisie pour souligner à quel point les corrélations spin-spin sont faibles. Les symboles pleins indiquent les corrélations pour lesquelles on s'attend à des effets de taille moindres (voir texte).

échantillons où $\mathbf{j} - \mathbf{i}$ et $\mathbf{i} - \mathbf{j}$ sont des vecteurs équivalents. Autrement dit, on observe un renforcement systématique de la corrélation (ferro- ou antiferromagnétique) à une distance donnée si les points sont antipodaux sur le tore (valeurs soulignées Tab. 4.1)².

Quand le réseau n'a pas la symétrie de rotation $\mathcal{R}_{2\pi/3}$, les effets de taille finie pour la corrélation à une distance donnée seront les plus faibles dans la direction $\mathbf{v} = \mathbf{i} - \mathbf{j}$ qui n'est pas frustrée par la périodicité sur le tore. Une façon simple d'évaluer si le pas \mathbf{v} est "frustré" est de considérer la boucle fermée partant de l'origine : $O, O + \mathbf{v}, O + 2\mathbf{v}, \dots, O + (n-1)\mathbf{v}, O$. On associe la frustration au nombre d'enroulements de cette courbe fermée. Le nombre minimum est 1 : par translations successives de \mathbf{v} , on se retrouve au point de départ après un seul tour. Nous faisons l'hypothèse que les effets non physiques dus à la petite taille du système seront moins importants dans la direction où le nombre d'enroulements est le plus petit. Étant donnée une distance d , la corrélation $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ la plus pertinente est alors obtenue dans la direction qui donne la boucle topologiquement la plus simple³.

Si nous éliminons ainsi les couples de sites antipodaux et les directions frustrées du réseau à 24 sites, seuls les points représentés par les symboles pleins Fig. 4.6 demeurent. Le comportement avec la distance est plus monotone et la décroissance rapide suggère une longueur de corrélation assez courte, de l'ordre de 2 pas du réseau.

L'absence manifeste d'ordre magnétique, que ce soit par l'absence de tour des états ou de corrélations spin-spin suffisantes, nous amène à nous interroger sur la structure locale du fondamental. Indépendamment de toute considération énergétique, il y a deux façons naïves de construire une fonction d'onde singulet à partir d'un grand nombre de spins $\frac{1}{2}$:

- Combiner les spins de manière ferromagnétique en un petit nombre de sous-réseaux. Puis faire s'écranter ces spins macroscopiques.
- Combiner les spins deux par deux en singulets.

La première situation est réalisée dans un état de Néel et la deuxième dans les pavages de dimères. Prenons un réseau où chaque site possède z voisins. La moyenne sur les z directions de la corrélation $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ entre deux voisins vaut $\langle \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \rangle = -\frac{3}{4z}$ dans un pavage de dimères plus proche voisin. Ceci donnerait $-\frac{1}{8}$ sur le réseau triangulaire, ce qui reste près de deux fois plus antiferromagnétique que les valeurs mesurées dans le fondamental exact (Tab. 4.1). Cette faiblesse des corrélations antiferromagnétiques nous enseigne que l'écrantage d'un spin met en jeu un nombre important de sites dans son voisinage, jusqu'à des distance $d \simeq 2 \dots 3$. Ceci va être confirmé dans le paragraphe suivant

²On devine l'origine de cet effet en adoptant une vision diagrammatique où le calcul des corrélations se fait en sommant une action sur tous les chemins reliant i à j . Si i et j sont antipodaux, alors les chemins directs, dont on imagine que la contribution est importante, sont au moins doublés.

³Cette prescription n'est qu'une généralisation de quelques règles de bon sens pour les corrélations antiferromagnétiques. Par exemple, sur un tore $l \times m$ où l est pair et m impair, une corrélation antiferromagnétique à distance 2 sera frustrée dans la direction m (deux enroulements), et devra plutôt être évaluée dans la direction de l (un seul enroulement).

où nous montrons que les corrélations entre dimères de longueur 1 (*i.e* dimères qui couplent deux sites premiers voisins) sont également faibles.

4.2.2 Corrélations dimère-dimère

Définition de la fonction de corrélation

Nous commençons par construire une fonction de corrélation à quatre points permettant de détecter un éventuel ordre de dimère, même en l'absence de corrélation antiferromagnétique marquée. Nous définissons l'opérateur dimère sur une paire de site (i, j) par $d_{i,j} = \frac{1-P_{i,j}}{2}$. Ce projecteur vaut 1 sur un état singulet et 0 sur un triplet. La corrélation de dimère entre un lien de référence $(1, 2)$ et un couple de sites (i, j) vaut $D_{i,j} = \langle \Psi | d_{1,2} d_{i,j} | \Psi \rangle - \langle \Psi | d_{1,2} | \Psi \rangle \langle \Psi | d_{i,j} | \Psi \rangle$.⁴ Pour la normalisation, nous cherchons la valeur maximale de $D_{i,j}$. Elle est atteinte sur un état $|\Psi\rangle$ si l'existence d'un singulet sur $(1, 2)$ est complètement corrélée à celle d'un dimère sur (i, j) , de sorte que les projecteurs $d_{1,2}$ et $d_{i,j}$ satisfont sur $|\Psi\rangle$: $d_{1,2} d_{i,j} |\Psi\rangle = d_{1,2} d_{1,2} |\Psi\rangle = d_{1,2} |\Psi\rangle$. Ainsi, on trouve : $D_{i,j}^{\max} = \langle \Psi | d_{1,2} | \Psi \rangle - \langle \Psi | d_{i,j} | \Psi \rangle \langle \Psi | d_{1,2} | \Psi \rangle$. Il est donc naturel de mesurer la corrélation par :

$$\begin{aligned} p_{i,j} &= \frac{D_{i,j}}{D_{i,j}^{\max}} & (4.4) \\ &= \frac{D_{i,j}}{\langle \Psi | d_{1,2} | \Psi \rangle (1 - \langle \Psi | d_{i,j} | \Psi \rangle)} \\ &= \frac{\langle \Psi | d_{1,2} d_{i,j} | \Psi \rangle - \langle \Psi | d_{i,j} | \Psi \rangle \langle \Psi | d_{1,2} | \Psi \rangle}{(1 - \langle \Psi | d_{i,j} | \Psi \rangle) \langle \Psi | d_{1,2} | \Psi \rangle} \end{aligned}$$

Ordre local à $\pm \frac{\pi}{3}$

$p_{i,j}$ est représenté figures 4.8 et 4.7. Cette quantité peut être pensée comme une quasi-probabilité conditionnelle : zéro signifie que les apparitions d'un dimère sur $(1, 2)$ et d'un dimère sur (i, j) sont des événements indépendants. À l'inverse, $p_{i,j} = 1$ informe qu'un dimère sur l'un des liens est toujours accompagné d'un dimère sur l'autre. La valeur minimale possible est $p_{i,j}^{\min} = -\frac{\langle d_{i,j} \rangle}{1 - \langle d_{i,j} \rangle}$, c'est la répulsion maximale entre dimères sur $(1, 2)$ et (i, j) compatible avec la "densité" de dimère $\langle d_{i,j} \rangle$. Elle vaut $p_{i,j}^{\min} = -0.469$ pour des dimères de longueur un dans le fondamental $N = 28$ du modèle d'échange multiple à $J_2/J_4 = -2$. On observe des valeurs négatives sur les quatre liens qui sont à distance 1 du lien de référence (-0.14 et -0.127). Comparées à $p_{i,j}^{\min}$, ces valeurs sont importantes (30%). De plus, elles croissent en valeur absolue avec la taille du système. Ceci témoigne d'une importante *répulsion à courte portée entre dimères* et exclut la possibilité d'un état de type

⁴ Si le système est invariant par rotation de $2\pi/3$, $\langle \Psi | d_{i,j} | \Psi \rangle$ ne dépend que de la distance $|j - i|$.

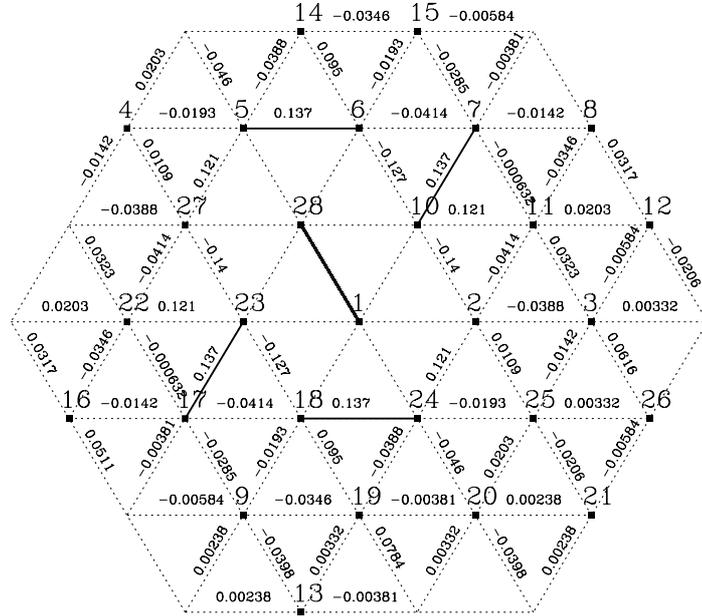


FIG. 4.7: Corrélations dimère-dimère dans le fondamental du modèle d'échange multiple $J_2/J_4 = -2$, représentées sur le réseau $N = 28$. Le lien de référence est $(1, 28)$ et les quatre liens les plus corrélés sont marqués en traits pleins. Ils se trouvent à distance $\sqrt{7}/2$ de $(1, 28)$ et forment un motif triangulaire. On remarque que les liens premiers voisins de $(1, 28)$ sont fortement anti-corrélés (valeurs négatives sur $(6, 10)$ $(10, 2)$ $(23, 27)$ et $(18, 23)$).

“valence-bond crystal” ou “spin-Peierls” dans laquelle le réseau serait pavé régulièrement de dimères *parallèles*. La figure 4.7 montre au contraire que la distribution locale des dimères de longueur 1 favorise les angles $\pm\frac{\pi}{3}$ entre liens singulets⁵. Nous avons calculé la corrélation $p_{i,j}$ pour un grand nombre d'échantillons : cet ordre local de type $\pm\frac{\pi}{3}$ apparaît d'autant plus marqué que l'énergie par site du fondamental est basse. Nous concluons qu'il n'est pas possible, même grossièrement, de décrire l'ordre local par des corrélations anti-ferromagnétiques classiques ni par des dimères parallèles. Au contraire, nous découvrons ici un ordre local au caractère géométrique relativement complexe.

⁵Cette tendance à un ordre local $\pm\frac{\pi}{3}$ des dimères apparaît déjà dans le fondamental du système à 6 spins en triangle avec conditions aux bords libres, qui se trouve être le plus petit système où l'hamiltonien $J_2/J_4 = -2$ possède un fondamental singulet et un gap de spin important. Nous reviendrons au chapitre 5 sur ce motif particulier et ce qu'il nous apprend de la structure locale de la fonction d'onde des grands systèmes.

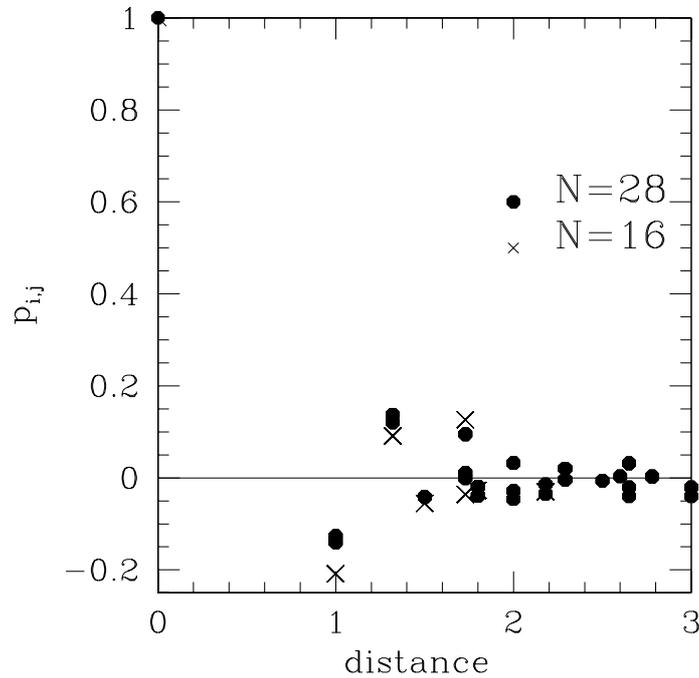


FIG. 4.8: Corrélations dimère-dimère dans le fondamental du modèle d'échange multiple $J_2/J_4 = -2$, en fonction de la distance pour $N = 16$ et 28 . $p_{i,j}$ est défini dans le texte (Eq. (4.5) page 61).

Décroissance des corrélations

À partir de la seule figure 4.8, il n'y a pas de garantie absolue sur la décroissance vers zéro des corrélations entre dimères. Cependant, cette hypothèse est très vraisemblable pour les raisons suivantes :

- Les corrélations sont très faibles. Même à courte distance, la fonction d'onde doit plus être vue comme un gaz ou un liquide de dimères plutôt qu'un cristal.
- Les corrélations aux distances supérieures ou égales à 2 décroissent significativement de $N = 24$ à $N = 28$.
- Il n'est pas possible de paver le réseau triangulaire par des dimères de longueur 1 qui formeraient entre voisins des angles de $\pm\frac{\pi}{3}$. Dans un tel pavage, un site sur sept ne participerait à aucun dimère (se reporter à l'annexe B, où nous présentons un hamiltonien d'échange multiple (KLEIN [73]) pour lequel ce pavage est le fondamental exact). L'ordre local ne peut pas être propagé à tout le réseau, il est frustré par la géométrie du réseau.

Nous soulignons que la corrélation locale des dimères de longueur 1 ne peut pas donner une image de la fonction d'onde *entière*, même à courte distance. Ces corrélations ne nous renseignent que sur la composante à plus courte portée d'un développement de la fonction d'onde dans une base "RVB" de pavages de dimères. Comme déjà évoqué plus haut, la corrélation n'est que faiblement antiferromagnétique ($\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \simeq -0.07$ à distance 1 pour $N = 28$). Une description plus complète doit faire intervenir des dimères de longueur plus grande.

4.2.3 Corrélations chirales : $\langle \text{Im}(P_{i,j,k}) \text{Im}(P_{i',j',k'}) \rangle$

Ordre chiral à température finie dans le modèle classique

KUBO et MOMOI [77] démontrent que le fondamental classique du modèle d'échange multiple $J_2 - J_4$ est, pour $-\frac{1}{4} \leq J_2/J_4 \leq 1$, un état de Néel à quatre sous-réseaux dont les aimantations pointent, dans l'espace des spins, vers les sommets d'un tétraèdre régulier. MOMOI, KUBO et NIKI effectuent, toujours dans le cas de spins classiques, des simulations Monte-Carlo qui révèlent une transition de phase à température finie pour $J_2/J_4 = 0$. Comment est-ce compatible, pour un système bidimensionnel avec une symétrie continue, avec le théorème de MERMIN WAGNER [89]? Cette transition n'est pas associée à la disparition de l'aimantation des sous-réseaux de la structure tétraèdre. Cette aimantation de sous-réseau est nulle pour toute température finie $T > 0$, en accord avec [89]. Le paramètre d'ordre de cette transition est la chiralité $\kappa = 2(\vec{S}_1 \times \vec{S}_3) \cdot \vec{S}_2$, mesurée sur les trois spins d'une plaquette, et qui possède une symétrie discrète d'Ising. Dans l'état tétraèdre, κ prend la même valeur sur toutes les plaquettes orientées dans le sens trigonométrique ($\kappa = +\frac{\sqrt{3}}{9}$ ou $\kappa = -\frac{\sqrt{3}}{9}$). Le calcul Monte-Carlo indique que la corrélation $\langle \kappa_{(1,2,3)} \kappa_{(1',2',3')} \rangle$ garde de l'ordre à longue portée jusqu'à une température critique $T_c > 0$.

Il n'y a pas de signature de l'ordre de Néel tétraèdre dans les spectres de taille finie. Cependant, le résultat de MOMOI *et al.* nous apprend que l'ordre chiral peut survivre à l'absence d'aimantation macroscopique des sous-réseaux. Par ailleurs, un calcul d'ondes de spins sur le modèle $J_4 = 1$ indique que les fluctuations quantiques affectent moins l'ordre chiral que l'aimantation [93]. Nous calculons donc la corrélation $\langle \kappa_{(1,2,3)} \kappa_{(1',2',3')} \rangle$ dans le fondamental quantique.

Fluctuations locales

Les fluctuations locales de κ sont importantes : pour $N = 28$, $\langle \kappa^2 \rangle$ vaut 0.5221 dans le fondamental. Cette valeur est plus grande que la valeur moyenne sur trois spins *libres* : $\text{Tr}[\kappa^2]/\text{Tr}[1] = 0.375$. C'est, en fait, nettement moins que la valeur quantique maximale de κ^2 ($= \frac{3}{4}$), ou que la valeur mesurée dans le modèle d'Heisenberg sur le réseau kagome ($\langle \kappa^2 \rangle \simeq 0.7$) [140]. La valeur de $\langle \kappa^2 \rangle$ ne doit pas être interprétée comme un argument en

$ (123) - (1'2'3') $	$J_2 = -2 \ J_4 = 1$	$J_2 = 0 \ J_4 = 1$
0	+0.4791	+0.5221
1	-0.0285	-0.0306
$\frac{\sqrt{21}}{3} = 1.527$	+0.0280	+0.0356
2	-0.0078	-0.0132
$\sqrt{7} = 2.646$	+0.0018	+0.0009,-0.0066

TAB. 4.2: Corrélacion chirale pour $J_2/J_4 = 0$ et $J_2/J_4 = -2$ dans le fondamental de réseau à $N = 28$ sites. $(1, 2, 3)$ et $(1'2'3')$ désignent deux plaquettes triangulaires orientées dans le même sens. Pour les couplages $J_2/J_4 = 0$, la corrélation à distance $\sqrt{7}$ est calculée dans deux directions inéquivalentes. Le couplage ferromagnétique réduit la chiralité. C'est une conséquence de l'équation (4.5). Puisque le couplage $J_2 < 0$ augmente $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$, la chiralité s'en trouve réduite (au moins localement).

faveur d'une brisure de la symétrie par renversement du temps, puisque $\langle \kappa^2 \rangle$ ne contient pas plus d'information que la corrélation au premier voisin :

$$\langle \kappa^2 \rangle = \frac{3}{2} \left(\frac{1}{4} - \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle \right) \quad (4.5)$$

Ordre chiral quantique

Nous considérons la corrélation $\langle \kappa \ \kappa' \rangle$ en fonction de la distance entre les deux triangles. Le résultat fait apparaître une décroissance importante (Fig. 4.9 et Tab. 4.2). Plus surprenant sont les nombreux points où la corrélation $\langle \kappa \ \kappa' \rangle$ est négative. Cet effet est inattendu du point de vue classique, où κ est la variable d'un modèle effectif de type Ising *ferromagnétique*. Pour ces raisons, l'existence d'ordre chiral à longue portée analogue à celui trouvé dans le modèle de spins classiques semble improbable, même à température nulle. Dans le cas du hamiltonien $J_2/J_4 = -2$, nous donnons plus loin (§ 6.1.4) un argument (existence de spinons *confinés*) qui plaide également contre le scénario chiral.

Une telle brisure spontanée de l'invariance par renversement du temps (ou de la symétrie par rapport à un axe du réseau) exige à la limite thermodynamique une dégénérescence deux du fondamental. Il faut noter que ceci est observé sur le système $N = 28$ à $J_4 = 1$, dont le fondamental est exactement double (représentation irréductible de dimension deux). Étant donné le peu de régularité dans les symétries du fondamental et des premières excitations singulets, nous pensons que cette dégénérescence est accidentelle. L'étude des excitations élémentaires pour l'hamiltonien J_4 pur pourrait éclairer ce point.

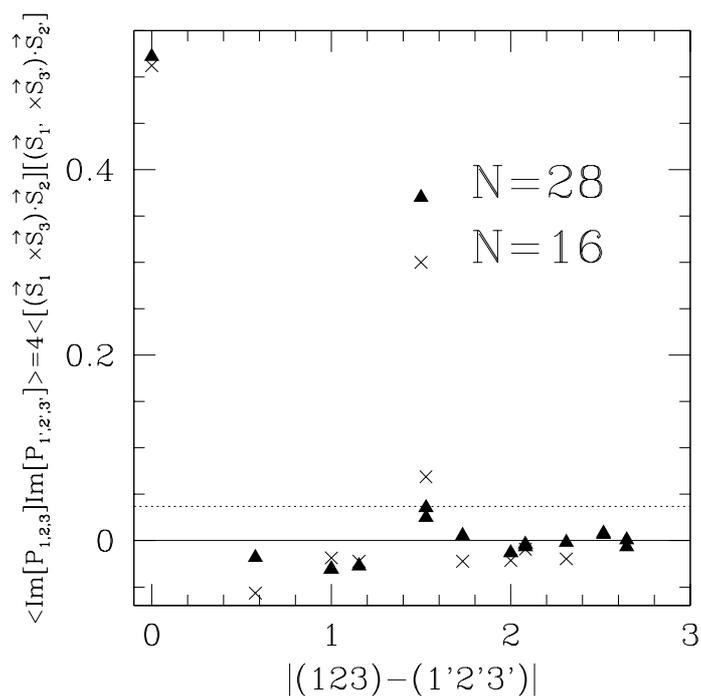


FIG. 4.9: Corrélation chirale à $J_4 = 1$. La chiralité peut s'exprimer avec des opérateurs de permutation : $\text{Im}(P_{i,j,k}) = \frac{1}{2i}(P_{i,j,k} - P_{k,j,i}) = 2(\vec{S}_i \times \vec{S}_k) \cdot \vec{S}_j = \kappa$. La valeur dans l'état tétraèdre classique est $\langle \text{Im}[P] \text{Im}[P'] \rangle = \frac{1}{27} \simeq 0.037$ pour tout couple de triangles P et P' comptés dans le même sens. Si les deux triangles ont un ou deux sites en commun, $\langle \text{Im}[P] \text{Im}[P'] \rangle$ peut avoir une (petite) partie imaginaire. Dans ces cas, seule la partie réelle est indiquée. Remarque : tous les couples de triangles sont représentés.

4.3 Gap de spin

Dans les systèmes de spins quantiques, la décroissance des fonctions de corrélations spin-spin est reliée à la nature du spectre de basse énergie :

- les systèmes ordonnés ont un gap magnétique qui tend vers zéro en $1/N$.
- Les systèmes critiques en deux dimensions ont, génériquement, un gap qui tend vers zéro en $1/\sqrt{N}$.
- Ceux où les corrélations décroissent exponentiellement avec la distance sont “incompressibles”, ils ont un gap fini à la limite thermodynamique (Phase de HALDANE [53–56] des chaînes de spins entiers. Mais aussi les phases dimérisées en une ou deux dimensions).

La question du coût énergétique minimal d’une excitation magnétique est donc de première importance pour caractériser un liquide de spins. Nous montrons dans cette section que toutes les données numériques suggèrent un gap fini à la limite thermodynamique au point $J_2/J_4 = -2$ et qu’il en est probablement de même dans un grand domaine de l’espace des paramètres.

4.3.1 Effets de taille finie sur l’énergie du fondamental

Pour les petits systèmes, la valeur du gap de spin et de l’énergie du fondamental sont sensibles à la taille et la forme du réseau. Pour cette raison, une extrapolation à $N = \infty$ de la valeur du gap de spin n’est pas immédiate et demande une analyse précise. Le comportement apparemment irrégulier du gap de spin (Fig. 4.10) reflète les corrélations à courte distance dans la fonction d’onde. Ceci est en accord avec l’analyse de la section précédente. En effet, la longueur caractéristique ξ est de quelques pas du réseau et les spectres de petits systèmes restent sensibles aux conditions aux bords. Cet effet peut être utilisé pour sonder la structure locale de la fonction d’onde et pour identifier des résonances de petites longueurs d’onde qui abaissent son énergie.

Il faut distinguer deux familles de systèmes suivant la parité du nombre de sites. Les systèmes où N est pair ont un gap plus grand et un fondamental plus bas que ceux où N est impair. Au sein de chaque famille, le comportement avec la taille est plus ou moins monotone : les réseaux pairs (resp. impairs) ont une énergie par site qui croît (resp. décroît) et un gap qui décroît (resp. croît) avec N . On remarque également que les réseaux où le nombre de sites est un multiple de 6 ont une énergie plus basse. Ceci peut être rapproché des corrélations à $\pm\pi/3$ entre dimères trouvées plus haut, puisque le motif minimal qui réalise cet ordre local est un triangle à six spins.

D’une manière générale, les géométries qui permettent les fondamentaux les plus stables sont les réseaux qui possèdent les impulsions $\mathbf{k} = \mathbf{A}$, \mathbf{B} et $\frac{1}{2}\mathbf{B}$ dans leurs premières zones

de Brillouin. Une illustration de cette sensibilité à la forme est donnée par les deux réseaux à 24 sites (Fig. 4.12). Le plus stable est un rectangle de 6×4 sites qui possède les trois vecteurs d'onde mentionnés et son énergie est $E/N = -4.03$. On peut le comparer au système à 24 sites le plus compact qui est un parallélogramme (système 24' Fig. 4.12, et carré blanc Fig. 4.10). Ce dernier est beaucoup plus frustré : $E/N = -3.88$. Le même phénomène est observé avec les tailles 12 et 20. Le rôle joué par les impulsions $\mathbf{k} = \mathbf{A}$, \mathbf{B} et $\frac{1}{2}\mathbf{B}$ semble être une réminiscence du facteur de structure statique obtenu par la théorie des bosons de Schwinger au chapitre 2. Ici, bien que l'ordre de Néel à longue portée soit perdu, nous trouvons que les fluctuations autour des vecteurs d'onde qui le caractérisaient abaissent l'énergie de façon importante.

Les deux familles, paire et impaire, se rejoignent pour N supérieur ou égal à $N_0 \simeq 30$, aussi bien du point de vue de l'énergie E/N que du gap de spin (Fig. 4.11). Il s'agit d'un comportement différent de celui d'un système avec de l'ordre de Néel où les corrections dominantes à l'énergie seraient en $N^{-3/2}$ tandis que le gap de spin s'annulerait en N^{-1} . Les pré-facteurs dépendraient de la famille considérée, mais toutes les familles ne se rejoindraient qu'à $N = \infty$ dans la représentation graphique de E/N (resp. Δ) en fonction $N^{-3/2}$ (resp. N^{-1}).

Nous interprétons les effets de taille Figs. 4.10,4.11 du modèle d'échange multiple comme l'existence d'une zone de transition ("crossover"). Dans la région des réseaux petits ou comparables devant la longueur de corrélation ($N \lesssim \xi^2$), les spins apparaissent ordonnés et avec une raideur finie. Le système est alors sensible à la géométrie du réseau et obéit à une loi de type $\frac{1}{N}E_N \simeq e_0 + cN^{-3/2} + \dots$, où c peut dépendre de la géométrie. Au delà de la taille caractéristique $N_0 \simeq \xi^2$, le système devient plus grand que la longueur de corrélation, la raideur tend vers zéro et les corrections de taille finie décroissent exponentiellement vite. Dans ce point de vue, les figures 4.10,4.11 indiquent que le système $N = 36$ (rectangle 6×6) se trouve quasiment à la limite thermodynamique. Ce système possède en outre toutes les symétries du réseau infini et les vecteurs d'ondes $\mathbf{k} = \mathbf{A}$, \mathbf{B} et $\frac{1}{2}\mathbf{B}$, ce qui en fait un spectre particulièrement utile sur lequel nous reviendrons plus loin (§ 6.1).

4.3.2 Gap de spin

La corrélation entre l'énergie du fondamental et le gap vers la première excitation de spin $S = 1$ (ou $S = \frac{3}{2}$ pour les échantillons impairs) est en fait assez précise. La figure 4.12 montre que ce sont les systèmes les plus stables (*i.e* E/N minimum) qui ont les gaps les plus grands. Les différents spectres sont à peu près groupés le long d'une courbe unique quand le gap de spin est tracé en fonction de l'énergie du fondamental, et ce des plus petits aux plus grands systèmes. Ceci suggère que la position sur cette courbe est le paramètre qui mesure la frustration du système. Les systèmes qui se trouvent en bas à droite sont les plus frustrés, des contraintes géométriques empêchent la fonction d'onde de développer les structures qui

abaisseraient son énergie. À l’opposé, ceux en haut à gauche bénéficient de conditions aux limites qui autorisent des résonances particulières pour abaisser le fondamental en dessous de son énergie thermodynamique.

Cette représentation de E/N en fonction de Δ aide à évaluer le gap de spin du système infini. Les données de l’énergie par site sont plus régulières que celles du gap de spin et on extrait ⁶ des données Fig. 4.12 une énergie thermodynamique $E/N \simeq -3.95 \pm 0.05$. À partir de là, on trace les deux lignes verticales correspondantes dans le diagramme Fig. 4.12, puis on les intercepte avec le nuage des points $N \leq 36$. Même en surestimant la dispersion des points autour de la courbe de frustration, on arrive à un gap fini $\Delta = 1.3 \pm 0.5$.

Remarque sur le spectre $N = 36$

Nous devons signaler que, pour des problèmes numériques liés à la taille importante du système $N = 36$, seuls les énergies des secteurs d’impulsion $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, \mathbf{B} et \mathbf{A}_i sont calculés. S’il n’y a aucun doute sur le fait que le fondamental appartienne au secteur $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, il est possible que le premier triplet, lui, ne soit pas dans les secteurs calculés. La valeur du gap indiquée, même si elle ne peut pas être très éloignée de sa valeur réelle, n’est donc mathématiquement qu’une borne supérieure.

⁶Il serait très surprenant que la famille des N impairs acquière une énergie plus basse que celle des systèmes pairs au delà de $N = 30$, par conséquent, l’énergie n’a quasiment plus de marge pour évoluer au delà de $N = 30$.

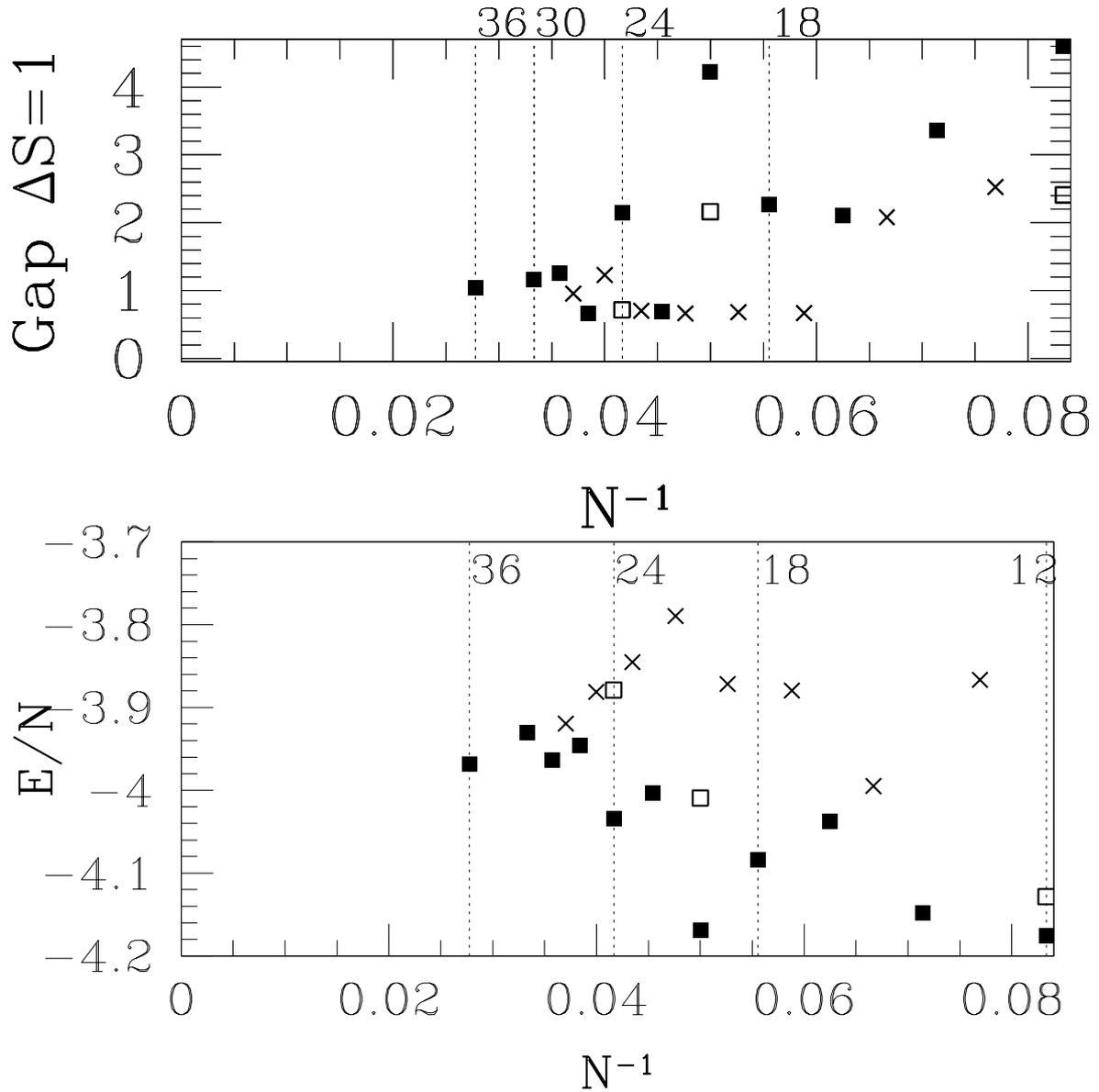


FIG. 4.10: Énergie par site et gap de spin pour $J_2 = -2$ et $J_4 = 1$ en fonction de $1/N$. N pairs (■) et impairs (×). Pour la plupart des tailles $N \leq 24$, plusieurs formes ont été étudiées. Ces données sont celles des géométries qui donnent le fondamental le plus stable. Exception pour $N = 12, 20$ et 24 où la forme stable est comparée à une forme frustrante (□).

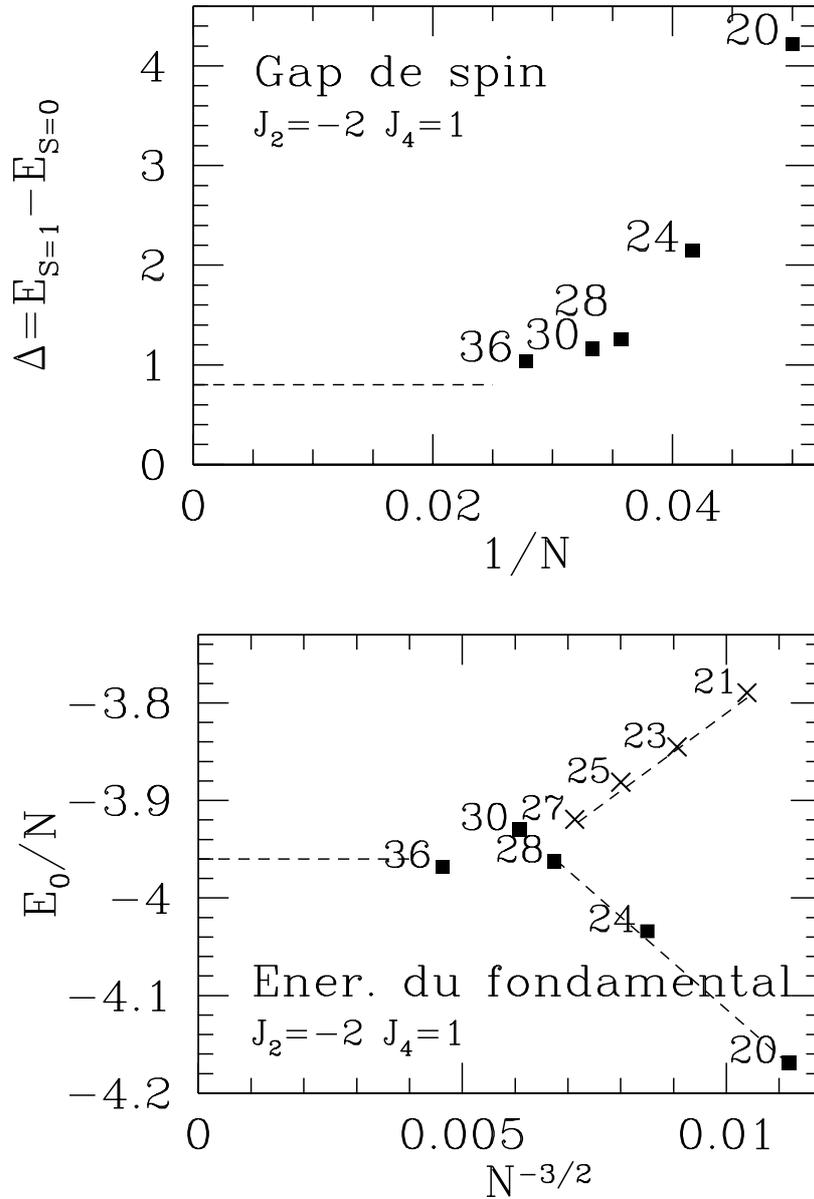


FIG. 4.11: Gap de spin et énergie par site pour $J_2 = -2$ et $J_4 = 1$ en fonction de N^{-1} et $N^{-3/2}$. Seuls les échantillons les plus stables pour $N \geq 20$ sont représentés. Le choix de ces échelles correspond aux corrections de taille finie d'un système qui *aurait* de l'ordre de Néel à longue portée. Si l'énergie des premières tailles ($N \leq 28$) suit approximativement une loi d'échelle en $N^{-3/2}$, on observe un changement de comportement pour $N \sim 30$. Au delà de cette taille les corrections de taille finie décroissent plus rapidement (pour l'énergie comme pour le gap), vraisemblablement de manière exponentielle. Nous interprétons ces données comme l'existence d'une longueur de corrélation finie dans le système, de l'ordre de deux pas du réseau.

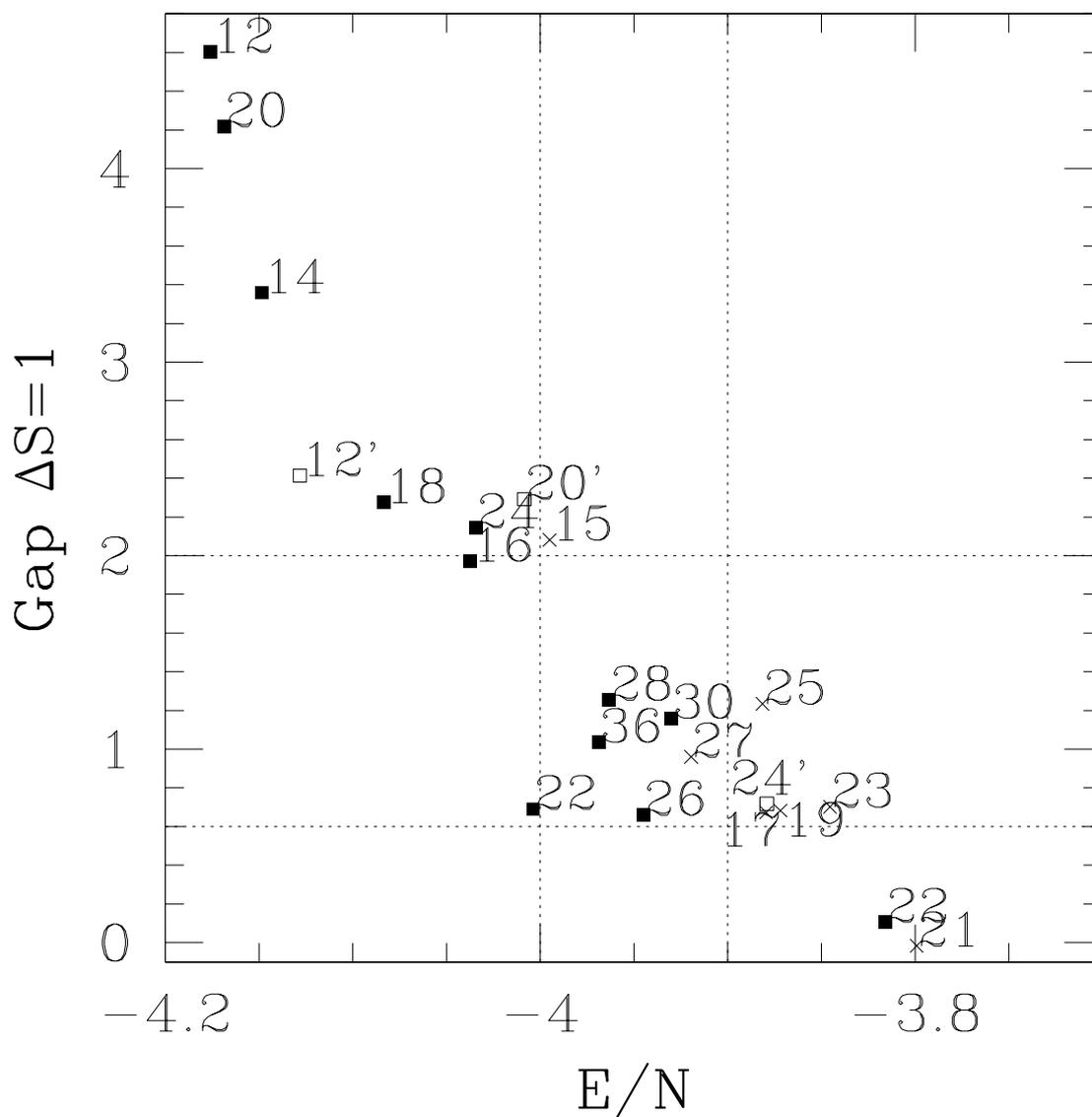


FIG. 4.12: Gap de spin en fonction de l'énergie du fondamental à $J_2 = -2, J_4 = 1$. Mêmes données que Fig. 4.10. Les deux lignes verticales délimitent l'intervalle $E/N = -3.95 \pm 0.05$ qui estime la valeur de l'énergie par site à la limite thermodynamique. Les deux lignes horizontales correspondent à l'estimation du gap de spin.

Chapitre 5

Structure locale de la fonction d'onde

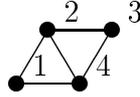
Dans un système non frustré, les questions importantes concernent principalement les grandes longueurs d'onde (ordre à longue portée et brisure de la symétrie $SU(2)$, vitesse des ondes de spins par exemple). À courte distance les corrélations sont simplement anti-ferromagnétiques. Dans la phase liquide de spins du modèle d'échange multiple, la nature de l'ordre à courte portée est déjà un problème non trivial. Puisqu'il existe une échelle d'énergie finie, mesurée par le gap de spin ou l'inverse de la longueur de corrélation, il est naturel d'essayer de décrire le fondamental en termes d'objets locaux comme des dimères ou des plaquettes. Ce chapitre présente trois approches de la fonction d'onde, de complexité croissante. Dans un premier temps nous faisons une hypothèse de liaison forte où le fondamental est un produit de fonctions d'onde singulets de plaquettes à six spins. Dans un deuxième temps, une interprétation des corrélations en termes de moment local nous amène à un point de vue complémentaire à base de plaquette $S = 1$ de quatre spins. Enfin, nous présentons un état variationnel inspiré du travail d'AFFLECK, KENNEDY, LIEB et TASAKI [4].

5.1 Liaisons fortes

Si le fondamental ne possède effectivement aucune sorte de corrélations en deçà de quelques pas du réseau, il est possible de l'approximer par un produit tensoriel de fonctions d'ondes de petits systèmes dont la réunion est un pavage du réseau triangulaire. Pour déterminer la taille et la forme minimale susceptible de reproduire qualitativement l'ordre local du grand système, nous commençons par chercher quel est le plus petit système dont le spectre calculé avec des conditions aux bords libres ressemble à celui calculé sur les grandes tailles : un fondamental $S = 0$ et un gap de spin de l'ordre de l'unité.

5.1.1 Spectres de très petits systèmes

Il faut au moins quatre spins sur un losange pour écrire l'hamiltonien $J_2 - J_4$. Ils sont numérotés de la façon suivante :



Et on considère l'hamiltonien :

$$H = J_4 (P_{1,2,3,4} + P_{4,3,2,1}) + J_2 (P_{1,2} + P_{2,3} + P_{3,4} + P_{4,1}) + J'_2 P_{2,4} \quad (5.1)$$

Le système possède six énergies propres : deux singulets $S = 0$, trois triplets $S = 1$ et le secteur ferromagnétique $S = 2$. Les fonctions d'onde et leurs énergies sont données Table 5.1. Le système est ferromagnétique à $J_4 = 1$ et $J_2 = J'_2 = -2$ (Fig. 5.3). Ceci provient du fait que le réseau triangulaire infini contient autant de liens que de losanges tandis que le losange unique contient cinq fois plus de liens (avec couplage ferromagnétique). Ceci impose de considérer des systèmes plus grands comme points de départ d'un calcul de type liaison forte, de sorte que l'équilibre entre couplages J_2 et J_4 soit mieux respecté.

C'est le triangle à six spins qui est le premier système avec un fondamental $S = 0$ et un gap d'ordre 1 pour toutes les excitations (Fig. 5.1). Les autres amas considérés sont ferromagnétiques ($N = 4$; Fig. 5.3), ferrimagnétiques ($N = 8$; Fig. 5.4 droite) ou possèdent un gap de spin faible ($N = 6$; Fig. 5.2). De même qu'il faut au moins trois spins pour représenter la structure locale d'un état de Néel avec trois sous-réseaux à 120 degrés, le triangle à six spins est le motif minimal où les corrélations du modèle $J_2/J_4 = -2$ peuvent se développer. Ceci doit d'ailleurs être rapproché de la géométrie des corrélations dimère-dimère discutée plus haut (§ 4.2.2) et de la grande stabilité du fondamental quand N est multiple de six (§ 4.3.1), données qui corroborent la pertinence de ce motif.

5.1.2 Triangles à six spins $S = 0$

Si la fonction d'onde du fondamental peut être pensée en termes d'une "brique de base", le triangle à six spins est le premier candidat naturel. Nous calculons l'énergie variationnelle d'un pavage régulier de ces triangles. La fonction d'onde $|\psi\rangle$ considérée est le produit tensoriel de fonctions d'ondes de triangles libres. Cet état est un singulet mais n'est pas un état propre de l'hamiltonien, à cause des termes qui couplent deux, trois ou quatre triangles adjacents. L'énergie variationnelle $\langle\psi|H|\psi\rangle$ est donnée Fig. 5.6 pour le modèle $J_2 - J_4$. Pour construire $|\psi\rangle$, chaque triangle est placé dans le fondamental qu'il aurait s'il était isolé. La discontinuité à $J_2/J_4 = -2.33$ correspond au couplage où le triangle de six spins avec conditions aux bords libres devient ferromagnétique (voir Fig. 5.5). Ce saut signifie que le pavage de triangles ferromagnétiques n'est pas l'état de plus basse énergie au

S	$ \Psi\rangle$	E	$E(J_4 = 1, J_2 = J'_2 = -2)$
0		$-2J_4 + 2J_2 - J'_2$	-4
0	$\frac{1}{\sqrt{3}} \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 1} \\ \text{Diagram 2} \end{array} \right]$	$+2J_4 - 2J_2 + J'_2$	4
1	$\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{array}{c} \text{Diagram 3} \\ \text{Diagram 4} \end{array} \right]$	$-2J_4 + J'_2$	-4
1		$2J_2 + J'_2$	-6
1		$2J_2 - J'_2$	-2
2		$2J_4 + 4J_2 + J'_2$	-8

TAB. 5.1: Spectre d'un losange à 4 sites. Les traits représentent des dimères $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ et les sites isolés sont "haut" $|\uparrow\rangle$. Pour les états $S = 1$ et $S = 2$ on obtient les fonctions d'ondes de S^z inférieurs par application de S^- . La colonne de droite donne les énergies pour $J_4 = 1$ et $J_2 = J'_2 = -2$, comme Fig. 5.3.

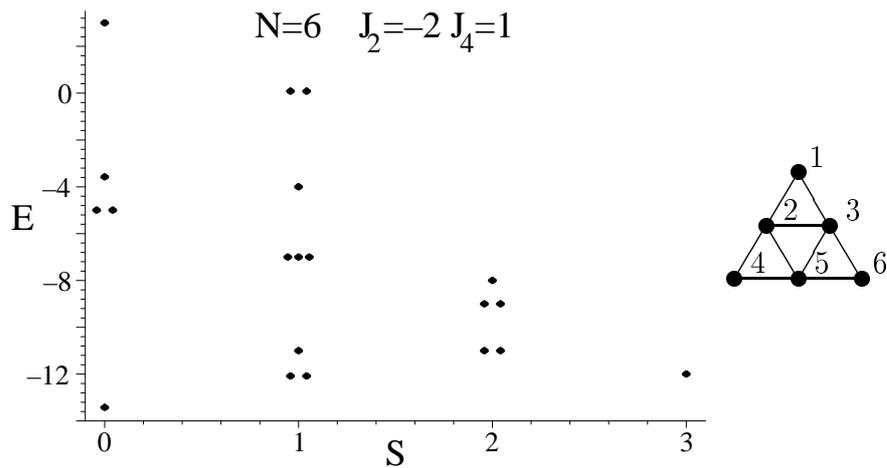


FIG. 5.1: Spectre du triangle à 6 spins $J_2/J_4 = -2$. C'est l'échantillon qui, avec des conditions aux bords libres, possède le plus grand gap ($\Delta = 1.3416$).

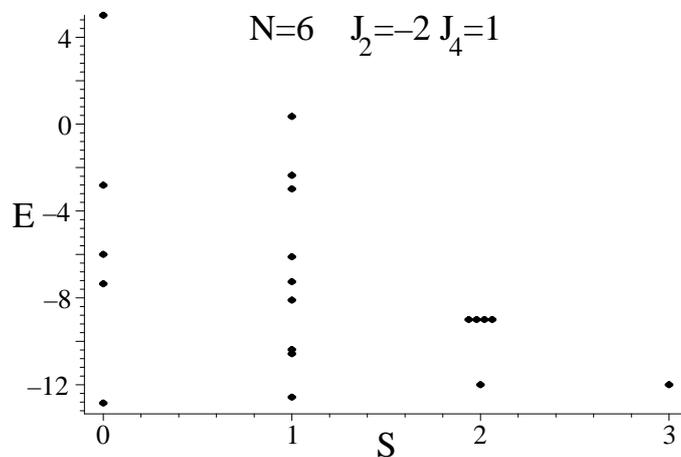


FIG. 5.2: Spectre d'une bande de $2 \times 3 = 6$ spins à $J_2 = -2$, $J_4 = 1$. Le gap vaut $\Delta = 0.2666$.

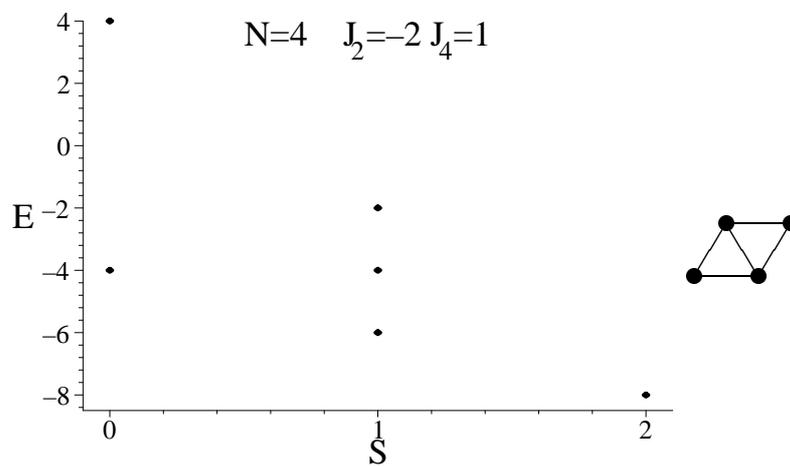


FIG. 5.3: Losange à 4 spins. Le fondamental est de spin 2 et la première excitation est de spin 1. Les fonctions d'onde sont données Table 5.1.

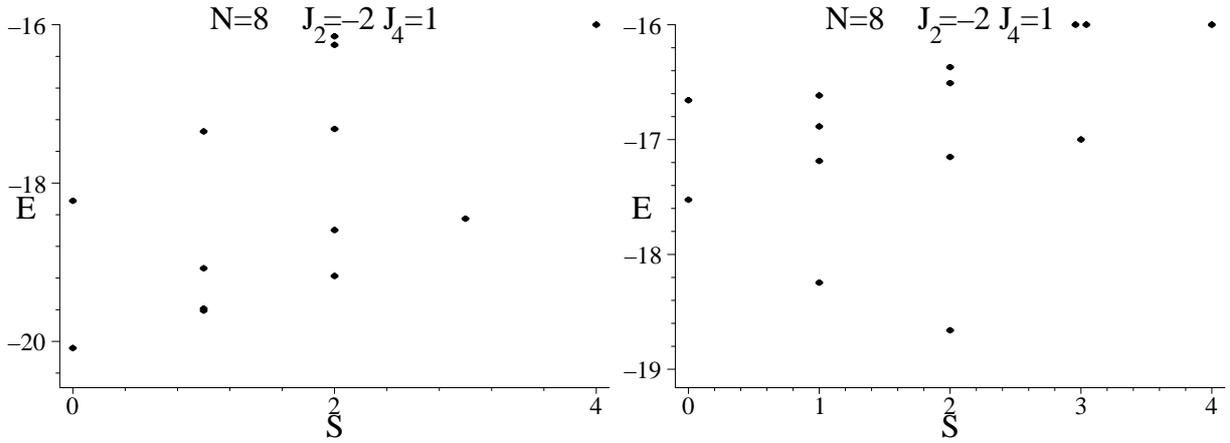


FIG. 5.4: Premiers états du spectre $J_2 = -2, J_4 = 1$ pour 8 spins. À gauche, les spins sont en étoile (gap $\Delta = 0.4740$), à droite, ils forment une bande de $2 \times 4 = 8$. Le second système est ferrimagnétique.

voisinage de $J_2/J_4 \simeq -2.33$. Le pavage de triangles $S = 0$ reste énergétiquement favorable alors qu'un triangle isolé est déjà ferromagnétique quand on diminue J_2 . Ceci est en accord avec le diagramme de phases obtenu par diagonalisation de grands systèmes, qui indique une transition vers le ferromagnétisme au voisinage de $J_2/J_4 \simeq -4.4$.

Il est possible de créer une excitation localisée $|\psi_{\mathbf{x}}\rangle$ en \mathbf{x} à partir de l'état $|\psi\rangle$ en plaçant le triangle \mathbf{x} du pavage dans le premier état excité du spectre d'un triangle isolé. Pour $J_2 > -2.33$, $|\psi_{\mathbf{x}}\rangle$ est un état triplet puisque la première excitation du triangle libre est un état de spin $S = 1$ (cercles Fig. 5.5). La différence d'énergie $\Delta = \langle \psi_{\mathbf{x}} | H | \psi_{\mathbf{x}} \rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle$ est donnée Fig. 5.7. Le fait que Δ soit positif est nécessaire à la cohérence du calcul : l'état variationnel pavage de triangles doit être stable vis-à-vis de l'excitation d'un triangle (ce qui est le cas pour $J_2/J_4 > -2.33$). Au voisinage de $J_2/J_4 = -2$, nous vérifions également la stabilité de $|\psi\rangle$ vis-à-vis d'une onde plane $|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} |\psi_{\mathbf{x}}\rangle$. Ce dernier calcul donne une relation de dispersion pour les excitations triplets et une valeur non nulle du gap à son minimum de l'ordre de 0.5 pour $J_4 = 1$ et $J_2 = -2$. Pour les raisons qui vont suivre, ce calcul du gap doit être vu davantage comme un test de cohérence qu'une réelle prédiction de sa valeur.

Il est important de comparer l'énergie $\langle \psi | H | \psi \rangle$ aux résultats de diagonalisations exactes portés sur la même figure 5.6. Il apparaît que ce résultat de liaison forte ($E/N = -2.783$ pour $J_2 = -2, J_4 = 1$) ne permet pas d'atteindre des énergies meilleures que les solutions ordonnées classiques ou que celles trouvées par la méthode des bosons de Schwinger. À $J_2 = -2, J_4 = 1$ par exemple, les différentes approximations mentionnées donnent $E/N \simeq -3$, tandis que l'extrapolation à $N = \infty$ à partir des diagonalisations donne $E/N \simeq -4$ (Fig. 4.10 page 70). Les interactions sont, par construction, optimisées

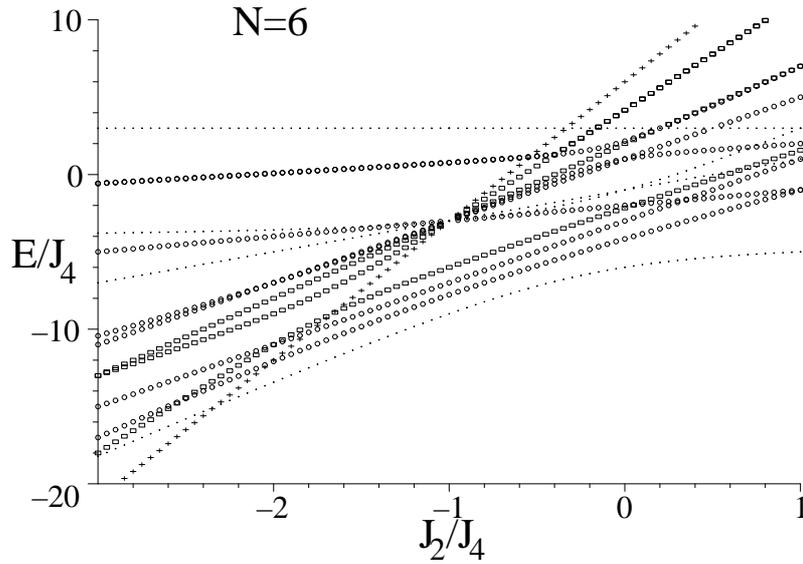


FIG. 5.5: Spectre du modèle $J_2 - J_4$ sur un triangle à 6 spins, en fonction de J_2/J_4 . Points : $S = 0$, Cercles : $S = 1$, Carrés : $S = 2$, Croix : $S = 3$. Le système est ferromagnétique pour $J_2 \leq -7/3$.

à l'intérieur d'un triangle mais les termes de l'hamiltonien qui couplent plusieurs triangles du pavage augmentent beaucoup l'énergie moyenne.

Cette assez mauvaise performance souligne qu'en dépit d'une faible longueur de corrélation, il est difficile de rendre compte quantitativement de l'énergie du fondamental dans le cadre d'une approximation de liaison forte sans invoquer d'importantes résonances quantiques entre différents pavages possibles pour abaisser notablement l'énergie. L'idée est due à ANDERSON [8, 43] : le fondamental quantiquement désordonné d'un système de spins pourrait être pensé comme une combinaison linéaire d'états pavages de dimères ou de "*valence-bond states*". Cette vision d'une résonance quantique entre un grand nombre d'états dégénérés qui stabilise un état unique et homogène (sans brisure de symétrie) fournit un cadre élégant à l'existence de corrélations à courte portée et à la restauration des symétries du réseau. Ce concept de "*Resonating Valence-Bond*" (RVB) a initié de nombreuses réflexions sur les liquides de spins [82, 115, 132, 134] et leurs liens possibles avec les supraconducteurs à haute température critique [9, 12]. Toutefois, les modèles explicites où le fondamental est un état RVB unique font défaut. Que la phase liquide de spins du modèle d'échange multiple puisse être une réalisation de l'idée originale d'ANDERSON est la ligne directrice d'une grande partie de la suite de cette présentation.

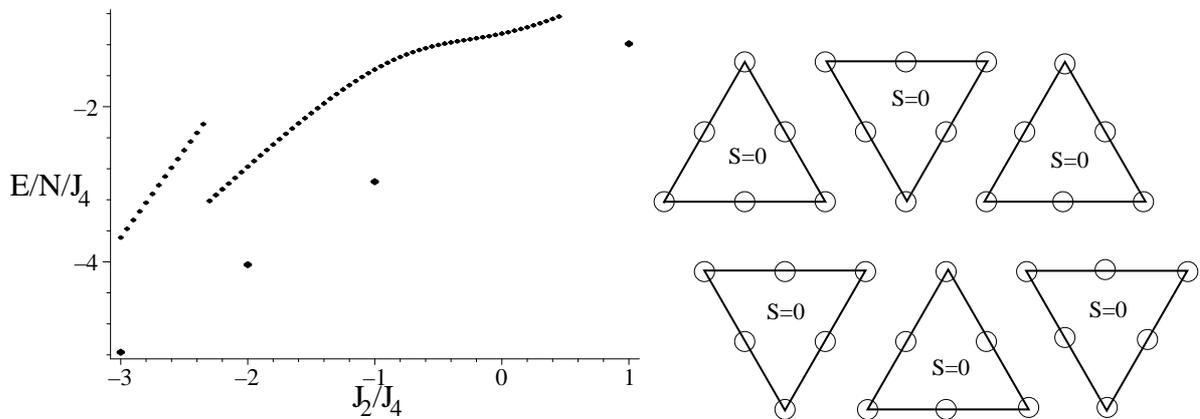


FIG. 5.6: Énergie moyenne d'un pavage de triangles pris chacun dans leur état fondamental libre. Les quatre points isolés indiquent l'énergie *exacte* du fondamental pour un système de 16 sites. Il existe une deuxième façon de paver régulièrement le réseau triangulaire avec des triangles mais ce pavage donne l'énergie la plus basse.

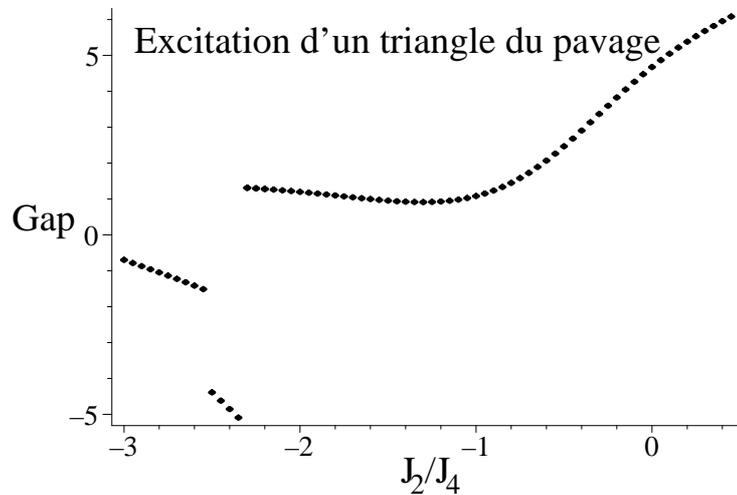


FIG. 5.7: Coût énergétique de l'excitation d'un triangle du pavage. Pour $J_2/J_4 > -7/3$ le pavage est stable dans le sens où placer un losange dans un état excité augmente l'énergie totale. Pour $J_2/J_4 < -7/3$, un triangle isolé est ferromagnétique mais le système $N = \infty$ ne l'est pas, puisque l'excitation d'un triangle (dans un état $S = 0$ par exemple) abaisse l'énergie.

5.2 Moment magnétique local

L'approche précédente était inspirée des faibles corrélations spin-spin et dimère-dimère. Elle nous a conduit à assimiler le fondamental à une juxtaposition de petits systèmes dé-corrélés, et donc de spin nul pour que l'état global soit un singulet. Ceci nous a conduit à envisager le triangle à six spins Fig. 5.1 comme une cellule élémentaire plausible. Nous proposons ici un point de vu différent. Tout d'abord, nous montrons que les données de corrélations spin-spin présentées au § 4.2 témoignent de l'existence de moments magnétiques locaux importants dûs au couplage premier voisin J_2 ferromagnétique.

Pour un motif \mathcal{C} à n spins on définit le spin moyen $S_{\mathcal{C}}$ par $\langle \left(\sum_{i \in \mathcal{C}} \vec{S}_i \right)^2 \rangle = S_{\mathcal{C}}(S_{\mathcal{C}} + 1)$. On peut alors comparer la valeur de $S_{\mathcal{C}}$ mesurée dans le fondamental du système (c'est une fonction des corrélations $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ pour $i, j \in \mathcal{C}$) avec celle d'un ensemble de n spins libres parmi N , ces N spins étant dans un état de spin $S = 0$ ¹. Le rapport $\frac{S_{\mathcal{C}}}{S_{\mathcal{C}}^{\text{libres}}}$ indique dans quelle mesure les spins du motif \mathcal{C} s'écrantent grâce à leurs interactions. Une valeur de 1

¹Voici comment calculer la valeur moyenne du carré du spin pour des spins libres, quand on les contraint à appartenir à un état de spin total donné. Si on fixe $S^z = m$, les nombres de spins haut et bas valent $n_{\uparrow} = N/2 - S^z$ et $n_{\downarrow} = N/2 + S^z$. Une configuration de spins n'est diagonale pour P_{ij} que si les spins i et j sont dans le même état, d'où :

$$\text{Tr}[P_{ij}]_{|S^z=m} = C_{N-2}^{n_{\downarrow}} + C_{N-2}^{n_{\uparrow}-2}$$

On en déduit la trace de P_{ij} quand S^z et \vec{S}^2 sont fixés :

$$\text{Tr}[P_{ij}]_{|S^z=S, \vec{S}^2=S(S+1)} = \text{Tr}[P_{ij}]_{|S^z=S} - \text{Tr}[P_{ij}]_{|S^z=S+1}$$

La valeur moyenne de P_{ij} sur toutes les configurations de spin total $\vec{S}^2 = S(S+1)$ est donc :

$$\langle P_{ij} \rangle_{|S=} = \frac{C_{N-2}^{N/2-S} + C_{N-2}^{N/2-S-2} - C_{N-2}^{N/2-S-1} - C_{N-2}^{N/2-S-3}}{C_N^{N/2+S} - C_N^{N/2+S+1}}$$

qui se simplifie en :

$$\langle P_{ij} \rangle_{|S=} = \frac{4S(S+1) + N(N-4)}{2N(N-1)}$$

Enfin, puisque $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle = \frac{1}{2}(P_{ij} - \frac{1}{2})$, on obtient :

$$\left\langle \left(\sum_{i=1}^n \vec{S}_i \right)^2 \right\rangle_{|S=} = \frac{3}{4}n + \frac{1}{2}n(n-1) \left[\frac{4S(S+1) + N(N-4)}{2N(N-1)} - \frac{1}{2} \right]$$

Dans le cas où on s'intéresse aux états de spin $S = 0$ on aboutit à :

$$\left\langle \left(\sum_{i=1}^n \vec{S}_i \right)^2 \right\rangle_{|S=0} = \frac{3}{4} \frac{n(N-n)}{N-1}$$

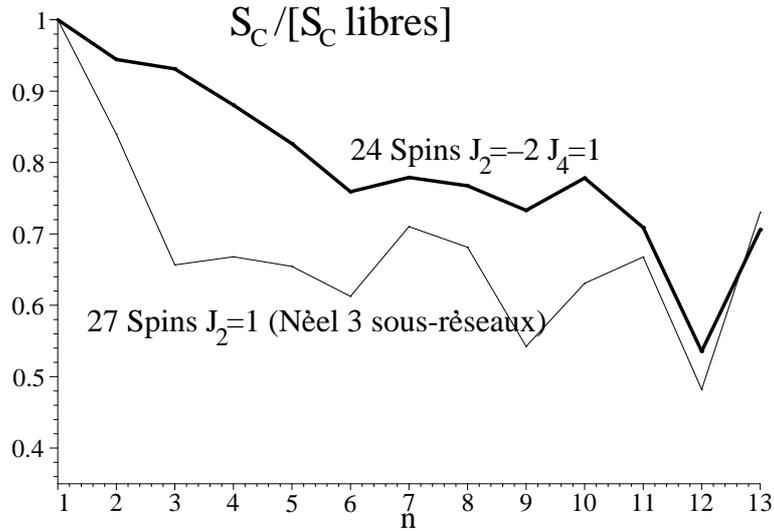
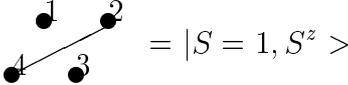


FIG. 5.8: Comparaison de la fonction d'écrantage du fondamental d'un système ordonné à trois sous-réseaux (hamiltonien d'Heisenberg) avec celle du fondamental d'un hamiltonien d'échange multiple. La remontée à partir de $n = 12$ est due à la symétrie de la courbe par rapport à $N/2$: dans un état $S = 0$, un amas de n sites et sont complémentaire à $N = n$ sites ont le même spin moyen $S_C(n) = S_C(N - n)$.

signifie aucun écrantage tandis que 0 indique qu'on se trouve dans un état propre de $S_C = 0$ (ce qui n'arrive que lorsqu'on prend pour \mathcal{C} le système tout entier et donc que $n = N$). La figure 5.8 compare les résultats obtenus avec l'hamiltonien d'Heisenberg (ordre de Néel à trois sous-réseaux) et ceux obtenus avec un hamiltonien d'échange multiple. La structure à trois sous-réseaux du système ordonné apparaît clairement : les motifs contenant un même nombre de spins dans chaque sous-réseau sont les mieux écrantés : $n = 3, 6, 9$ et 12 . Les corrélations dans le fondamental de l'hamiltonien d'échange multiple n'indiquent pas une telle rigidité : la fonction d'écrantage décroît de manière plus régulière et plus lente. Sur un amas de moins de six spins, la fonction d'onde liquide de spins possède un moment magnétique plus important que la fonction d'onde antiferromagnétique. Ceci est une conséquence directe de la portée des interactions (le terme d'échange à quatre corps couple des spins jusqu'à distance $\sqrt{3}$) mais surtout de la frustration créée par le couplage ferromagnétique $J_2 < 0$ qui favorise les fluctuations de l'aimantation locale. Toute description de la fonction d'onde devra incorporer cet ingrédient : le fondamental est globalement un état singulet mais c'est le résultat de l'écrantage de moments locaux mettant en œuvre plusieurs spins.

5.3 Losanges $S = 1$

L'analyse qui précède suggère un nouveau point de vue sur la structure locale de la fonction d'onde. Faisons maintenant l'hypothèse suivante : sous l'action conjointe de l'interaction ferromagnétique $J_2 < 0$ et de J_4 , les degrés de liberté effectifs à l'échelle de un ou deux pas du réseau sont des ensembles cohérents de plusieurs spins qui ont un moment non nul. Après avoir intégré les degrés de liberté liés aux plus courtes distances, nous supposons avoir des spins effectifs définis sur plusieurs sites dont l'orientation fluctue mais dont le moment est à peu près fixe. Puisque l'état fondamental exact est de spin nul, il reste nécessairement des interactions antiferromagnétiques importantes entre ces moments, interactions qui les organisent à très basse énergie (ou bien, de manière équivalente, à plus grande distance) en un singulet global. Autrement dit, nous essayons de décrire la fonction d'onde en termes d'objets plus grands qu'un spin $\frac{1}{2}$ élémentaire mais plus petit que les triangles de six spins décrits plus haut. Le choix le plus simple est de considérer des losanges de quatre spins dans un état triplet $S = 1$. L'état triplet de plus basse énergie pour un losange isolé en présence d'échange à quatre corps et de $J_2 < 0$ est formé d'un singulet sur la grande diagonale et d'un triplet sur la petite (voir spectre Tab. 5.1), il constitue donc le candidat le plus naturel :



$$= |S = 1, S^z \rangle \quad (5.2)$$

Un tel scénario reste spéculatif s'il n'est pas confronté aux données numériques sur la fonction d'onde exacte. Pour un système de 16 sites, nous calculons pour chaque état propre sa projection dans le sous-espace \mathcal{H} engendré par les produits tensoriels d'états de losanges de spin 1. Une famille génératrice de cet espace est constituée des fonctions d'ondes

$$|\Psi\rangle = \bigotimes_{i=1, \dots, \frac{N}{4}} |S = 1, m_i \in \{-1, 0, 1\}\rangle \quad (5.3)$$

où $|S = 1, m_i\rangle$ est la composante $S^z = m_i$ du triplet sur le losange i du réseau. Pour écrire $|\Psi\rangle$, un pavage particulier du réseau par des losanges a été choisi (il existe 12 pavages réguliers du réseau triangulaire avec des losanges). Pour chaque pavage on peut écrire $3^{N/4}$ fonctions d'onde. Mais l'espace \mathcal{H} que nous considérons est engendré par tous les états (Eq. (5.3)) que l'on peut définir sur tous les pavages, il est donc de dimension supérieure à $3^{N/4}$ (et inférieure à $12 \times 3^{N/4}$). Nous soulignons que \mathcal{H} ne dépend pas d'un pavage particulier du réseau mais qu'il permet au contraire des résonances entre plusieurs pavages de losanges de spin 1. C'est en ce sens qu'il est de type RVB. Les sous-espaces associés aux

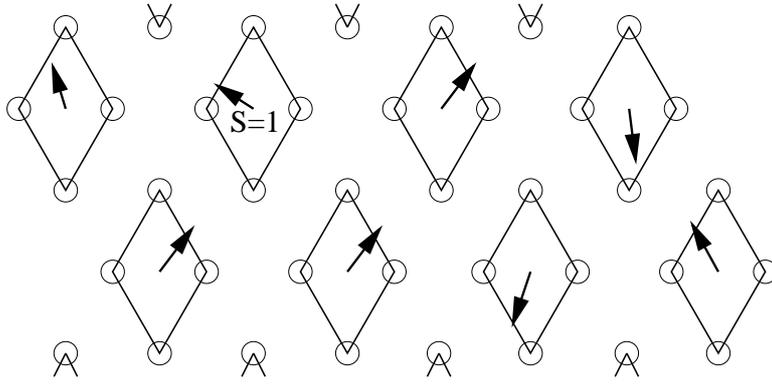


FIG. 5.9: État pavage de losanges de spin 1

différents pavages ne sont pas orthogonaux et par conséquent, effectuer numériquement une projection sur \mathcal{H} n'est pas immédiat ².

Le carré de la norme du vecteur projeté est donné en abscisse Fig. 5.10 pour l'hamiltonien $J_2/J_4 = -2$, $J_5/J_4 = 0.2$, $J_6/J_4 = 0.08$. Le spectre est représenté en fonction du spin total dans la partie droite de la figure. Par construction, l'espace étudié ne contient que des états de spin total $S \leq N/4$ et la projection d'un état de spin plus grand donne zéro. Nous constatons une corrélation entre l'énergie et la projection : les états de basse énergie ont les plus grandes projections. Le carré de la norme de la projection du fondamental vaut 0.429. À quoi devons nous comparer ces valeurs ? Il y a quatre losanges sur le réseaux $N = 16$ et les règles de composition des moments cinétiques donnent trois secteurs de spin 0 quand on couple quatre spins 1. La dimension de $\mathcal{H} \cap \{S = 0\}$ est donc de dimension $\leq 3 \times 4 = 12$. De l'autre côté, le secteur $S = 0$ des 16 spins est de dimension 1430. La projection est donc en moyenne de l'ordre du pour cent sur un état $S = 0$ aléatoire, ce qui est très inférieur aux valeurs trouvées pour les états de basse énergie. On trouve des valeurs de projections beaucoup plus faibles sur les états du bas du spectre si on choisit pour chaque losange un des deux autres secteurs triplet (celui d'énergie -4 ou -2 dans le spectre Tab. 5.1). Ceci signifie que le sous-espace \mathcal{H} contient effectivement une partie des degrés de liberté de basse énergie.

L'information ainsi recueillie sur l'état fondamental n'est pas valide à grande distance, dans le sens où son recouvrement avec l'espace \mathcal{H} tend probablement vers zéro à la limite thermodynamique. Par ailleurs, il existe probablement d'autres espaces définis de manière analogue et avec lesquels les états de basse énergie ont un recouvrement important. Mais celui-ci a le mérite d'apporter un éclairage simple sur deux aspects importants du modèle

²Notons par a un pavage particulier du réseau. Soit \mathcal{H}_a l'espace des états losange de type Eq. (5.3) associés au pavage a . Alors \mathcal{H} est l'espace engendré par la réunion de tous les \mathcal{H}_a . Nous calculons la projection P sur \mathcal{H} à l'aide des projecteurs P_a sur les \mathcal{H}_a par : $1 - P = \lim_{n \rightarrow \infty} (\prod_a (1 - P_a))^n$.

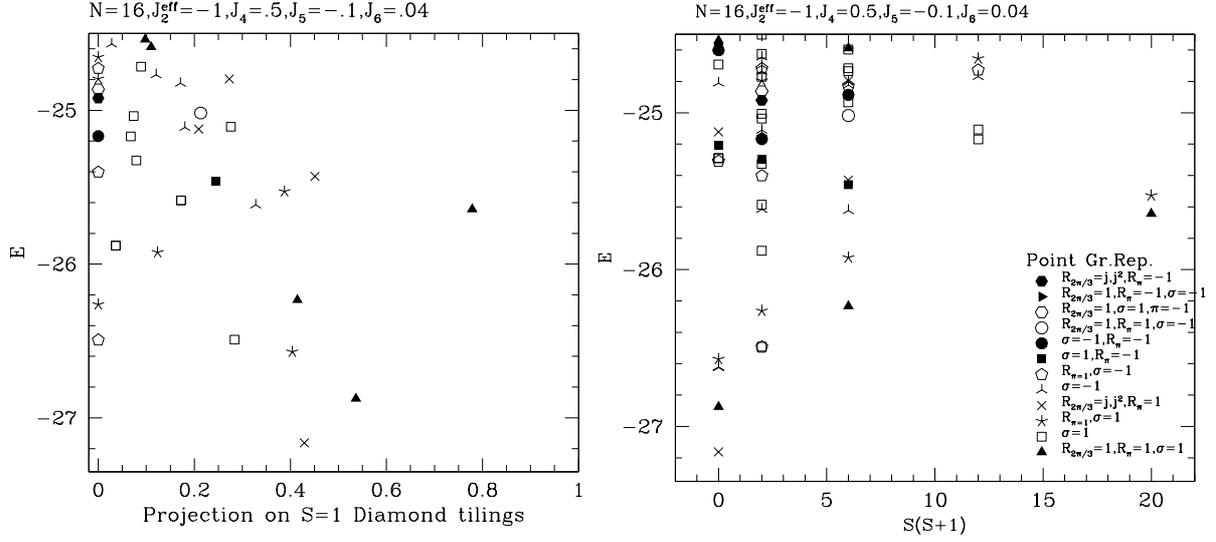


FIG. 5.10: Projection des états de basse énergie d'un système à 16 sites dans un sous-espace engendré par des losanges de spin 1.

qui seront discutés plus loin. Tout d'abord les losanges de spin 1 fournissent une image au plateau d'aimantation à $M/M_{sat} = \frac{1}{2}$ discuté au chapitre 7 (page 118). Ensuite, au chapitre 8 traitant de la thermodynamique, l'espace \mathcal{H} nous donnera une explication qualitative à l'anomalie de basse température dans la chaleur spécifique (page 130).

5.4 État “valence-bond solid” variationnel

5.4.1 Construction

AFFLECK, KENNEDY, LIEB et TASAKI [4] introduisent en 1987 une famille de modèles de spins pour lesquels ils construisent explicitement les fondamentaux exacts. Quelle que soit le réseau ou même la dimension d'espace, ils obtiennent un fondamental unique et non dégénéré quand le double du spin S en chaque site est multiple du nombre de coordination z du réseau :

$$2S = 0 \pmod{z} \quad (5.4)$$

La construction du fondamental est schématisée Fig. 5.11 dans le cas du réseau carré ($z = 4$) avec des spins $S = 2$. Elle consiste à voir le spin S de chaque site comme la composante complètement symétrique du couplage de z spins $\frac{1}{2}$. On définit un pavage de dimères sur le réseau à zN sites en associant en singulets les deux spins $\frac{1}{2}$ “virtuels” des extrémités de chaque lien du réseau “réel”. L'état VBS est alors obtenu en symétrisant cette fonction d'onde par rapport aux z spins “virtuels” de chaque site réel.

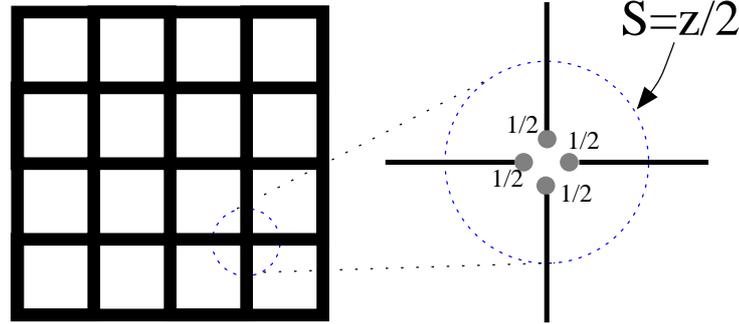


FIG. 5.11: État VBS pour des spins $S = 2$ sur le réseau carré.

Dans le cas du réseau triangulaire avec spins $\frac{1}{2}$, la condition Eq. (5.4) n'est pas satisfaite. Cependant, la procédure peut inspirer une façon de construire de nouveaux états. Pour cela nous définissons un super-réseau sur le réseau triangulaire. Chaque super-site est la réunion de n sites du réseau triangulaire et la coordinance du super-réseau vaut z . Alors chaque super-site possède un spin $S = \frac{n}{2}$. Si on choisit n et z tels que $n = z$ le super-réseau satisfait la condition Eq. (5.4), ce qui revient simplement à considérer les spins $\frac{1}{2}$ du réseau triangulaire comme les spins “virtuels” de la construction VBS. Deux exemples $n = 4$ et $n = 3$ sont présentés Fig. 5.12. Ces états ne sont pas uniques puisque qu'il y a plusieurs positions possibles pour définir le super-réseau. Dans le cas $n = 4$, il y a 12 façons de placer le super-réseau carré sur le réseau triangulaire : chaque configuration peut être translatée en quatre endroits et tournée dans trois directions. Notons également qu'il s'agit d'un état qui possède de l'ordre à longue portée : si un losange est ferromagnétique, alors tous ses translatés d'un nombre pair de pas le sont aussi. En outre, il perd des symétries spatiales du réseau triangulaire (translation d'un pas notamment). Il n'est pas non plus invariant par rotation de $2\pi/3$ autour de l'origine. Nous reviendrons sur les éventuelles implications de la dégénérescence de cette fonction d'essai au chapitre suivant (§ 6.1.5).

5.4.2 Énergie

Nous calculons l'énergie pour l'hamiltonien $J_4 = 1$, $J_2 = -2$ à l'intérieur de l'espace variationnel que forment les états VBS. Ce calcul, mené sur un réseau à 12 sites, donne une très bonne énergie variationnelle. Le fondamental exact sur ce même réseau à 12 sites se trouve à $E/N \simeq -4.128$ (Fig. 4.12 page 72) et l'énergie VBS-losange à $E/N = -3.75$. L'échelle d'énergie est donnée par l'énergie de l'état ferromagnétique à $E/N = 0$ et celle du fondamental classique (uud) à $E/N = -3$ pour les échanges en question. Ce résultat

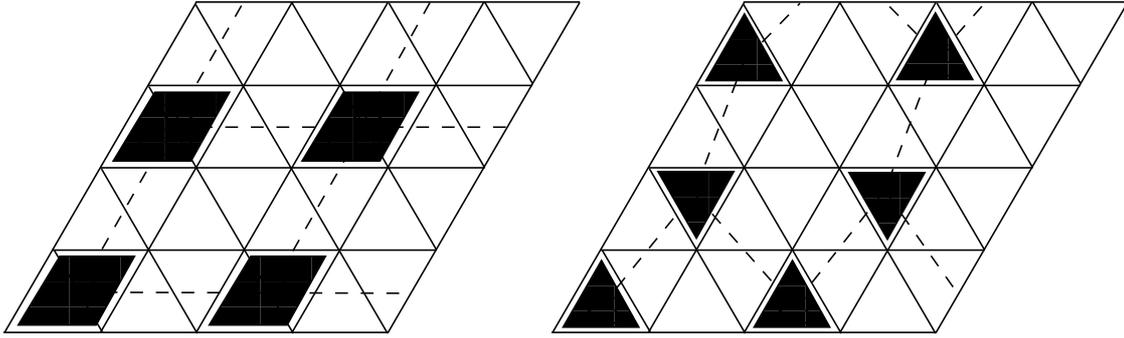


FIG. 5.12: États “pseudo-VBS” sur le réseau triangulaire. **Gauche** : État VBS-losange. Les losanges noirs représentent les spins $S = 2$ de la fonction d’onde VBS. Ils forment un réseau carré (traits pointillés). **droite** : État VBS-triangle. Le super-réseau de triangles est hexagonal. Il y a 18 façons de placer le réseau hexagonal : 3×2 translations et 3 rotations.

variationnel est le *meilleur que nous ayons construit*³. L’énergie obtenue est en particulier meilleure que l’énergie obtenue par les bosons de Schwinger⁴.

La raison de cette énergie très compétitive est que les états VBS fournissent par construction des corrélations ferromagnétiques et des moments locaux importants à l’intérieur des plaquettes et en même temps, des corrélations antiferromagnétiques à plus grande distance (entre losanges adjacents). À ce titre, il faut admettre que la fonction d’onde VBS que nous construisons n’est pas très éloignée des pavages de losanges de spin 1 du paragraphe 5.3. La différence est dans l’amplitude du spin effectif local. D’ailleurs, la construction VBS permet de varier la taille n de la cellule élémentaire, et donc de régler l’amplitude des corrélations ferromagnétiques. Par exemple, la fonction VBS pour des spins $\frac{3}{2}$ sur le réseau hexagonal donne, transportée sur le réseau triangulaire, l’état représenté dans la partie droite de la figure 5.12. L’énergie de cet état $n = 3$ est légèrement plus élevée ($E/N = -3.42$ sur $12 = 3 \times 4$ sites) que celle du pavage carré, mais reste meilleure que l’énergie des bosons de Schwinger. D’un autre côté, il est envisageable de modifier le couplage ferromagnétique J_2 pour rapprocher l’état exact d’un état VBS.

³Considérons une fonction d’onde (pseudo-) VBS où la maille contient n spins réels. La symétrisation de chaque maille multiplie le nombre de termes dans la fonction d’onde par $n!$. Quand toutes mailles sont symétrisées, on a $(n!)^{N/n}$ termes. Pour $N = 12$ et $n = 4$, cela donne 13824, tandis que la taille suivante donne 331776. Le nombre de termes dans un produit scalaire étant proportionnel au carré du nombre de termes dans la fonction d’onde, nous nous contentons, dans un premier temps au moins, de la taille $N = 12$.

⁴La solution trouvée par la théorie des bosons de Schwinger pour cet hamiltonien est un état de Néel colinéaire à deux sous-réseaux avec une énergie $E/N = -2.96$ pour $N = 192$ sites.

Chapitre 6

Physique de basse énergie

6.1 Symétrie du fondamental

Du point de vue des symétries, le gap de spin décrit au chapitre précédent nous assure que, au moins dans la région autour de $J_2/J_4 = -2$, la symétrie $SU(2)$ n'est pas spontanément brisée à $T = 0$. Nous dirigeons maintenant notre attention sur le secteur singulet, et posons la question de la dégénérescence du fondamental et d'une possible brisure de symétrie *spatiale* à la limite thermodynamique. Ceci est capital pour caractériser la famille de liquides de spins à laquelle le modèle appartient. De nombreux fondamentaux, qui diffèrent par leur symétrie et leurs excitations, n'ont pas d'ordre magnétique à longue portée et un fondamental $S = 0$. En deux dimensions, parmi les hamiltoniens sur réseau de Bravais (sans dimérisation dans les couplages ni autres liens inéquivalents), il y a trois situations importantes où la fonction d'onde du fondamental est bien comprise :

Modèles de KLEIN [73] pour spins $\frac{1}{2}$: Ces hamiltoniens généralisent le modèle de la chaîne MAJUMDAR-GOSH [85] pour un réseau arbitraire. Ces hamiltoniens sont des sommes d'opérateurs de projection, ils contiennent des interactions d'échange multiple (annexe B). Pour ces modèles, tout pavage de dimères est un état propre d'énergie nulle, et donc un fondamental ¹. De manière générale, leur dégénérescence est extensive en dimension 2.

“Valence Bond Crystal” (VBC): Il possède de l'ordre dimère-dimère à longue portée, ou de l'ordre de plaquette. Il y a un gap de spin et des corrélations magnétiques à courte portée. La symétrie de translation est brisée et le fondamental est dégénéré en conséquence. Le modèle d'Heisenberg $J_1 - J_2$ sur le réseau carré est probablement une réalisation. Il n'y a pas d'ordre de Néel au voisinage de $J_2/J_1 \simeq \frac{1}{2}$ [32, 37, 40, 48, 121] et vraisemblablement une brisure de la symétrie de translation [47, 117, 121,

¹Dans le cas du réseau hexagonal notamment, CHAYES, CHAYES et KIVELSON [33] montrent que ces pavages constituent *tous* les fondamentaux.

146]. La brisure de symétrie est probablement de type colonaire [47, 76, 117, 128] mais un ordre de plaquette sans brisure de l'invariance sous la rotation $\mathcal{R}_{\pi/2}$ a aussi été proposé [146]. Ces brisures de symétrie sont aussi obtenues dans les approches de grand N des modèles $SU(N)$ [6, 102–104] quand $2S$ n'est pas multiple de la coordinance z : $2S \neq 0 \pmod{z}$.

“Valence Bond Solid” (VBS): AFFLECK *et al.* [4, 5]. Le modèle ne peut être construit que lorsque $2S$ est multiple de la coordinance z : $2S = 0 \pmod{z}$ (§ 5.4). Cet état n'existe pas pour des spins $\frac{1}{2}$. Le fondamental est unique avec des conditions périodiques, ne brise aucune symétrie et possède un gap de spin. Les corrélations magnétiques décroissent exponentiellement avec la distance. La phase de HALDANE [53–56] des chaînes de spins entiers appartient à la même classe d'universalité.

Il y a très peu de modèles de spins $\frac{1}{2}$ où des résonances entre différents pavages de dimères à courte portée sélectionnent une combinaison unique de ces états, combinaison qui soit symétrique sous les opérations de symétries spatiales. Il a été proposé [33] qu'un hamiltonien de KLEIN perturbé [73] puisse réaliser un tel état RVB courte portée. La limite de grand N de modèles d'Heisenberg (généralisation $Sp(N)$) sur les réseaux kagome et triangulaire est étudiée par SACHDEV [116]. Le résultat fait apparaître une phase désordonnée, avec un gap de spin et sans brisure de symétrie. Il n'est pas certain que cette phase puisse être réalisée dans un modèle $SU(2)$ de spins $\frac{1}{2}$. Elle ne l'est en tout cas pas dans le modèle d'Heisenberg sur le réseau triangulaire qui possède de l'ordre de Néel à température nulle [18, 63, 66].

Finalement, le “Quantum Hard-Core Dimer Model” (QHCDM) de ROKHSAR et KIVELSON [115] possède un fondamental unique (à une dégénérescence 4 près, d'origine topologique et tout à fait similaire à celle discutée au § 6.1.3) pour une valeur particulière des paramètres $V = J$, c'est à dire quand l'énergie cinétique J des dimères est égale à la répulsion à courte portée V entre dimères parallèles². Sur le réseau carré, le hamiltonien QHCDM s'écrit :

$$H = \sum_{\text{plaquette}} \left[-J \left(\left| \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} \right\rangle \left\langle \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} \right| + h.c. \right) + V \left(\left| \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} \right\rangle \left\langle \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} \right| + \left| \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ \bullet \end{array} \right\rangle \left\langle \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ \bullet \end{array} \right| \right) \right] \quad (6.1)$$

H est défini directement sur les configurations de dimères. *Il n'a pas d'expression simple dans l'espace des spins*, elle ferait intervenir la matrice des produits scalaires des pavages de dimères. Cependant, l'équation (6.1) présente deux similitudes notables avec l'hamiltonien d'échange à quatre corps :

- L'action de $P_{1,2,3,4} + h.c$ sur une plaquette dans un état $\left| \begin{array}{c} \bullet \\ \text{---} \\ \bullet \end{array} \right\rangle$ ou $\left| \begin{array}{c} \bullet \\ | \\ \bullet \end{array} \right\rangle$ est identique à

²On montre alors que la combinaison à poids égal de tous les pavages de dimères premiers voisins, c'est à dire le prototype d'un état RVB courte portée, est fondamental.

celle du terme cinétique en J dans l'hamiltonien QHCDM, il échange ³ la paire de dimères verticaux et la paire de dimères horizontaux.

- Le terme d'échange cyclique $P_{1,2,3,4} + h.c$ contient une repulsion entre dimères parallèles analogue au terme V . On peut le constater à l'aide du tableau 5.1. L'état avec deux dimères parallèle maximise l'énergie. C'est l'état le plus excité de la plaquette en J_4 pur, il est dégénéré avec l'énergie ferromagnétique.

Le spectre du QHCDM au point $J = V$ présente une différence avec les résultats numériques sur le modèle d'échange multiple. Selon ROKHSAR et KIVELSON, le modèle possède un mode de basse énergie dans le secteur singulet au point $J = V$ (*résonons*) [115], ce que nous n'observons pas dans le cas de l'échange multiple. Puisque ces résonons peuvent acquérir un gap pour $V \neq J$, le QHDM reste un point de comparaison important pour les résultats numériques du modèle triangulaire.

Jusqu'à présent l'image RVB courte portée proposée par ANDERSON [8] n'a pas trouvé de réalisation définitive pour des spins $\frac{1}{2}$: il n'y a pas d'hamiltonien en deux dimensions qui soit à la fois explicite et reconnu comme ayant un gap et préservant toutes les symétries du réseau. De ce point de vue, le modèle d'échange multiple est du plus grand intérêt puisque les données numériques indiquent des corrélations à courte portée sans aucune sorte d'ordre à longue portée.

6.1.1 Premiers états singulets

Nous l'avons vu dans le cas de l'ordre de Néel, le spectre d'un système de taille finie peut renseigner sur les brisures de symétrie spontanées à la limite thermodynamique. C'est la quasi-dégénérescence du fondamental ou des niveaux de basse énergie qui, associée à un comportement précis des écarts d'énergie entre ces niveaux, témoigne d'une brisure de symétrie. Nous montrons ici que, selon toute vraisemblance, une dégénérescence finie caractérise l'hamiltonien d'échange multiple $J_2/J_4 = -2$ à la limite thermodynamique. À la lumière des trois prototypes de liquides de spins que nous venons de décrire brièvement, cette donnée *semble* signaler une forme de dimérisation spontanée. Nous donnons dans la section suivante (§ 6.1.2) un argument *contre cette hypothèse VBC*.

Dans quasiment tous les systèmes pairs ($N = 36, 30, 28, 24, 20, 18, 16, 12$) le fondamental appartient à la représentation triviale du groupe ponctuel et du groupe des translations. Cette représentation étant unidimensionnelle, le fondamental n'est pas dégénéré pour ces tailles finies. Au dessus du fondamental et en dessous de l'énergie du premier triplet, nous trouvons systématiquement moins de 10 états $S = 0$. Il n'y a donc pas d'entropie extensive à température nulle, ni d'excitations d'énergie arbitrairement faible. Cette situation contraste

³En l'absence de dopage (exactement un spin par site), le signe de J peut être changé par une redéfinition, une ligne sur deux, du signe de dimères horizontaux. Ainsi, $|J|$ se compare bien à $J_4 > 0$.

avec les spectres rencontrés dans l'étude du modèle d'Heisenberg sur le réseau kagome ou un nombre exponentiel d'états de spin $S = 0$ se trouvent sous la première excitation magnétique [140]. Ceci implique qu'à $J_2/J_4 = -2$ le système n'est pas critique quantique. Au contraire le gap de spin fixe une échelle d'énergie pour tous les types d'excitations.

Nous analysons maintenant les états singulets de basse énergie pour détecter si certains tombent sur le fondamental quand la taille du système augmente. En dépit d'irrégularités importantes d'un réseau à l'autre, on doit retenir trois informations importantes :

- Il n'y a pas de niveau $S = 0$ de basse énergie dans le secteur d'impulsion $\mathbf{k} = \mathbf{B}$ ($\pm\mathbf{B}$ sont les deux coins de la zone de Brillouin). Ceci n'est pas compatible avec la formation d'un motif qui aurait une périodicité multiple de trois dans une direction. Ceci confirme que l'ordre de dimères à $\pm\pi/3$ trouvé au chapitre précédent (Fig. 4.7), qui *semble* avoir une période trois, n'est que *local*.
- La plupart des spectres possèdent des états d'impulsion $\mathbf{k} = \mathbf{A}_{i=1,2,3}$ dans le gap de spin. Ces impulsions de milieu de bord de zone donnent des phases $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) = \pm 1$ pour toute translation \mathbf{x} . Si de tels états sont dégénérés avec un fondamental d'impulsion nulle, ils donnent une brisure de l'invariance par translation et une périodicité de deux pas du fondamental.

La figure 6.1 suggère que cette dégénérescence est réalisée à la limite thermodynamique. L'écart d'énergie entre le fondamental et le premier singulet de moment $\mathbf{k} = \mathbf{A}$ décroît très rapidement avec la taille du système de $N = 24$ à 36 , passant de $\Delta_{\mathbf{A}} = 2.5$ à $\Delta_{\mathbf{A}} = 0.243$. Il est instructif de comparer sur cette figure les comportements du gap de spin et du gap singulet pour les excitations d'impulsion $\mathbf{k} = \mathbf{A}$. Dans les deux cas on devine une réduction exponentielle des effets de taille avec N : le gap de spin tend vers une constante et le gap pour les vecteurs $\mathbf{k} = \mathbf{A}$ tend vers zéro. Cette disparition rapide des effets de taille corrobore l'hypothèse d'une longueur caractéristique finie ξ .

- Le secteur $S = 0$ du hamiltonien $J_2 = -2$ et $J_4 = 1$ pour $N = 36$ possède donc une quasi-dégénérescence quatre du fondamental (Fig. 6.5). L'état de plus basse énergie est unique et le niveau immédiatement au dessus ⁴ correspond, par symétrie, à un espace propre de dimension trois ($\mathbf{k} = \mathbf{A}_i$). Grâce à la grande taille de ce système, comparée à la longueur de corrélation supposée, nous pensons que ce spectre est qualitativement très proche de celui du système infini. Cette quasi-dégénérescence est donc un élément primordial dans l'analyse des symétries à la limite thermodynamique.

Dans les paragraphes qui suivent, nous analysons ces résultats. Nous expliquons en quoi ces données, malgré les apparences, ne sont pas en faveur d'une brisure de symétrie de type VBC ou "spin-Peierls". Ensuite, nous proposons une interprétation topologique

⁴Nous rappelons que seules les énergies des secteurs d'impulsion $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, \mathbf{B} et \mathbf{A}_i sont calculés sur l'échantillon $N = 36$ (*cf.* remarque page 69).

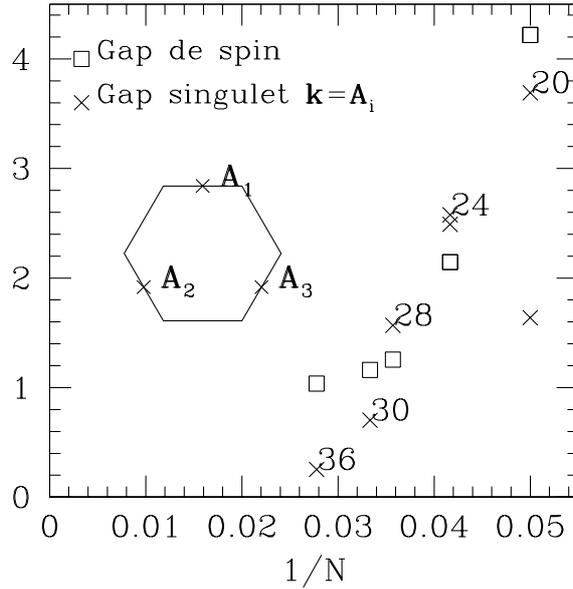


FIG. 6.1: Gap de spin (□) et gap singulet ($\Delta S = 0$) vers le premier état d'impulsion $\mathbf{k} = \mathbf{A}$ (×). $J_2 = -2$, $J_4 = 1$. Le premier tend vers une valeur de l'ordre de 1, le second très probablement vers zéro. Pour les échantillons $N = 20$ et 24 , les points $\mathbf{k} = \mathbf{A}_{1,2}$ ne sont pas équivalents à $\mathbf{k} = \mathbf{A}_3$, ce qui donne deux gaps différents suivant la direction considérée.

de cette dégénérescence. Troisièmement, nous présentons un argument contre l'éventualité d'un liquide chiral qui briserait spontanément l'invariance par renversement du temps. Le dernier point de cette section traite du lien éventuel entre le modèle d'échange multiple et la phase d'HALDANE ou VBS.

6.1.2 Pas de brisure de symétrie “spin-Peierls”

Le secteur singulet de l'hamiltonien $J_2 = -2$ et $J_4 = 1$ pour $N = 36$ spins possède une quasi-dégénérescence quatre entre un niveau $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ et trois niveaux $\mathbf{k} = \mathbf{A}_{1,2,3}$. Comme évoqué plus haut, le comportement avec N de l'écart d'énergie qui sépare ces deux secteurs de symétrie suggère qu'ils sont dégénérés à la limite thermodynamique. Les deux niveaux suivants (Fig. 6.5) ont les même impulsions et pourraient également être asymptotiquement dégénérés avec le fondamental ⁵ pour de grands systèmes, ce qui porterait la dégénérescence à huit.

L'état dimérisé le plus simple sur le réseau triangulaire (Fig. 6.2) est aussi invariant par toute translation de deux pas dans toutes les directions, il est donc construit sur les

⁵Cette dernière hypothèse paraît moins probable si on considère que les comportements de taille finie de tous ces niveaux sont régis par la même longueur ξ .

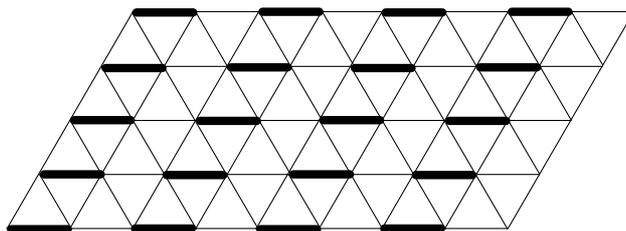


FIG. 6.2: État dimérisé le plus simple sur le réseau triangulaire. Les traits épais relient les sites appariés en singulets $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$. Il y a douze pavages du réseau triangulaire équivalents, ils sont orthogonaux à la limite thermodynamique.

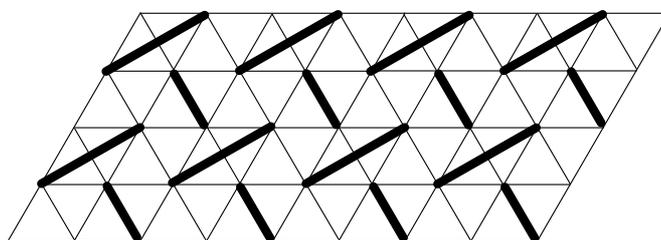


FIG. 6.3: Un état dimérisé du réseau triangulaire. La dégénérescence vaut douze, comme pour l'état Fig. 6.2.

mêmes impulsions. La différence essentielle avec ce qui se produit sur le réseau carré ⁶ est qu'il est douze fois dégénéré : 4 translations fois 3 rotations. Une telle brisure de symétrie n'est pas observée numériquement dans le spectre $N = 36$. Par ailleurs la structure locale des dimères montre que deux dimères parallèles est justement la configuration la plus défavorable (*cf.* § 4.2.2). On peut imaginer d'autres états dimérisés construits sur les impulsions $\mathbf{0}$ et \mathbf{A} trouvées dans le spectre de basse énergie. La figure 6.3 est un autre exemple de pavage de dimères invariant par translation de deux pas. Il n'y a pas de couples de dimères parallèles, ce qui le rend énergétiquement plus favorable que celui Fig. 6.2. Cependant, la dégénérescence douze demeure. En fait, il n'y a aucune maille élémentaire qui donne lieu à une dégénérescence inférieure à 12 quand on l'utilise pour paver le réseau triangulaire. La raison essentielle est qu'il y a douze façons de paver régulièrement le réseau triangulaire par des losanges et que le pavage de losanges est ce que l'on peut faire de plus simple qui soit invariant par translation de deux pas.

Il faut conclure que la dégénérescence quatre (ou huit) observée dans le système $N = 36$ ne s'interprète pas comme une brisure de symétrie conventionnelle de type spin-Peierls. Si

⁶Sur le réseau carré, l'état dimérisé le plus simple donne une dégénérescence quatre entre un état uniforme de moment nul et 3 états de vecteurs d'onde $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ et (π, π) . Ces trois vecteurs d'onde sont les analogues des points $\mathbf{A}_{i=1,2,3}$ de la zone de Brillouin du réseau triangulaire.

l'échantillon à 36 sites présente une physique proche de celle du système infini, hypothèse que nous mettons en avant, il faut trouver une autre explication à cette dégénérescence quatre ou huit. Nous proposons un scénario où elle est une conséquence naturelle de la topologie non triviale du réseau, qui est celle d'un tore puisque nous utilisons des conditions aux bords périodiques.

6.1.3 Dégénérescence topologique

La plupart des idées concernant l'origine topologique de dégénérescences dans un liquide de spins quantique ont été proposées par ROKHSAR et KIVELSON [115], READ et CHAKRABORTY [101], et SUTHERLAND [132]. Nous nous en inspirons pour proposer une démonstration générale. La version détaillée se trouve en annexe C. Nous montrons que la dégénérescence topologique trouvée par exemple dans le "quantum hard-core dimer model" au point $J = V$ [115] est en fait une propriété très générale des états de spins $\frac{1}{2}$ complètement désordonnés. Sous l'hypothèse d'absence de toute forme de cohérence à longue distance, un état liquide de spins est quatre fois dégénéré. Avant d'exposer formellement l'argument, en voici l'idée. On dessine sur le réseau une coupure Δ qui s'enroule une fois autour du tore. Associons à chaque configuration C de dimères son nombre $\Delta(C)$ d'intersections avec Δ . On peut vérifier que l'action d'une permutation (locale) sur les sites du réseau ne modifie ce nombre d'intersection que d'un nombre pair. $\Delta(C) \bmod 2$ est donc un invariant sous l'action de l'hamiltonien. L'espace des pavages de dimères courte portée est divisé en deux secteurs topologiques qui ne sont pas couplés par H . L'espace des états dimères courte portée est en fait divisé en *quatre* secteurs puisque on peut aussi les classifier suivant la parité du nombre d'intersections avec une coupure Δ' choisie dans l'autre direction du tore. Les états qui peuvent s'écrire ainsi sont quatre fois dégénérés sur un tore. L'essentiel de la difficulté est de savoir précisément à quelle type de fonction d'onde cela s'applique.

Dimères et boucles

Le point de départ est une représentation de la fonction d'onde en termes de dimères, et nous commençons par rappeler quelques points importants sur l'algèbre des états dimérisés ou pavages de dimères ("valence-bond states").

Si on inclut les dimères de toutes longueurs, ces pavages forment une famille génératrice de l'espace de spin $S = 0$. Mais ils ne sont pas orthogonaux et constituent une famille liée. SUTHERLAND [132] propose une façon diagrammatique de calculer le produit scalaire $\langle C|C' \rangle$ de deux configurations de dimères C et C' . On commence par dessiner sur le réseau les liens singulets de C et C' . Le résultat est un ensemble de boucles fermées et sans intersection qui couvrent tout le réseau, c'est le graphe de transition de C et C' ("transition

graph"). Désignons par $n(C \cup C')$ le nombre de ces boucles. Par ailleurs, on se dote d'une convention pour orienter les dimères (*cf.* annexe C), de sorte que préciser ses extrémités suffise à connaître son signe. On définit $x(C \cup C') = \pm 1$ par la parité du nombre de liens à inverser pour que toutes les boucles du graphe de transition aient des liens alternés. Pour ces définitions de n et x , le résultat est :

$$\langle C|C' \rangle = 2^{n(C \cup C') - N/2} x(C \cup C') \quad (6.2)$$

En guise d'exemple, considérons le cas $C = C'$. Toutes les boucles sont de longueur 2 et il y en a $n(C \cup C) = N/2$. Chaque boucle (à deux sites) est automatiquement alternée puisque ses deux dimères pointent vers le même site. Donc $x(C \cup C) = 1$ et on trouve bien $\langle C|C \rangle = 1$.

On décompose le fondamental sur les pavages de dimères :

$$|\psi\rangle = 2^{N/4} \sum_C \psi(C) |C\rangle \quad (6.3)$$

La normalisation de $|\psi\rangle$ donne :

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{C, C'} \left[\psi(C)^\dagger \psi(C') 2^{n(C \cup C')} x(C \cup C') \right] \quad (6.4)$$

Hypothèse des petites boucles

L'équation (6.4) peut être reformulée comme une somme sur les recouvrements \mathcal{G} du réseau par des boucles :

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{\mathcal{G}} 2^{n(\mathcal{G})} x(\mathcal{G}) \Gamma(\mathcal{G}) \quad (6.5)$$

où nous définissons :

$$\Gamma(\mathcal{G}) = \sum_{C, C' / C \cup C' = \mathcal{G}} \psi(C)^\dagger \psi(C') \quad (6.6)$$

Cette réécriture n'est possible que parce que tous les couples de pavages C et C' dont la réunion est le graphe \mathcal{G} , ont le même $x(C \cup C') = x(\mathcal{G})$ et le même $n(C \cup C') = n(\mathcal{G})$.

Nous passons à l'hypothèse importante : *les seuls graphes \mathcal{G} qui contribuent à Eq. (6.6) sont ceux qui ne contiennent aucune boucle faisant le tour complet du tore.* Cette condition signifie que la fonction d'onde ne possède aucune cohérence de phase à grande distance. C'est une propriété beaucoup plus forte que d'exiger que les pavages qui contribuent ne contiennent que des dimères à courte portée. Un état "valence-bond crystal", comme ceux représentés Fig. 6.2 ou Fig. 6.3 par exemple, ne possède que des dimères à courte portée.

Ils ne satisfont pas pour autant l'hypothèse. Intéressons nous à la composante $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ de l'état Fig. 6.2. Cette composante est la somme des pavages translétés les uns des autres. Il est simple de voir que le graphe de transition d'un pavage et de son translaté ne contient que des boucles qui font le tour complet du tore. L'argument topologique ne s'applique pas à ces cas. Inversement, il existe des états qui ont cette propriété, comme le "Nearest Neighbor Resonating Valence-Bond" (NNRVB) proposé par SUTHERLAND [131, 132]. Ceci est démontré par une équivalence entre l'Eq. (6.5) et la fonction de partition d'un gaz classique de boucles dont la longueur de corrélation est finie [74].

Dans le modèle d'échange multiple, les corrélations que nous mesurons (spin-spin, chirale-chirale et dimère-dimère) décroissent exponentiellement sur une longueur caractéristique $\xi \sim 2$. Ceci ne suffit pas pour montrer que les grandes boucles ne contribuent pas à l'écriture diagrammatique de $\langle \psi | \psi \rangle$. Toutefois, dans un liquide de spins où il existe une échelle de distance ξ qui régit la physique de basse énergie, supposer que les boucles de l'écriture diagrammatique de $\langle \psi | \psi \rangle$ sont aussi régies par la longueur ξ semble une hypothèse naturelle. À partir de cette hypothèse, nous montrons que le fondamental est (au moins) quatre fois dégénéré.

Coupure sur le tore et dégénérescence quatre

Prenons une coupure Δ qui entoure le tore dans une des deux directions. Un pavage de dimère C coupe Δ un nombre de fois $\Delta(C)$. Dans l'équation (6.3), on change le signe des configurations de dimères impaires par rapport à Δ :

$$|\psi'\rangle = \sum_C (-1)^{\Delta(C)} \psi(C) |C\rangle \quad (6.7)$$

Supposons que le système possède un nombre impair de sites dans la direction perpendiculaire à Δ . Si $|\psi\rangle$ possède une impulsion \mathbf{k} , alors $|\psi'\rangle$ a l'impulsion $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{A}$, où \mathbf{A} est un milieu de bord de zone (*cf.* Fig. 6.5). Le nouvel état est orthogonal au premier et nous montrons annexe C, grâce à l'hypothèse sur la contribution des grandes boucles, que $|\psi'\rangle$ a la même énergie que $|\psi\rangle$. Cette dégénérescence deux doit être étendue à quatre quand le système est invariant par rotation de $2\pi/3$, puisque les états de vecteurs d'onde $\mathbf{k} = \mathbf{A}$ sont alors trois fois dégénérés par symétrie.

WEN [142] propose une construction analogue. Dans le cadre d'une théorie de champ moyen pour un liquide de spins (non chirale), il construit un état $|\psi'\rangle$ à partir d'un fondamental $|\psi\rangle$ par une transformation de jauge singulière sur les degrés de liberté de liens. Cette transformation, équivalente au changement de signe $(-1)^{\Delta(C)}$, est schématisée Fig. 6.4. Elle revient, du point de vue du champ de jauge, à insérer un demi quantum de flux à l'intérieur du tore (Fig. 6.4). Une dégénérescence quatre est également trouvée par READ et SACHDEV [104] à l'aide d'une coupure enroulée sur le tore dans une théorie $Sp(N)$ pour un antiferromagnétique frustré.

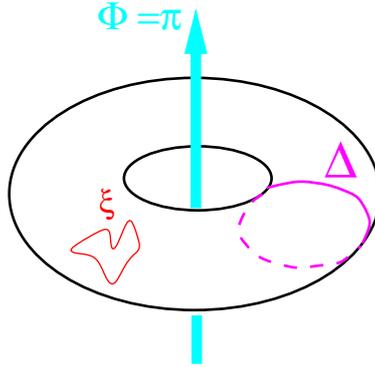


FIG. 6.4: Analogie entre un changement de phase le long d'une coupure enroulée sur le tore (Δ) et l'insertion d'un $\frac{1}{2}$ quantum de flux. Si les seules cohérences de la fonction d'onde sont à des distances inférieures à ξ , le changement de signe le long de Δ apparaît comme une pure jauge puisque qu'aucune boucle physique de taille $\lesssim \xi$ ne peut percevoir le déphasage de π créée par le solénoïde. L'effet est similaire à l'absence d'effet Aharonov-Bohm dans une situation où la longueur de cohérence de phase des particules serait plus petite que la longueur du chemin faisant le tour du solénoïde.

Interprétation topologique du spectre $N = 36$

Après avoir remarqué que les impulsions des quatre premiers états du spectre $N = 36$ correspondent à la prédiction topologique, nous pouvons interpréter la quasi-dégénérescence de la manière suivante : à mesure que la taille du système approche et dépasse la longueur de cohérence ξ , mesurée par la taille des boucles qui contribuent au fondamental, les boucles topologiquement non triviales se raréfient exponentiellement avec \sqrt{N}/ξ et l'énergie des trois singulets de moments $\mathbf{k} = A_{1,2,3}$ tend vers celle du fondamental $\mathbf{k} = \mathbf{0}$.

6.1.4 Liquide de spins chiral ?

Plusieurs auteurs proposent l'existence d'états liquide de spins où l'invariance par renversement du temps est spontanément brisée [69, 70, 144]. Il s'agit de systèmes où des opérateurs du type $\vec{S}_i \cdot (\vec{S}_j \times \vec{S}_k)$ acquièrent une valeur moyenne non nulle. Ce scénario, est écarté pour le modèle d'Heisenberg sur le réseau triangulaire [20], pour lequel il a été initialement proposé [69]. La situation sur le réseau kagome est moins claire [140]. La question de la chiralité dans le modèle d'échange multiple se pose pour deux raisons :

- La présence d'un gap de spin et d'une dégénérescence paire du fondamental est cohérente avec les théories chirales. D'ailleurs, WEN [141] indique qu'une théorie pour un liquide chiral incompressible doit posséder une dégénérescence topologique

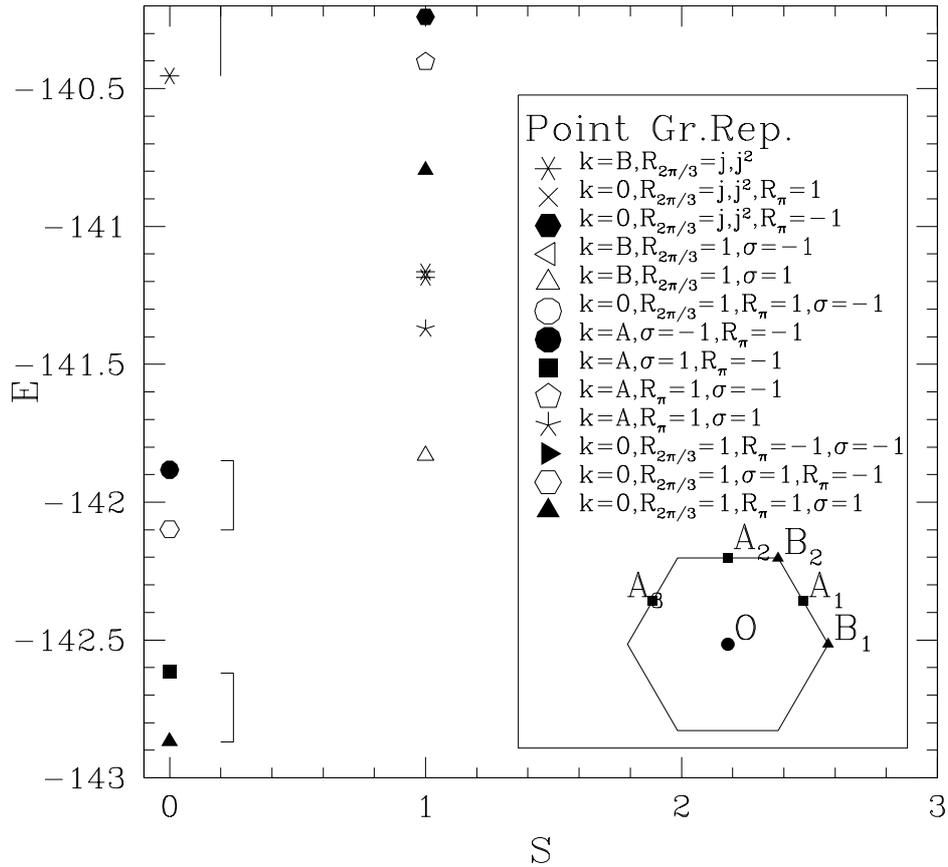


FIG. 6.5: Premiers états du spectre $N = 36$ à $J_2 = -2$, $J_4 = 1$ dans les secteurs $S = 0$ et $S = 1$ pour les vecteurs d'onde $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, \mathbf{A}_i et $\pm\mathbf{B}$. Les symboles représentent les nombres quantiques spatiaux. Le fondamental ($E = -142.867$), par exemple, appartient à la représentation triviale : $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, $\mathcal{R}_{\frac{2\pi}{3}} = 1$, $\mathcal{R}_\pi = 1$, $\sigma = 1$).

$2k^g$, où g est le genre de la variété d'espace du réseau ⁷.

- Il existe une transition de phase chirale dans le modèle *classique* d'échange à quatre corps [93].

D'un autre côté, comme présenté plus haut, nous ne trouvons pas de signature d'ordre chirale dans la fonction de corrélation de $\vec{S}_i \cdot (\vec{S}_j \times \vec{S}_k)$. On peut, par contre, imaginer un liquide chirale où ce sont les parties imaginaires de permutations cycliques $P_{i_1, i_2, i_3, \dots, i_n}$ qui prennent une valeur moyenne non nulle sur de *grandes boucles*, comme proposé par WEN *et al.* [144]. Dans une telle théorie, les excitations élémentaires sont des spinons $S = \frac{1}{2}$ *déconfinés*. Nous donnons au paragraphe 6.2 plusieurs éléments qui indiquent, au contraire, que les excitations portent un spin $S = 1$. Sans pouvoir éliminer l'hypothèse d'une phase chirale, le spin des excitations est une donnée qui la rend peu probable.

6.1.5 État VBS

En une dimension, LIEB, SHULTZ et MATTIS [83] (LSM) ont montré l'existence d'un état d'énergie $\sim \mathcal{O}(1/N)$ au dessus du fondamental pour une chaîne de spins $\frac{1}{2}$ de longueur N avec conditions aux bords périodiques. Cet état de basse énergie peut être la signature d'un mode mou ou d'une dégénérescence du fondamental, et ce théorème se généralise immédiatement à tout spin demi entier. De plus AFFLECK [3] a proposé une extension de cette propriété à 2 dimensions. Dans cette optique, une dégénérescence 4 ou 8 du fondamental du modèle d'échange multiple n'est pas surprenante (l'existence d'un mode mou étant exclue). Cependant, la dégénérescence du théorème LSM est usuellement associée à une brisure spontanée de symétrie à la limite thermodynamique et à un ordre de type dimère-dimère à longue distance. Or si l'analyse que nous faisons des données numériques est correcte, le système ne présente pas de tel type d'ordre. L'origine de la dégénérescence serait purement topologique et ne serait pas liée à quelque brisure de symétrie discrète. La fonction d'onde de LAUGHLIN [78] par exemple, dont la dégénérescence dépend aussi de la topologie de l'espace [143], réalise un tel scénario. Cependant, en formant une combinaison linéaire de deux des fondamentaux quasiment dégénérés du modèle d'échange multiple et d'impulsions différentes, nous obtenons un état qui *brise* l'invariance par translation ⁸. Il faut donc être prudent avant d'exclure la possibilité de quelque forme d'ordre que ce soit. Quel sont donc les alternatives à l'interprétation topologique ?

Supposons que la dégénérescence du fondamental soit légèrement supérieure à ce que

⁷Ceci n'est pas spécifique aux états chiraux puisque qu'une dégénérescence 2^g apparaît aussi dans des modèles non chiraux [142]

⁸Les impulsions disponibles dans le spectre $N = 36$ sont $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ et $\mathbf{k} = \mathbf{A}$, le nouvel état $|\Psi\rangle = |\mathbf{0}\rangle + |\mathbf{A}\rangle$ est invariant par translation de deux pas du réseaux. Ceci est assez contre intuitif : si on visualise $|\Psi\rangle$ comme possédant une "modulation" de période deux, ceci implique de l'ordre à longue portée dans la modulation ...

les spectres $N < 36$ ne le laissent imaginer. Quels seraient les états et les brisures de symétrie compatibles avec les données numériques de fonction de corrélation exposées section 4.2? Un état “valence-bond crystal” avec des dimères rigides orientés tous dans la même direction est exclu par la répulsion importante entre dimères parallèles. Un état VBC comportant des dimères de plus grande longueur et/ou d’orientations différentes impliquerait la présence de nombreux états d’impulsions autres que $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ et $\mathbf{k} = \mathbf{A}$ parmi les niveaux de basse énergie. Ceci ne peut pas être *complètement* exclu mais un tel ordre avec de nombreux spins dans la maille élémentaire semble peu probable.

En revanche, il est utile de revenir sur la fonction d’onde VBS présentée au paragraphe 5.4. La figure 5.12.a rappelle que l’état est invariant par les translations d’un nombre pair de pas du réseau. Sa dégénérescence 12 n’implique donc que les états d’impulsions $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ et $\mathbf{k} = \mathbf{A}$. Compte-tenu de sa remarquable énergie pour un état variationnel sans aucun paramètre ajustable, nous devons l’examiner avec attention. Même à la limite thermodynamique, l’état VBS n’est certainement pas le fondamental exact. Ce que l’on peut envisager, par contre, c’est que le modèle d’échange multiple possède le même ordre à longue distance. Soit Π_a l’opérateur qui, agissant sur les quatre sites du losange a , les projette dans leur secteur $S = 2$. Par construction, la fonction de corrélation $\langle \Pi_a \Pi_b \rangle$ possède de l’ordre à longue portée : elle vaut 1 quand a et b sont deux losanges de même orientation qui se trouvent à une distance paire l’un de l’autre, aussi grande soit-elle. Cette fonction de corrélation n’a pas été calculée numériquement. Si ce type d’ordre était présent dans le modèle d’échange multiple, nous aurions la même brisure de symétrie que la fonction VBS. Cette hypothèse est assez séduisante car elle s’accompagne d’une forme explicite de fonction d’onde. Elle fournit également une explication simple à l’existence du gap magnétique. Celui-ci serait hérité du gap magnétique du modèle VBS sur réseau carré avec des spins $S = 2$, modèle de départ pour la construction de la fonction d’onde que nous considérons pour le réseau triangulaire avec des spins $S = \frac{1}{2}$. L’image serait celle de la formation spontanée de spin $S = 2$ à partir desquels le système forme un état VBS ou phase de HALDANE.

Malgré cela, nous privilégions l’interprétation topologique de la dégénérescence au détriment du point de vue VBS pour les raisons suivantes. L’état VBS impose une dégénérescence 12 que nous n’observons pas jusqu’à $N = 36$. Il faudrait pour la rétablir des effets de taille considérables (alors que l’état Fig. 5.12 n’est pas frustré par les conditions périodiques de l’échantillon 36). Par exemple, le plus énergétique des états singulets requis pour la brisure de symétrie VBS est à une énergie $\Delta = 3.612$ au dessus du fondamental ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$, $\mathcal{R}_{2\pi/3} = j, j^2$, $\mathcal{R}_\pi = 1$). Compte tenu de la longueur de corrélation mesurée dans le fondamental et du comportement de l’énergie du fondamental présenté Fig. 6.1, un effet de taille capable de ramener cet état à l’énergie du fondamental est assez improbable. De plus, le troisième état excité du spectre $N = 36$ (hexagone Fig. 6.5) possède les nombres quantiques $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, $\mathcal{R}_{2\pi/3} = 1$, $\sigma = 1$, $\mathcal{R}_\pi = -1$ qui ne sont pas compatibles avec l’état

VBS. Il faudrait aussi admettre que cet état remonte à plus haute énergie avec la taille du système.

6.2 Excitations élémentaires

Quand un système développe de l'ordre de Néel à longue distance, la brisure spontanée de la symétrie $SU(2)$ impose aux excitations de basse énergie d'être des bosons de Goldstone, les magnons. Sans ordre magnétique, toutes sortes d'excitations exotiques sont permises. Leur spin peut être 0 , $\frac{1}{2}$ ou 1 , leur statistique bosonique, fermionique ou même anyonique ... Les excitations de basse énergie du liquide de spins que nous étudions sont magnétiques et la question posée est celle de leur spin. Après avoir posé le problème du confinement des spinons, nous présentons dans cette section quelques données numériques qui plaident en faveur d'excitations élémentaires de spin 1 et vers un confinement des spinons.

6.2.1 Spinons dans les liquides de spins

Les gaps que nous trouvons dans le secteur triplet et singulet signifient que ces quasi-particules sont massives. La très faible densité d'états dans le secteur $S = 0$ jusqu'à des énergies *supérieures* au gap de spin (voir le spectre $N = 36$ Fig. 6.5) est une indication forte que les excitations portent un spin non nul. Par ailleurs, toutes les théories de liquides de spins que nous avons évoquées (Tab. 6.1) possèdent des excitations avec un spin $\frac{1}{2}$ (spinons)⁹. Le spinon est en effet un objet naturel dans une image RVB courte portée de la fonction d'onde. Il consiste en un spin non apparié dans une mer de dimères. Dans un échantillon pair, de tels défauts sont créés par paires. La question est de savoir si ces spinons sont ou non confinés, c'est-à-dire s'il est ou non favorable de les créer à proximité l'un de l'autre. Sur ce point, la comparaison des théories mentionnées Tab. 6.1 suggère que la frustration (réseau non bipartite) favorise le déconfinement. Des développements à N grand menés par READ et SACHDEV [104] concernant le modèle $J_1 - J_2 - J_3$ sur le réseau carré vont également dans ce sens. Qu'en est-il du modèle d'échange multiple, et de quelles données disposons-nous ?

⁹À l'exception du "hard-core dimer model" de ROKHSAR et KIVELSON [115] dont les *résonnons* sont de spin nul. En l'absence de dopage, ce modèle décrit des degrés de liberté de dimères uniquement, il se place donc à des énergies petites devant le gap de spin. Au-delà de cette énergie, des spinons existent et pourraient être bosoniques [71].

Modèle	Paramètre	Excitations	Auteurs
“Valence-bond solid”	$2S = z$	bosons $S = \frac{1}{2}$ confinés	AFFLECK <i>et al.</i> [4, 5]
Heisenberg $SU(N \rightarrow \infty)$	réseau carré non frustré $n_c = 0 \bmod z$	bosons $S = \frac{1}{2}$ confinés	READ et SACHDEV [103]
Heisenberg $Sp(N \rightarrow \infty)$	réseau kagome et triangulaire	bosons $S = \frac{1}{2}$ déconfinés	SACHDEV [116]
Fonction d’onde NNRVB ^a		bosons $S = \frac{1}{2}$ [101]	SUTHERLAND [132]
Liquide Chiral	réseau triangulaire	anyons $S = \frac{1}{2}$ déconfinés	KALMEYER et LAUGHLIN [70]
Liquide chiral		anyons $S = \frac{1}{2}$	WEN <i>et al.</i> [144]
Liquide avec ordre topologique ^b		fermions $S = \frac{1}{2}$	WEN [142]
“Quantum hard-core dimer model”	$V = J$	résonons $S = 0$. Pas de gap à $V = J$. Gap probable pour $V < J$.	ROKHSAR et KIVELSON [115]

^a“Nearest Neighbor Resonating Valence-Bond”^bMéthode de champ moyen $SU(2)$ fermioniqueTAB. 6.1: Quelques théories de liquides de spins en deux dimensions *sans brisure de symétrie spatiale*. Toutes possèdent un gap de spin.

6.2.2 Relations de dispersion

Le problème du spin et de la statistique, est difficile à aborder par les diagonalisations exactes puisque cette méthode donne directement le spectre des états à N corps, et non les propriétés à une (quasi-)particule. L'objet principal pour étudier la dynamique est la fonction spectrale, transformée de Fourier en temps et en espace de la fonction de corrélation dynamique $\langle S^\alpha(\mathbf{0}, 0)S^\beta(\mathbf{x}, t) \rangle$. Le code employé au cours de ce travail n'effectue pas le calcul de ce facteur de structure dynamique $\vec{S}(\mathbf{q}, \omega)$ mais le développement d'un tel programme permettrait de mieux comprendre les problèmes posés ici. L'observation de pics de quasi-particules ou de structures plus incohérentes renseignerait sur l'existence de modes. Cependant, l'interprétation de telles données numériques est parfois limitée par le très faible nombre d'impulsions dans la zone de Brillouin¹⁰ et par la discrétisation du spectre de basse énergie ($\vec{S}(\mathbf{q}, \omega)$ est une somme de distributions $\delta(\omega - \omega_n)$).

Nous disposons par contre de l'énergie des premiers états excités (à N corps) en fonction de leur impulsion. La figure 6.6 représente la dispersion $\omega_S(\mathbf{k})$ des excitations triplets et singulets dans la zone de Brillouin pour un échantillon à 28 sites (le plus grand système avec la symétrie de rotation $\mathcal{R}_{2\pi/3}$ pour lequel nous avons tous les niveaux de basse énergie) et 16 sites. Il apparaît que les excitations triplets de plus basse énergie (celles qui fixent la valeur du gap de spin) se trouvent au voisinage du points $\mathbf{k} = \frac{1}{2}\mathbf{A}$, en accord avec l'analyse que nous avons faite des corrélations dans le fondamental.

6.2.3 Excitations de spin 1 ou de spin $\frac{1}{2}$?

Par ailleurs, sur ces deux échantillons et comme dans tous les autres systèmes étudiés, les dispersions dans les secteurs $S = 0$ et $S = 1$ sont fortement corrélées. Les minima de $\omega_{S=1}(\mathbf{k})$ coïncident avec les maxima de $\omega_{S=0}(\mathbf{k})$. Nous interprétons cette propriété remarquable comme la signature d'excitations de spin 1 plutôt que de spin $\frac{1}{2}$. Avec des spinons déconfinés, les états excités de spin 0 ou 1 s'obtiennent en peuplant le fondamental de deux spinons. Dans la limite où ils interagissent peu, on obtiendrait la même dispersion pour les états $S = 0$ et $S = 1$. En revanche, si les excitations élémentaires sont de spin 1, les premiers états excités des secteurs $S = 0$ et $S = 1$ sont de nature différentes : états à une particule pour les un, et à deux particules pour les seconds. On constate en particulier sur $N = 16, 28$ (Fig. 6.6) et $N = 24$ (Fig. 6.7) que les minima de $\omega_{S=0}(\mathbf{k} \neq \mathbf{0})$ sont atteints pour l'impulsion $\mathbf{k} = 2\mathbf{k}_0$, double de l'impulsion \mathbf{k}_0 du premier triplet. La corrélation entre spectres $S = 0$ et $S = 1$ se comprend qualitativement par des relations du type $\omega_{S=0}(\mathbf{k} + \mathbf{k}_0) \simeq \omega_{S=1}(\mathbf{k}_0) + \omega_{S=1}(\mathbf{k})$, qui traduisent la compositions des impulsions

¹⁰Par exemple, le réseau triangulaire à 28 sites le plus symétrique ne possède que 6 impulsions inéquivalentes par symétrie de rotation autour de l'origine. Le réseau à 30 sites que nous avons étudié n'est pas invariant par rotation de $2\pi/3$ autour de l'origine et il possède 16 impulsions inéquivalentes.

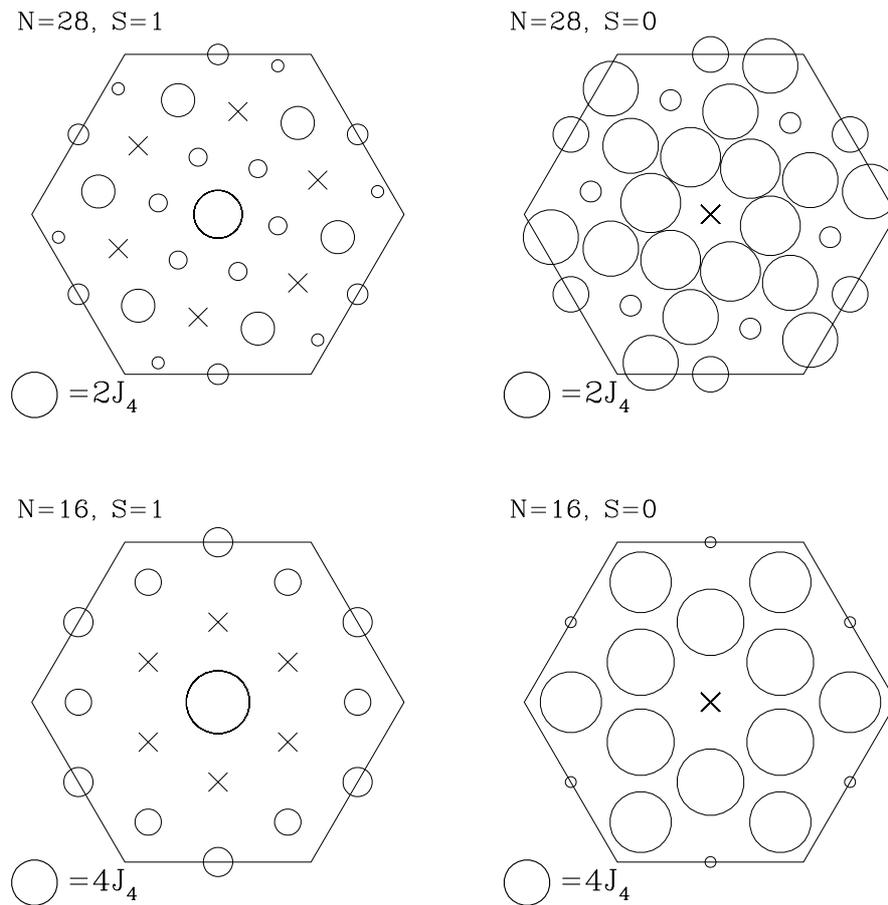


FIG. 6.6: Dispersion des états $S = 1$ (gauche) et $S = 0$ (droite) à $J_2/J_4 = -2$. Le rayon des cercles est proportionnel à $\omega_S(\mathbf{k}) = E(S, \mathbf{k}) - E_{min}(S)$ (échelle en bas à gauche). Les croix indiquent l'impulsion de l'état de plus basse énergie dans son secteur de spin. Dans le secteur $S = 0$, la croix à l'origine rappelle que le fondamental absolu est d'impulsion nulle.

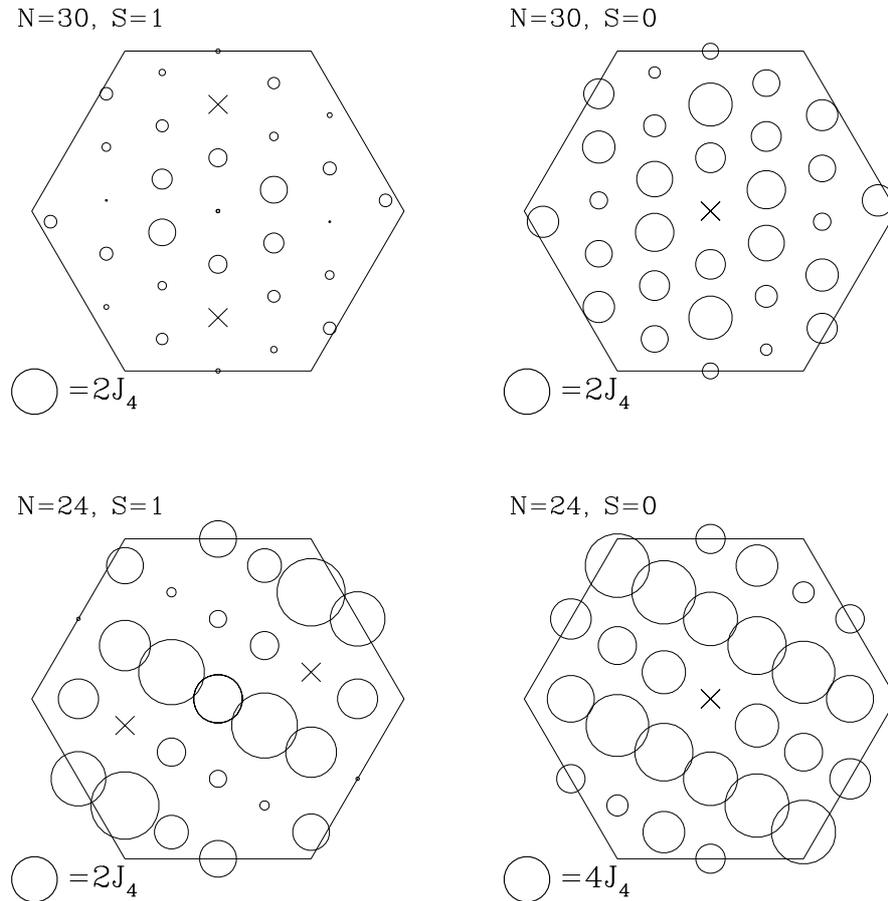


FIG. 6.7: Dispersion des états $S = 1$ (gauche) et $S = 0$ (droite) à $J_2/J_4 = -2$. Mêmes conventions que Fig. 6.6. Ces réseaux ne sont pas invariants par rotation de $\mathcal{R}_{2\pi/3}$, ce qui explique l'anisotropie de la dispersion. Cette anisotropie met en lumière la corrélation entre la dispersion des états singulets et celle des triplets, en particulier sur l'échantillon $N = 24 = 6 \times 4$ où les impulsions des triplets les moins énergétiques sont celles où le gap singulet est maximal. Ceci trouve une explication naturelle si les excitations élémentaires possèdent un spin $S = 1$ (*cf.* texte).

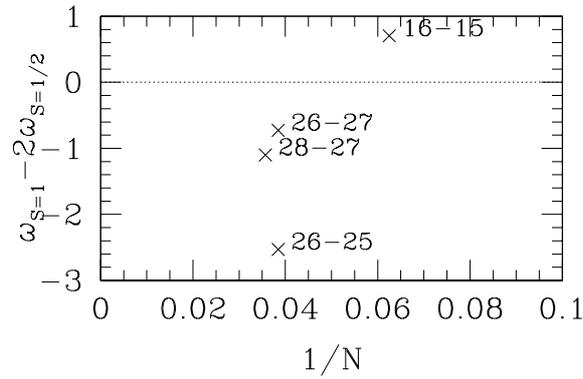


FIG. 6.8: Énergie de liaison de 2 spinons, évaluée à partir des énergies des tailles N et $N \pm 1$ ($J_2/J_4 = -2$).

de deux triplets.

Un échantillon de taille finie n'autorise pas les transitions avec $\Delta S = \pm \frac{1}{2}$, mais on peut évaluer le coût énergétique $\omega_{S=\frac{1}{2}}$ d'un spinon isolé en comparant les énergies d'un système à $2p$ sites à celle d'un système à $2p + 1$ sites. On suppose que le fondamental du système impair a l'énergie du système pair (corrigée d'un facteur $\frac{2p+1}{2p}$ pour tenir compte de l'extensivité) plus l'énergie $\omega_{S=\frac{1}{2}}$ d'un spinon :

$$E_{S=\frac{1}{2}}^{N=2p+1} = \frac{2p+1}{2p} E_{S=0}^{N=2p} + \omega_{S=\frac{1}{2}} \quad (6.8)$$

Si on dispose des spectres pour $N = 2p$ et $N' = 2p - 1$ on doit soustraire l'énergie du spinon à l'énergie du système impair :

$$E_{S=0}^{N=2p} = \frac{2p}{2p-1} \left(E_{S=\frac{1}{2}}^{N=2p-1} - \omega_{S=\frac{1}{2}} \right) \quad (6.9)$$

En comparant la valeur de $2\omega_{S=\frac{1}{2}}$ au gap de spin $\omega_{S=1} = E_{S=1}^{N=2p} - E_{S=0}^{N=2p}$ du système pair, on obtient une estimation de l'énergie de liaison de deux spinons. Ce calcul n'est valable que lorsque les effets de tailles ne sont plus trop importants. Pour limiter ces effets, nous choisissons dans le diagramme “ E/N versus gap de spin” (Fig. 4.12 page 72) les couples de systèmes $2p, 2p \pm 1$ les plus proches. Cette proximité nous assure que malgré leurs différences de géométries, les systèmes sont les plus semblables possibles. La valeur de l'énergie de liaison $\omega_{S=1} - 2\omega_{S=\frac{1}{2}}$ est présentée Fig. 6.8. À l'exception des deux plus petites tailles $N = 15, 16$, l'énergie de liaison est négative et du même ordre de grandeur, en valeur absolue, que le gap de spin. Cette grande frustration des systèmes impairs signale une forte attraction entre spinons. C'est un nouvel argument en *faveur de l'hypothèse du confinement des spinons*.

Chapitre 7

Champ magnétique extérieur

Le comportement sous champ magnétique du modèle d'échange multiple sur le réseau triangulaire est assez exotique. Au lieu d'une aimantation qui croît linéairement avec le champ appliqué, le système présente deux plateaux d'aimantation à $M/M_{\text{sat}} = 0$ et $\frac{1}{2}$. D'une manière remarquable, le deuxième plateau existe aussi bien pour les modèles de spins classiques [94] que quantiques [91, 94]. Ce dernier constitue un des tous premiers exemples de plateau quantique en deux dimensions pour $M/M_{\text{sat}} > 0$ ¹.

On comprend une telle absence de réponse au champ quand elle trouve son origine dans un gap de spin quantique. On trouve des exemples de plateaux dans les échelles de spins. Les données expérimentales sur le composé $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ (échelles de spins $\frac{1}{2}$ à deux montants) [31] mettent en évidence un plateau à $M/M_{\text{sat}} = 0$. Dans le composé à double chaîne NH_4CuCl_3 , SHIRAMURA *et al.* [123] mesurent deux plateaux à $M/M_{\text{sat}} = \frac{1}{4}$ et $M/M_{\text{sat}} = \frac{3}{4}$ ². Du point de vue théorique, de nombreux auteurs ont étudié les plateaux dans les systèmes unidimensionnels [24, 57, 59, 136]. En dimension un, les plateaux peuvent le plus souvent être compris qualitativement dans une image de couplage fort [62] où l'aimantation est essentiellement décrite par ce qui se passe à l'intérieur d'une cellule élémentaire comprenant un petit nombre de spins (les spins d'un barreau de l'échelle par exemple). La situation est plus complexe pour les réseaux de Bravais en deux dimensions où l'équivalence de tous les sites ne laisse aucune cellule élémentaire. Dans ces situations, la raison pour laquelle les plateaux apparaissent à des valeurs rationnelles de l'aimantation est plus obscure.

¹L'autre exemple est le modèle XXZ sur le réseau triangulaire [35, 61]. Des modèles où des composés avec des plateaux existent quand les couplages ne forment pas un réseau de Bravais. Citons par exemple le composé $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ [68] où trois plateaux à $M/M_{\text{sat}} = 0$, $M/M_{\text{sat}} = \frac{1}{8}$ et $M/M_{\text{sat}} = \frac{1}{4}$ sont observés. Dans ce cas, la maille élémentaire du cristal comprend quatre spins $\frac{1}{2}$ et le fondamental est, en bonne approximation, un produit de dimères.

²L'origine de ces plateaux, n'est pas complètement élucidée, elle pourrait être reliée aux couplages tridimensionnels [75].

Ce chapitre commence par des remarques générales et élémentaires. Nous rappelons le lien entre aimantation et spectre en champ nul, puis nous donnons des conditions nécessaires à l'apparition d'un plateau : colinéarité pour les spins classiques et le critère d'OSHIKAWA [100] pour les cas quantiques unidimensionnels. Après ce rapide tour d'horizon, nous présentons les résultats numériques sur l'aimantation du modèle d'échange multiple, faisons une analyse du plateau et de l'état fondamental à $M/M_{\text{sat}} = \frac{1}{2}$ et comparons au cas classique étudié par MOMOI *et al.* [94].

7.1 Généralités sur les plateaux d'aimantation

Nous donnons quelques points de repère simples sur les spins dans un champ magnétique uniforme extérieur à température nulle. Comment la courbe d'aimantation est reliée au spectre en champ nul ?

7.1.1 Réponse magnétique et spectre à champ nul

Notons $e(m)$ l'énergie par site du système en fonction de son aimantation normalisée $m = \frac{M}{M_{\text{sat}}}$. Cette fonction est donnée par le spectre en champ nul, par exemple tel que le donnent les diagonalisations dans chaque secteur de spin total S ($e(m) = \frac{1}{N}E(S = m\frac{N}{2})$). La courbe d'aimantation $m(B)$ est obtenue en minimisant $E(S) - BS$, c'est-à-dire $e(m) - \frac{1}{2}Bm$, soit ³ :

$$\frac{\partial e}{\partial m} = \frac{1}{2}B \quad (7.1)$$

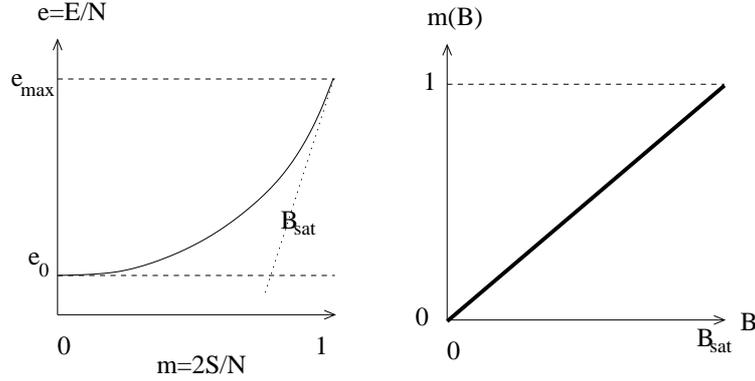
Quant à la susceptibilité par site, elle vaut $\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial S}{\partial B} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 e}{\partial m^2} \right)^{-1}$. À la limite thermodynamique, l'aimantation est entièrement déterminée par la donnée de la grandeur intensive $e(m)$, que le système soit quantique ou classique.

Ordre de Néel

Il peut être utile d'avoir un exemple simple comme point de repère. Nous avons vu au chapitre 3 qu'un système avec de l'ordre de Néel possède un spectre du type :

$$E(S) \simeq \frac{S(S+1)}{2N\chi_0} \quad (7.2)$$

³Sous réserve que $e(m)$ soit dérivable. C'est justement quand ce n'est pas le cas qu'un plateau d'aimantation apparaît.

FIG. 7.1: Réponse magnétique d'un spectre $e(m) \sim m^2$.

de sorte que :

$$e(m) = \frac{m^2}{8\chi_0} \quad (7.3)$$

et l'aimantation est linéaire en B : $m(B) = 2\chi_0 B$. À partir de ce comportement "standard" (Fig. 7.1), plusieurs sortes de déviations peuvent exister, donnant lieu à des plateaux et discontinuités (*métamagnétisme*) dans $m(B)$.

Plateaux et métamagnétisme

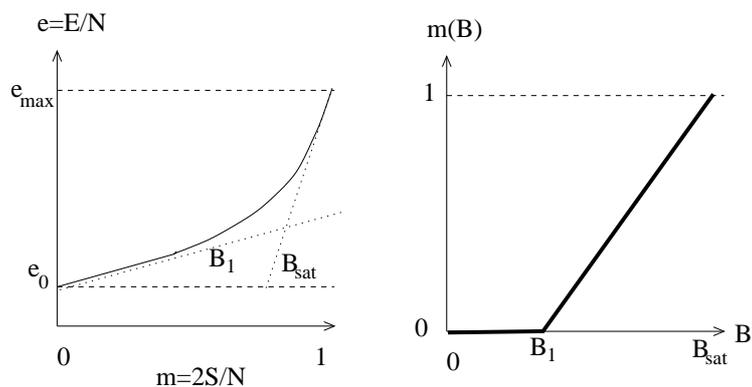
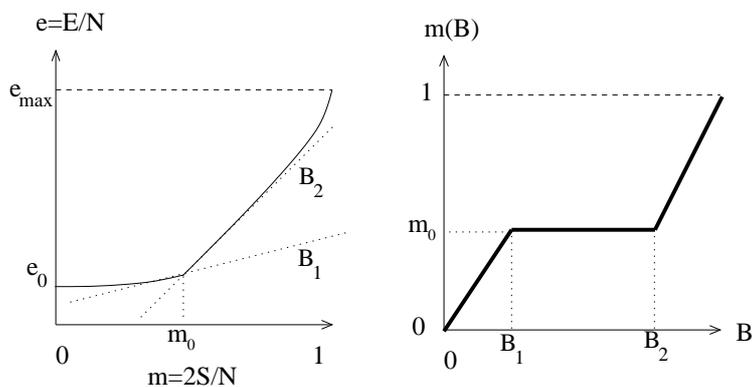
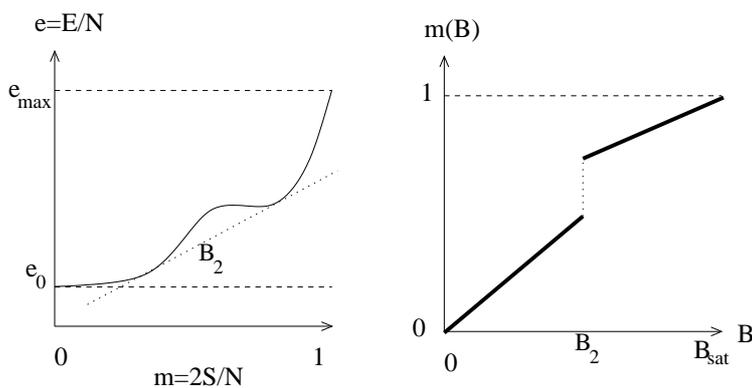
Voici quelques scénarii typiques :

- Plateau d'aimantation $m = 0$. Ceci équivaut à $\frac{\partial e}{\partial m}|_{m=0+} > 0$ et à l'existence d'un gap de spin. L'aimantation ne commence à croître qu'à un champ $B_1 > 0$ (Fig. 7.2). Suivant les cas, il peut s'agir d'une transition critique ou du premier ordre.

Par exemple, si le développement de $e(m)$ à m petit donne : $e(m) = \frac{1}{2}\Delta m + \frac{1}{2}am^n + o(m^n)$ avec $a > 0$, alors l'aimantation au voisinage de la transition à $B_1 = \Delta$ sera $m(B = \Delta + \delta B) = \Theta(\delta B)(\frac{1}{an}\delta B)^{\frac{1}{n-1}}$. Dans une chaîne de spins 1 où $m \sim \sqrt{\delta B}$ [118], nous avons $n = 3$ et le système est critique à $B = \Delta$.

Par contre, un saut d'aimantation à $B = B_1$ correspond à $e(m)$ concave : $e(m) = \frac{1}{2}\Delta m + \frac{1}{2}am^n$ avec $a < 0$. Dans ce cas, le gap de spin Δ n'est pas relié au champ B_1 de la transition du premier ordre.

- Plateau d'aimantation pour $B \in [B_1, B_2]$ à $m > 0$ (exemple Fig. 7.3). C'est la conséquence d'une discontinuité dans $\frac{\partial e}{\partial m}$. Comme au cas précédent, les transitions à B_1 et B_2 peuvent être critiques ou bien du premier ordre.
- Métamagnétisme. Une concavité dans $e(m)$ entraîne un saut d'aimantation (Fig. 7.4). C'est une transition du premier ordre.

FIG. 7.2: Plateau d'aimantation à $m = 0$ et $e(m)$ linéaire en $m = 0$.FIG. 7.3: $e(m)$ typique pour un plateau d'aimantationFIG. 7.4: Transition métamagnétique associée à une concavité de $e(m)$.

$e(m)$ est la grandeur naturelle pour étudier la réponse à un champ uniforme, que les spins soient classiques ou quantiques. À la notion de “gap”, purement quantique, on peut substituer la grandeur intensive $\frac{\partial e}{\partial m}|_{m_0^+} - \frac{\partial e}{\partial m}|_{m_0^-}$ qui est aussi définie pour des spins classiques.

7.1.2 Spins classiques : condition de colinéarité

État non colinéaire

Un plateau d'aimantation apparaît quand la dérivée de $e(m)$ est discontinue. Mais une telle discontinuité n'est possible que pour certaines configurations des spins : *il est nécessaire que les spins soient colinéaires à la direction du champ magnétique.*

Cette propriété se montre simplement. Supposons que le fondamental Ψ_0 pour l'aimantation m_0 ne soit pas un état colinéaire. Montrons que $e(m)$ est dérivable en m_0 et qu'il n'y a donc pas de plateau d'aimantation à m_0 . Ψ_0 n'étant pas colinéaire, il existe un nombre macroscopique de spins qui ne sont pas alignés avec l'axe, disons z , du champ. On peut donc choisir un nombre macroscopique de spins qui pointent dans un petit angle solide ne comprenant pas la direction z . On tourne ces spins d'un angle θ autour de l'axe x ou y pour obtenir un nouvel état $\Psi(\theta)$. Cette construction nous assure que l'aimantation de $\Psi(\theta)$ varie *linéairement*⁴ en θ :

$$m(\theta) = m_0 + a\theta + \mathcal{O}(\theta^2) \quad , \quad a \neq 0 \quad (7.4)$$

$\Psi(\theta)$ n'est a priori pas le fondamental pour l'aimantation $m(\theta)$ mais son énergie⁵ est $e(\Psi(\theta)) = e(m_0) + \mathcal{O}(\theta)$ et donc $e(m(\theta)) \leq e(m_0) + \mathcal{O}(\theta)$. Avec l'équation (7.4) nous obtenons :

$$e(m) \leq e(m_0) + \mathcal{O}(m - m_0) \quad (7.5)$$

Puisque le système atteint l'aimantation m_0 , il n'y a pas de transition métamagnétique au voisinage de m_0 . Par conséquent $e(m)$ est convexe au voisinage de m_0 . D'autre part, une majoration comme celle de l'équation (7.5) impose la dérivabilité en $m = m_0$ pour une fonction convexe : $\frac{\partial e}{\partial m}|_{m=m_0^-} = \frac{\partial e}{\partial m}|_{m=m_0^+}$. Il n'y a donc pas de plateau à m_0 .

État colinéaire

À l'inverse, quelles sont les conditions pour la réalisation d'un plateau ? Bien sûr, le fondamental doit être colinéaire. Reprenons une déformation de cet état, paramétrée par

⁴Si Ψ_0 était colinéaire, toute rotation d'une partie des spins ne modifierait l'aimantation que par des termes en $\cos(\theta)$: $m(\theta) = m_0 + b\theta^2 + \mathcal{O}(\theta^3)$.

⁵Nous supposons que l'énergie est une fonction dérivable des angles entre spins.

un angle θ , et examinons le cas $m_0 > 0$. Maintenant nous avons :

$$m(\theta) = m_0 + \epsilon\theta^2 + \mathcal{O}(\theta^4) \quad , \quad \epsilon \neq 0 \quad (7.6)$$

Plaçons-nous à nouveau dans un cas où $e(m)$ est convexe, c'est-à-dire sans métamagnétisme. $e(m)$ est alors dérivable à gauche et à droite et il y a un plateau si seulement si $\frac{\partial e}{\partial m}|_{m_0^-} < \frac{\partial e}{\partial m}|_{m_0^+}$. La valeur de ϵ , en particulier son signe, dépend de la transformation choisie. Il existe des transformations qui diminuent, et d'autre qui augmentent m (suivant qu'elles agissent plutôt sur le sous-réseau \uparrow ou \downarrow). Ne prenons plus une déformation infinitésimale arbitraire, mais les deux familles de déformations *optimales*, $D^+(\theta)$ et $D^-(\theta)$, qui augmentent et diminuent l'aimantation. θ n'est plus forcément l'angle que l'on impose à un sous-réseau et peut-être un paramétrage plus compliqué d'états voisins de Ψ_0 (une onde de spin par exemple). Elles déforment Ψ_0 en $\Psi^+(\theta)$ et $\Psi^-(\theta)$, qui sont respectivement les fondamentaux pour les aimantations $m^+(\theta) = m_0 + \epsilon^+\theta^2 + \dots$ et $m^-(\theta) = m_0 + \epsilon^-\theta^2 + \dots$ avec $\epsilon^+ > 0$ et $\epsilon^- < 0$. Puisque $e(m)$ est dérivable à gauche et à droite de m_0 , $e(\Psi^+(\theta))$ et $e(\Psi^-(\theta))$ varient également en $\mathcal{O}(\theta^2)$ au voisinage de zéro. Ces énergies s'écrivent :

$$\begin{aligned} e(\Psi^+(\theta)) &= e_0 + a^+\theta^2 + \mathcal{O}(\theta^3) \\ e(\Psi^-(\theta)) &= e_0 + a^-\theta^2 + \mathcal{O}(\theta^3) \end{aligned} \quad (7.7)$$

Et donc :

$$\begin{aligned} e(m_0 + \epsilon^+\theta^2) &= e_0 + a^+\theta^2 + \mathcal{O}(\theta^3) \quad , \quad \epsilon^+ > 0 \\ e(m_0 + \epsilon^-\theta^2) &= e_0 + a^-\theta^2 + \mathcal{O}(\theta^3) \quad , \quad \epsilon^- < 0 \end{aligned} \quad (7.8)$$

On remarque que $e(m)$ est une fonction croissante de m , par conséquent les coefficients a^+ et a^- satisfont $a^+ \geq 0$ et $a^- \leq 0$. On trouve finalement les dérivées à gauche et à droite de $m_0 > 0$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial m}|_{m=m_0^+} &= \frac{a^+}{\epsilon^+} \\ \frac{\partial e}{\partial m}|_{m=m_0^-} &= \frac{a^-}{\epsilon^-} \end{aligned} \quad (7.9)$$

La condition nécessaire et suffisante pour que l'état colinéaire Ψ_0 soit le fondamental d'un plateau d'aimantation est donc que $\frac{a^-}{\epsilon^-} < \frac{a^+}{\epsilon^+}$. Elle signifie une différence de rigidité entre les transformations qui augmentent et celles qui abaissent l'aimantation.

État colinéaire d'aimantation nulle

Si le système possède la symétrie $O(3)$ ⁶, il ne peut pas y avoir de plateau d'aimantation à $m_0 = 0$, quelles que soient les interactions à courte portée et dérivables dans les angles

⁶Il suffit, en fait, d'une symétrie $O(2)$ autour d'un axe qui n'est pas celui du champ appliqué.

entre spins. C'est une conséquence de la condition de colinéarité. Un plateau n'est possible que lorsque *tous* les fondamentaux d'aimantation $m^z = 0$ sont colinéaires à l'axe z du champ. Or, par rotation autour de l'axe x ou y , on peut en obtenir qui ne sont pas. Ils ont une susceptibilité χ_z non nulle. On retrouve le fait que $e(m)$ n'est pas linéaire mais quadratique à $m \rightarrow 0$ pour un état antiferromagnétique de Néel.

7.1.3 Plateaux pour des spins quantiques

En résumé, un plateau d'aimantation à $m_0 > 0$ se produit dans un système classique si les fondamentaux d'aimantation m_0 sont des états colinéaires dont les raideurs pour les excitations $\delta m > 0$ et $\delta m < 0$ sont différentes. Qu'en est-il dans le cas quantique ?

Plateau quantique à $m = 0$ et gap de spin

Un plateau à $m = 0$ signifie que $e(m)$ est linéaire $e(m) = \frac{1}{2}\Delta m + \mathcal{O}(m^2)$. Ceci implique mathématiquement l'existence à la limite thermodynamique d'un nombre *macroscopique* de gaps $\Delta \simeq E_N(S+1) - E_N(S)$ arbitrairement proche de Δ .⁷ Dans ce point de vue, le gap de spin microscopique $E(S=1) - E(S=0)$ peut être différent du gap $\Delta = 2\frac{\partial e}{\partial m}$ observable par la largeur du plateau d'aimantation⁸.

En revanche, un argument physique permet de comprendre pourquoi le *premier* gap de spin $E(S=1) - E(S=0)$ est en général égal au gap magnétique $2\frac{\partial e}{\partial m}$. Un gap de spin non nul est relié à une longueur de corrélation ξ finie ($\xi \sim \frac{1}{\Delta}$ pour fixer les idées), longueur qui caractérise aussi l'étendue spatiale des premières excitations magnétiques. On peut peupler le fondamental d'une densité faible mais finie $n \ll 1$ de ces excitations localisées, sans qu'elles interagissent notablement. Si ces excitations portent un spin $S_0 = \frac{1}{2}$ ou 1 et ont chacune une énergie Δ_0 , l'état de densité n a l'énergie $E \simeq E_0 + nN\Delta_0$ (N nombre total de sites). Son spin vaut au maximum $S = nNS_0$. On trouve $E(S) \simeq E_0 + \frac{S}{S_0}\Delta_0$ et

⁷Posons $\Delta_S(N) = E_N(S+1) - E_N(S)$. Alors $e(m) = \frac{1}{2}\Delta m + \mathcal{O}(m^2)$ signifie que $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_N(S=m\frac{N}{2})}{N} = \frac{1}{2}\Delta m + \mathcal{O}(m^2)$. On a donc $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_N(S=m\frac{N}{2}+1) - E_N(S=m\frac{N}{2})}{N} = \frac{\Delta}{N} + \frac{1}{N}\mathcal{O}(m)$. L'assertion rigoureuse sur l'existence d'un infini de gaps est donc : $\lim_{m \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \Delta_{S=m\frac{N}{2}}(N) = \Delta$.

⁸Voici un exemple de spectre avec un gap de spin fini mais sans aucun plateau d'aimantation à la limite thermodynamique :

$$E(S) = -\Delta\delta_{S,0} + \frac{S(S+1)}{2N\chi_0} \quad (7.10)$$

Pour ce spectre, $m(B) = 2\chi_0 B$ à la limite $N \rightarrow \infty$. Plus précisément : $\lim_{B \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{m}{B} = 2\chi_0$. Il est en fait facile de construire toutes sortes de spectres pathologiques. Par exemple $E(S) = \Delta(S - \delta_{S,1})$ n'a pas de gap ($E(S=0) = E(S=1) = 0$) mais il possède, toujours à la limite thermodynamique, un plateau d'aimantation. Seule l'énergie intensive $e(m)$ détermine l'aimantation pour $N = \infty$, et des gaps en nombre fini, *i.e.* $\sim \mathcal{O}(N^0)$, n'ont pas d'incidence sur $m(B)$.

$\frac{\partial e}{\partial m} = \frac{1}{2S_0}\Delta_0$. Chaque fois que les excitations élémentaires ont un spin non nul ⁹ et une étendue spatiale finie, le gap de spin est identique au gap magnétique.

Condition d'OSHIKAWA

Que reste-t-il de la condition de colinéarité que nous avons démontrée dans le cas de spins classiques? OSHIKAWA *et al.* [100] ont trouvé une généralisation du théorème LSM [83] qui montre qu'un plateau dans une chaîne de spins S ne peut se produire qu'à des valeurs de l'aimantation par site $M^z = \frac{1}{N}S_{\text{tot}}^z$ vérifiant :

$$n(S - M^z) \in \mathbb{Z} \quad (7.11)$$

où n est la période du fondamental, qui peut résulter d'une brisure explicite ou spontanée de l'invariance par translation. Cette condition n'est pas restreinte au cas des chaînes, elle est aussi pertinente dans les cas des échelles [25]. Nous rappelons ici la démonstration. Elle consiste à appliquer sur le fondamental $|\Psi_0\rangle$ d'une chaîne périodique de N sites un opérateur U défini par :

$$U = \exp \left[\frac{2\pi i}{N} \sum_{x=0}^{N-1} x S_x^z \right] \quad (7.12)$$

et on pose :

$$|\Psi'\rangle = U|\Psi_0\rangle \quad (7.13)$$

Pour un hamiltonien H avec des interactions à courte portée qui conservent S_{tot}^z , on vérifie que $\langle \Psi' | H - BS_{\text{tot}}^z | \Psi' \rangle = \langle \Psi_0 | H - BS_{\text{tot}}^z | \Psi_0 \rangle + \mathcal{O}(\frac{1}{N})$. Par ailleurs, l'impulsion de $|\Psi'\rangle$ diffère de celle de $|\Psi_0\rangle$. Si T est la translation d'un site, alors $T S_x^z T^{-1} = S_{x+1 \bmod N}^z$. Commuter U avec la translation T donne donc :

$$TUT^{-1} = \exp \left[\frac{2\pi i}{N} \sum_{x=0}^{N-1} x S_{(x+1 \bmod N)}^z \right] \quad (7.14)$$

$$= \exp \left[\frac{2\pi i}{N} \sum_{x=0}^{N-1} x S_x^z - \frac{2\pi i}{N} \sum_{x=0}^{N-1} S_x^z + 2i\pi S_{x=0}^z \right] \quad (7.15)$$

$$= U \exp [2i\pi(S_{x=0}^z - M^z)] \quad (7.16)$$

où $M^z = \frac{1}{N}S_{\text{tot}}^z$. Si $|\Psi_0\rangle$ est d'impulsion k_0 , alors Eq. (7.16) montre que $|\Psi'\rangle$ est d'impulsion $k' = k_0 + 2\pi(S - M^z)$. Quand le fondamental brise l'invariance par translation et qu'il est n fois dégénéré, les impulsions des fondamentaux sont : $k_i = 0, \frac{2\pi}{n}, \dots, (n-1)\frac{2\pi}{n}$

⁹Une étude du comportement critique en dimensions 1 et 2 d'un système où les excitations sont des bosons de spin $\frac{1}{2}$ ou 1 est discuté par SACHDEV *et al.* [118]

(et n vaut 1 s'il n'y a pas de brisure de symétrie). Mais si $n(S - M^z)$ n'est pas un entier, l'impulsion k' ne fait pas partie de l'ensemble des impulsions k_i des fondamentaux. L'état $|\Psi'\rangle$ est donc orthogonal au fondamental et signale l'existence d'un mode de basse énergie. Puisque U commute avec S_{tot}^z , $|\Psi'\rangle$ possède la même aimantation que $|\Psi\rangle$, et il ne contredit pas encore la possibilité d'un plateau à M^z . Pour qu'il n'y ait pas de plateau, il faut des excitations de basse énergie dans des secteurs d'aimantation différents. Cependant, on s'attend en général à ce qu'un mode de basse énergie se traduise par des états proches du fondamental dans le même secteur de spin *et* dans les secteurs de spin différents¹⁰. C'est en tout cas le résultat auquel aboutit, en dimension un, l'approche par bosonisation [100]. Un plateau n'est donc possible que lorsque l'équation (7.11) est satisfaite. Signalons pour conclure ce paragraphe sur le critère d'OSHIKAWA qu'il contient la conjecture de HALDANE comme le cas particulier où $M^z = 0$: un gap de spin n'est possible que lorsque nS est entier.

Colinéarité dans le cas quantique

Il est intéressant de noter que cette condition *ressemble* à la condition de colinéarité du § 7.1.2. Supposons qu'un état soit colinéaire et possède p spins vers le bas et $n - p$ spins vers le haut dans chaque cellule élémentaire. Dans cet état $u^p d^{n-p}$, le moment magnétique d'une cellule est $nM^z = (n - p)S - pS$ et on trouve :

$$n(S - M^z) = 2pS \in \mathbb{Z} \quad (7.17)$$

Dans le cas de spins $\frac{1}{2}$, cette condition est équivalente à Eq. (7.11). Par contre, *si la spin est supérieur à $\frac{1}{2}$, la condition de colinéarité (7.17) est plus restrictive que (7.11)*. Pour $n = 2$ et $S = 1$ par exemple, les plateaux permis par l'équation (7.11) sont $M^z = 0, \frac{1}{2}$ et 1. Par contre, la condition (7.17) n'autorise que $M^z = 0$ et 1. Plus simplement encore, le gap de spin de la phase de HALDANE viole le critère classique puisqu'il correspond à $S = 1$, $M^z = 0$ et $n = 1$.

Peut-on utiliser l'argument classique de colinéarité pour des spins quantiques ? Si un état quantique n'est pas colinéaire, dans le sens où il possède un sous-réseau avec une *aimantation transverse macroscopique*, l'argument classique est valable et il n'y a pas de plateau, quelle que soit la dimension d'espace. Il n'y a, à notre connaissance, que deux systèmes quantiques bidimensionnels qui exhibent des plateaux d'aimantation à $m_0 > 0$, dans les deux cas, il s'agit d'états colinéaires : plateau à $m = \frac{1}{3}$ du modèle XXZ sur réseau triangulaire [35, 61, 98, 133] et du modèle d'échange multiple sur le réseau triangulaire (ce travail [91] et Réf. [94]). La colinéarité n'est pas restreinte au cas d'une symétrie $O(3)$ dans le cas classique, et elle ne semble pas non plus l'être dans le cas de spins $\frac{1}{2}$. En

¹⁰On remarque toutefois qu'il existe des situations où un continuum d'excitations $\Delta M^z = 0$ n'est pas accompagné d'excitations $\Delta M^z = \pm 1$, par exemple dans le modèle d'Heisenberg sur le réseau kagome [140].

particulier, si les couplages sont de type XXZ, les plateaux, s'il y en a, doivent correspondre à des configurations de spins colinéaires au champ, qu'il soit transverse ou longitudinal par rapport à Z ¹¹.

Contrairement au cas classique, un état quantique peut n'avoir aucune aimantation macroscopique transverse, sans pour autant satisfaire le critère (7.17). Il s'agit par exemple d'états où les corrélations dans le plan perpendiculaire au champ sont à courte portée. L'analyse qui précède nous enseigne qu'un plateau qui satisfait le critère d'OSHIKAWA Eq. (7.11) mais sans satisfaire le critère quasi-classique Eq. (7.17) est nécessairement dans cette catégorie. Cette distinction (pour les spins entiers) n'est pertinente qu'en dimension supérieure ou égale à deux puisqu'en dimension 1, on s'attend, à cause des fluctuations, à ne jamais trouver d'aimantation macroscopique en dehors de la direction du champ.

7.2 Aimantation du modèle d'échange multiple

7.2.1 Plateau à $m = \frac{1}{2}$

Nous revenons ici au modèle d'échange multiple sur le réseau triangulaire. L'énergie en fonction de l'aimantation est présentée Fig. 7.5.a pour les tailles $N = 16, 20, 24$ et 28 . La propriété la plus remarquable est la discontinuité dans la pente à $m = \frac{1}{2}$. Cette discontinuité, conformément au schéma Fig. 7.3, entraîne un plateau dans l'aimantation en fonction du champ magnétique appliqué (Fig. 7.5.b). La largeur du plateau varie relativement peu avec la taille du système et il persiste à la limite thermodynamique. Autre fait remarquable, KUBO et MOMOI, qui ont étudié le modèle d'échange multiple *classique* [77], trouvent un plateau d'aimantation pour la même valeur $m = \frac{1}{2}$ ¹². Ce plateau persiste dans une grande gamme de paramètres. La figure 7.6 montre que pour certaines valeurs des fréquences d'échange, le plateau peut aller jusqu'à occuper la majeure partie de l'intervalle de réponse magnétique. À la suite des arguments du § 7.1.3 sur les contraintes qui pèsent sur le fondamental d'un plateau d'aimantation, il n'est pas très surprenant de constater que l'aimantation du plateau n'est pas affectée par les fluctuations quantiques et que l'état fondamental est de structure colinéaire.

¹¹Le modèle XY pour des spins $\frac{1}{2}$ constitue un exemple [133]. Un plateau existe en champ transverse à $T = 0$ pour un état ferrimagnétique colinéaire au champ ($m = \frac{1}{3}$). Il n'a en revanche pas de plateau quand le champ est appliqué suivant z . D'un autre côté, si les interactions antiferromagnétiques ont une anisotropie de type Ising, alors un plateau à $m = \frac{1}{3}$ se produit pour un champ dans l'axe Ising [98].

¹²On remarque que les courbes d'aimantation calculées pour $N = 16$ et $N = 18$ sur le réseau carré avec des échanges à deux et quatre corps présentent un plateau similaire [111, 112]. Cette hypothèse n'est pas discutée par les auteurs, mais il se pourrait que le plateau persiste à la limite thermodynamique (voir aussi la note 30 de [94]).

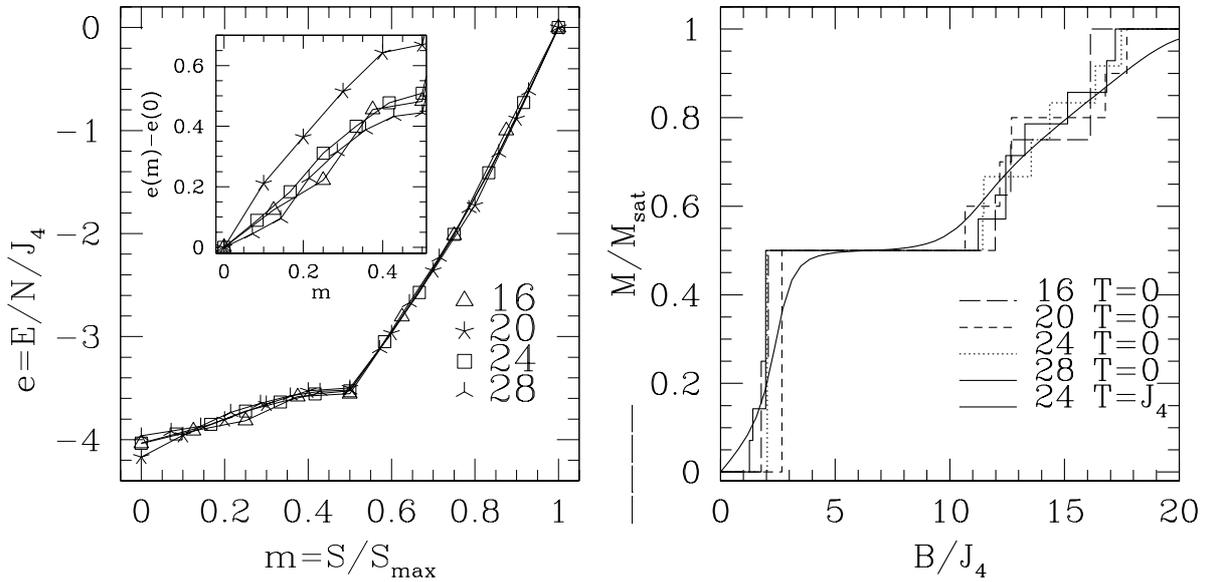


FIG. 7.5: $e(m)$ et $m(B)$ pour $J_2 = -2$ et $J_4 = 1$. Les courbes d'aimantation pour $N = 16, 20$ et $N = 28, m \geq \frac{1}{2}$ ont également été obtenues indépendamment par MOMOI *et al.* [94]. Le courbe à température finie pour $N = 24$ souligne la stabilité du plateau vis-à-vis des fluctuations thermiques.

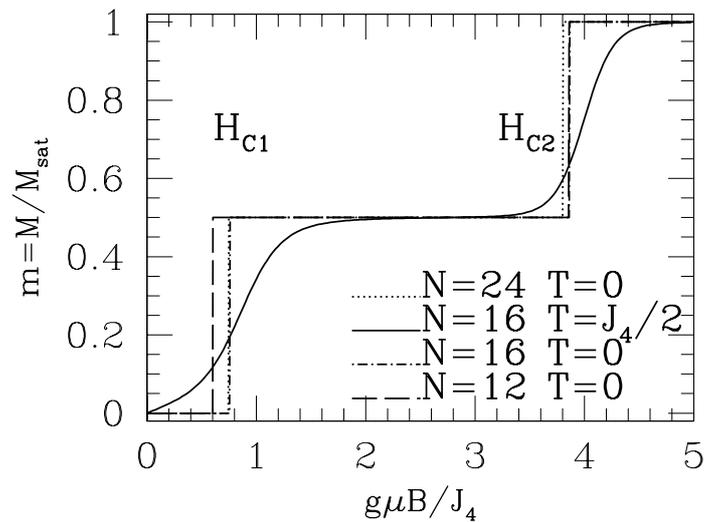
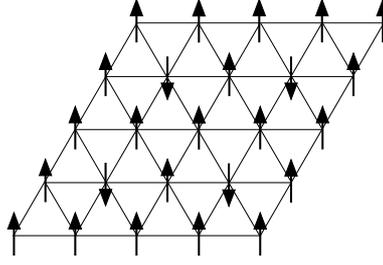


FIG. 7.6: $m(B)$ pour $J_2 = -2, J_4 = 1, J_5 = 0.2, J_6 = 0.08$

FIG. 7.7: État $uuud$ à quatre sous-réseaux

7.2.2 État $uuud$

KUBO et MOMOI trouvent que le fondamental classique à $m = \frac{1}{2}$ est l'état à quatre sous-réseaux $uuud$ dessiné Fig. 7.7. Cet état est colinéaire. Il possède une maille élémentaire de quatre sites et satisfait le critère Eq. (7.17). Les diagonalisations exactes montrent que le fondamental quantique à $m = \frac{1}{2}$ est également cet état à quatre sous-réseaux, habillé de fluctuations quantiques. MOMOI *et al.* ont effectué une étude par diagonalisations exactes du modèle $J_2 - J_4$ et sont arrivés indépendamment à la même conclusion [94]. Les données numériques qui conduisent à identifier le fondamental $S = N/4$ comme un état $uuud$ sont les suivantes (de la plus simple à, nous semble-t-il, la plus convaincante) :

- Nous n'observons de plateau d'aimantation que sur les systèmes où conditions aux bords périodiques ne frustrant pas la structure à quatre sous-réseaux. Dans les cas contraires, le fondamental du secteur $S = N/4$ possède un énergie E/N beaucoup plus élevée.
- Les corrélations dans le fondamental $S = \frac{N}{4}$ indiquent que l'état quantique est proche de la structure classique $uuud$. À distance $|j - i| = 2$ par exemple, on trouve une très forte corrélation ferromagnétique, à plus de 80% de la valeur classique maximale ¹³.
- L'énergie quantique ($\frac{1}{N}E_{N=28}(S = N/4) = -3.518$ pour $J_2 = -2, J_4 = 1$) n'est pas très éloignée de la valeur classique de l'état $uuud$ ($E_{uuud}^C = -3.$), si on la compare à ce qui se passe pour $S = 0$ ($\frac{1}{N}E^Q(S = 0) = -4$ tandis que le fondamental vaut -3. La différence reste importante, elle nous rappelle que l'état $uuud$ n'est pas état propre exact de l'hamiltonien.
- Les nombres quantiques du fondamental à $S = \frac{N}{4}$ permettent de conclure à une brisure spontanée de l'invariance par translation. La figure 7.8 montre un spectre au voisinage de $S = N/4 = 7$ pour 28 sites. Le fondamental de spin $S = 7$ correspond à

¹³ $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle = 0.180, 0.183, 0.202$ suivant la direction pour $N = 24$, ce réseau n'ayant pas la symétrie $\mathcal{R}_{2\pi/3}$. MOMOI *et al.* [94] estiment, d'après une analyse de taille finie sur $N = 12, 16, 20, 24$ et 28, que la réduction de l'aimantation des sous-réseaux est de 10% pour les trois sous-réseaux u et de 30% pour le sous-réseau d .

deux niveaux d'énergie quasiment dégénérés ($E = -98.475$ pour ∇ et $E' = -98.505$ pour \diamond) qui correspondent à quatre états dont les nombres quantiques sont $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, $\mathcal{R}_\pi = 1$ et $\mathbf{k} = \mathbf{A}_{1,2,3}$, $\mathcal{R}_\pi = 1$ (3 fois dégénéré par symétrie de rotation $\mathcal{R}_{2\pi/3}$). Les symétries de ces niveaux indiquent : un spin total $S = N/4$, une dégénérescence quatre, l'invariance par rotation de π autour d'un site et par translation de deux pas dans n'importe quelle direction. Par contre, une combinaison linéaire de ces quatre états brisera l'invariance par translation d'un pas et la rotation $\mathcal{R}_{2\pi/3}$. Ces propriétés sont précisément celles qui caractérisent les (quatre) états *uuud*.

Losanges de spin 1

Au chapitre 5, nous avons proposé une interprétation semi-qualitative de la structure de la fonction d'onde à champ nul comme le résultat du couplage de fonctions d'ondes locales de quatre spins (losanges) portant un spin $S = 1$ (§ 5.3). Ce point de vue est non seulement cohérent avec le plateau d'aimantation, mais il peut aussi en éclairer l'origine. Si, comme nous le suggérons, le secteur $S = 1$ d'un losange est séparé du secteur $S = 2$ par un gap, le plateau à $m = \frac{1}{2}$ en est une conséquence naturelle. Sans aucun losange dans un état de spin $S = 2$, il est possible d'atteindre des aimantations totales entre $m = 0$ et $\frac{1}{2}$. Par contre, pour dépasser $m = \frac{1}{2}$, au moins un groupe de quatre spins doit être ferromagnétique, ce qui contraint à sortir du sous-espace des états engendrés par les pavages de losanges de spin 1. Ce point de vue est similaire à l'interprétation de MOMOI *et al.* [94], où le gap local qui sépare les secteurs $S^z = 1$ et $S^z = 2$ d'un losange est formulé comme une répulsion entre les spins \downarrow (en nombre $\simeq N/4$) qui se déplacent au milieu de spins \uparrow (en nombre $\simeq 3N/4$). L'état *uuud* est alors un cristal de spins \downarrow ("charge-density wave").

Il faut noter que, dans notre point de vue, l'état *uuud* apparaît comme l'alignement des moments $S = 1$ de tous les losanges. Ceci n'est pas exact si on prend le terme "losange de spin 1" dans le sens strict de l'équation (5.2) page 82. Ne serait-ce que parce qu'un pavage de losanges de ce type est douze fois dégénéré, ce qui n'est pas le cas de l'état *uuud*. Par contre, on peut concevoir un processus de renormalisation du spectre effectif d'un losange, entraîné par la polarisation des losanges voisins, de sorte que sous champ magnétique, l'état stable d'un losange passe progressivement du secteur de spin total $S = 1$ à un état de $S^z = 1$ (de type $\uparrow\uparrow\downarrow$). On retrouve alors l'état *uuud* à quatre sous-réseaux.

7.2.3 Comparaison classique/quantique

Les fondamentaux classiques et quantiques sont donc très semblables à $m = \frac{1}{2}$. On sait pourtant que le fondamental $S = 0$ quantique (liquide de spins) est très différent d'un état classique. Comment s'opère la déformation de $e(m)$ du classique au quantique ? Pour les paramètres $J_2/J_4 = -2$, MOMOI *et al.* [94] montrent que le fondamental possède

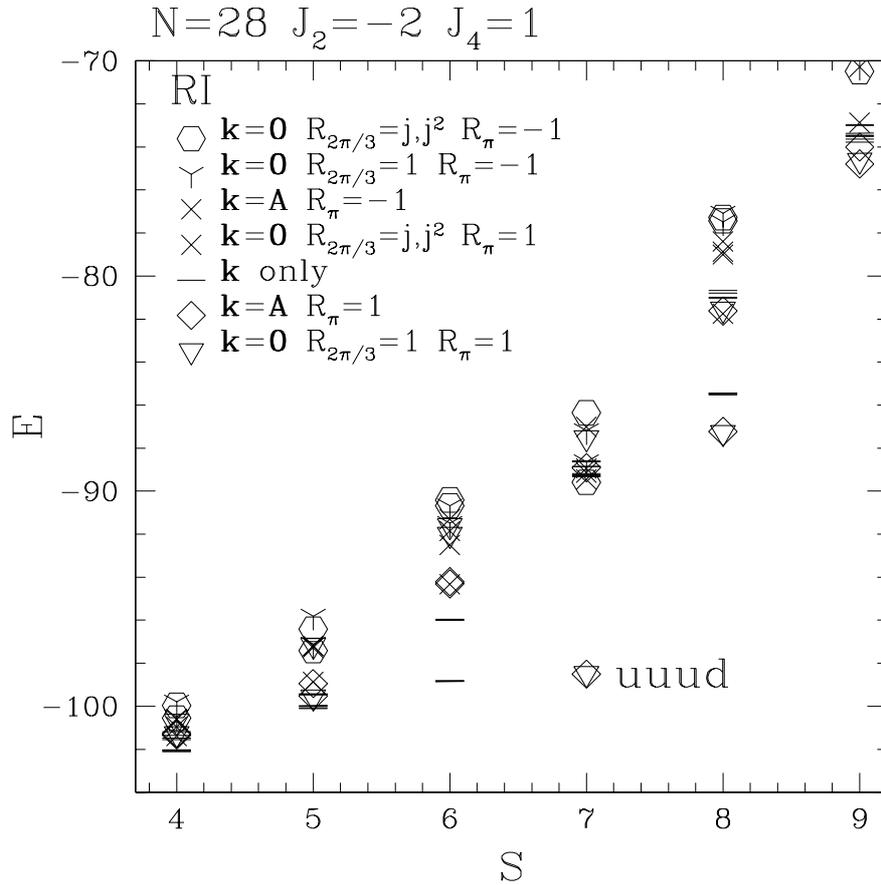


FIG. 7.8: Spectre $N = 28$, $J_2 = -2$, $J_4 = 1$ pour $S = 4, \dots, 9$. Seuls les deux premiers niveaux de chaque RI sont représentés. La quasi-dégénérescence du fondamental à $S = 7$ est la signature de la brisure de symétrie spatiale de l'état uud . La différence importante entre les gaps de spins $E(S+1) - E(S)$ pour $S < S_{max}/2 = 7$ et $S \geq S_{max}$ signale une discontinuité dans la pente $\frac{\partial e}{\partial m}$ à $m = \frac{1}{2}$.

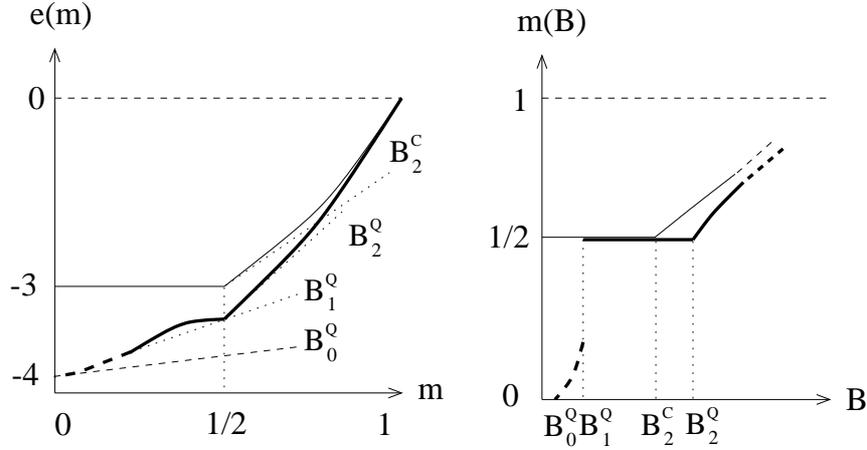


FIG. 7.9: $e(m)$ et $m(B)$ dans les cas classique (traits fins) et quantique (épais) au voisinage de $J_2 = -2, J_4 = 1$.

une dégénérescence élevée, au moins d'ordre $2^{\sqrt{N}}$. Puisque l'état $uuud$ est parmi les fondamentaux celui qui à la plus grande aimantation, la courbe $e(m)$ est horizontale entre $m = 0$ et $m = \frac{1}{2}$ (Fig. 7.9).¹⁴ Au delà, on déduit de l'aimantation classique calculée par Monte-Carlo [94] que la courbe rejoint, sans accident particulier, la courbe quantique à $m = 1$. Les fluctuations quantiques sont plus importantes pour les petites valeurs du spin total. Sur la figure 7.9, on constate que l'énergie quantique est d'autant plus basse par rapport au spectre classique que l'aimantation est petite. De plus les fluctuations quantiques donnent une courbure négative à la partie $m < \frac{1}{2}$ de $e(m)$. Cette concavité apparaît en examinant les spectres des systèmes dont la géométrie est compatible avec l'état $uuud$. Tous ont un fondamental du secteur $S = N/4 - 1$ quasiment dégénéré avec les quatre états $uuud$ (Fig. 7.8). Ces états sont la signature du mode d'énergie nulle obtenu par un calcul d'onde de spins mené sur l'état $uuud$ [94]. Dans cette optique, les premiers états du secteurs $S = N/4 - 1$ sont les magnons $\Delta S^z = -1$ de l'état $uuud$.

Ceci suggère que la dérivée de $e(m)$ "à gauche" de l'état $uuud$ est nulle. Quand on augmente le champ magnétique, la transition vers l'état $uuud$ est du premier ordre à température nulle. Le champ de la transition du premier ordre correspond à B_1^Q sur la figure 7.9. La partie $m < \frac{1}{2}$ dessinée en pointillés pour le système quantique reproduit qualitativement la situation observée dans l'échantillon $N = 28$: un plateau d'aimantation nulle jusqu'à B_0^Q , croissance de l'aimantation jusqu'à $m \sim 0.2$ suivi d'un saut métamagnétique jusqu'à $m = \frac{1}{2}$.

¹⁴Cette dégénérescence de fondamentaux d'aimantation 0 et $\frac{1}{2}$ apparaît aussi dans le spectre quantique d'un losange (Tab. 5.1, page 75). Un des deux états singulet est dégénéré avec l'un des trois triplets, quels que soient J_4 et $J_2 = J_2'$: $-2J_4 + J_2' = -2J_4 + 2J_2 - J_2'$.

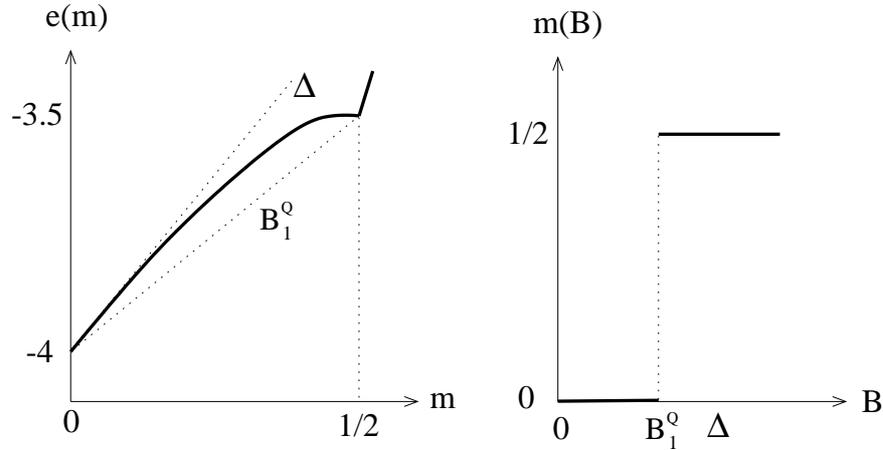


FIG. 7.10: $e(m)$ et $m(B)$ quantiques au voisinage de $J_2 = -2, J_4 = 1$: éventualité d'un plateau $m = 0$ plus petit que le gap Δ .

7.2.4 Physique à champ faible

Pour l'aimantation à bas champ, la figure 7.9 n'est qu'un des deux scénarii possibles. Les systèmes $N = 20$ et 24 , contrairement à 28 , présentent un saut d'aimantation de $m = 0$ à $m = \frac{1}{2}$ qui s'apparente à une transition métamagnétique du premier ordre. Dans ce cas, l'allure de $e(m)$ et $m(B)$ est reproduite schématiquement Fig. 7.10. On y remarque que la largeur du plateau à $m = 0$ est différente du gap de spin donné par la pente $\frac{\partial e}{\partial m}$ à l'origine. Les données numériques ne permettent pas de décider lequel de ces deux comportements survit à la limite thermodynamique. D'un point de vue théorique, c'est la possibilité d'une transition critique pour un champ magnétique égal au gap de spin qui est la plus riche ($N = 28$ et Fig. 7.9). Si les excitations élémentaires de l'état non magnétique en champ nul sont effectivement bosoniques, comme suggéré au paragraphe 6.2, l'approche de la transition sous champ magnétique de SACHDEV, SENTHIL et SHANKAR [118] prédit la forme de l'aimantation au voisinage du champ critique $B_0 = \Delta$. À température nulle et en dimension deux, ils obtiennent :

$$m(B = \Delta + \delta B) \sim \delta B \log \frac{1}{\delta B} \quad (7.18)$$

Malheureusement, l'importante discrétisation de l'aimantation sur les systèmes de petite taille rend impossible la validation de ce type de comportement critique par des diagonalisations exactes, surtout dans le cas d'éventuelles corrections logarithmiques.

7.3 Conclusions

Dans ce chapitre, nous avons discuté le comportement du système dans un champ magnétique extérieur, et, en particulier, l'existence de plateaux d'aimantation à $m = 0$ et $m = \frac{1}{2}$. Pour cela, nous nous sommes intéressés au problème plus général de la courbe d'aimantation d'un système de spins à température nulle.

Nous avons rappelé comment, en dimension un, le critère d'OSHIKAWA *et al.* fournit une contrainte de nature *topologique* sur les valeurs possibles de l'aimantation dans un plateau. Ce critère est une généralisation à aimantation finie du théorème de LIEB, SHULTZ et MATTIS [83] (LSM). Ce théorème montre l'existence d'au moins un état de basse énergie pour une chaîne de spin S demi entier. Or, le théorème LSM se généralise sans difficulté [3] au cas d'une bande de $N = L \times M$ spins arbitrairement large mais avec $L \gg M$ et de largeur impaire ($M = 1 \pmod{2}$). Malheureusement, à aimantation finie, cette généralisation ne nous apprend rien sur les plateaux permis en dimension *deux*. En effet, on trouve [25] qu'un gap existe que lorsque :

$$Ml(S - M^z) \in \mathbb{Z} \quad (7.19)$$

où l est la période du fondamental dans la grande direction (L). Dans la limite où $L \gg M \gg 1$, le critère Eq. (7.19) ne contraint pas la valeur de M^z de façon pertinente (sinon à être un multiple de $1/(Ml) \ll 1$). Il n'existe pas, à notre connaissance, de preuve que M^z doive prendre des valeurs *simples* au niveau des plateaux en deux dimensions pour des spins quantiques, même si c'est le cas pour tous les exemples connus.

L'étude de MOMOI *et al.* [94] sur le plateau $m = \frac{1}{2}$ du modèle d'échange multiple classique montre que les plateaux d'aimantation ne sont pas nécessairement d'origine quantique. Pour des spins classiques, toujours à température nulle, nous avons montré que les valeurs de l'aimantation sont contraintes à des valeurs rationnelles dont le dénominateur est la taille de la cellule élémentaire. Cette fois-ci, l'origine de la contrainte est essentiellement *locale*, elle découle de la colinéarité des spins avec le champ. Le fait que les fluctuations quantiques n'affectent pas la valeur de l'aimantation au plateau $m = \frac{1}{2}$ dans le modèle d'échange multiple suggère que la condition classique puisse être la trace d'une condition plus générale, valable en présence de fluctuations. En effet, il était *a priori* envisageable que les fluctuations réduisent de manières indépendantes l'aimantation du sous-réseau "down" et celle des trois sous-réseaux "up". Auquel cas, l'état *uuud* quantique n'aurait plus eu l'aimantation $m = \frac{1}{2}$. Au contraire, il apparaît que l'aimantation du sous-réseaux "down" est exactement réduite par les fluctuations de la même quantité que celle des sous-réseaux "up". En conséquence, l'aimantation reste $m = \frac{1}{2}$. Il nous semble intéressant de s'interroger sur le type de contrainte qui pourrait être à l'œuvre ici.

Quelle forme peut prendre cette hypothétique généralisation du critère d'OSHIKAWA *et al.* en dimension deux? La forme simple des critères Eq. (7.11), (7.17) et (7.19) peut laiss-

ser penser que les plateaux permis sont ceux autorisés par l'addition de moments cinétiques au sein d'une cellule élémentaire. Les corrections à la limite de couplage fort (à l'intérieur d'une cellule) ne pouvant que réduire, éventuellement à zéro, la largeur des plateaux. Cependant, le plateau à $m = 0$ du modèle d'échange multiple nous signale que cet énoncé ne peut pas être valable tel quel. En effet, il n'y a qu'un spin dans la maille élémentaire (nous ne trouvons aucune trace de brisure spontanée de symétrie spatiale) et chaque site porte un spin $\frac{1}{2}$. Une condition du type $n(S - M^z) \in \mathbb{Z}$ est donc violée pour $n = 1$, $M^z = 0$ et $S = \frac{1}{2}$. C'est donc la *dégénérescence du fondamental* (4 ou 8 dans la phase liquide de spins étudiée) qui intervient dans l'entier n et non la taille de la maille élémentaire (ceci reste cohérent avec l'approche par une bande de $L \times M$ spins où $L \gg M \gg 1$). En ce sens, le gap de spin n'est compatible avec l'absence de brisure de symétrie que grâce à la dégénérescence topologique.

Il reste à comprendre l'origine de la quantification de l'aimantation pour $M^z > 0$ en deux dimensions. Il semble, à ce sujet, que plusieurs pistes de réflexions méritent d'être explorées. **1)** On peut chercher une nouvelle transformation analogue à l'opérateur à U Eq. (7.12), valable sur le tore, pour créer un état de basse énergie orthogonal au fondamental. Peut-être faut-il s'inspirer de la transformation topologique construite sur les pavages de dimères pour établir la dégénérescence 4 dans le cas $S = 0$? **2)** On peut aussi partir du travail d'AFFLECK [3] sur la bande $L \times M$. On peut tenter de redonner un rôle symétrique aux deux directions pour faire disparaître la taille M dans le critère Eq. 7.19 : si le fondamental possède une période finie dans la direction L , c'est vraisemblablement le cas aussi dans la direction M . **3)** Enfin, inspiré par l'exemple de l'état *uvud*, on peut imaginer aborder le problème de l'aimantation à partir du point de vue classique. Il pourrait s'agir d'une approche à grand spin pour décrire les fluctuations autour de la direction du champ magnétique extérieur.

Chapitre 8

Thermodynamique et résultats expérimentaux

Jusqu'ici, les résultats sur le liquide de spins du modèle d'échange multiple concernent exclusivement la limite de température nulle : structure du fondamental et des corrélations à $T = 0$, gap de spin et nature des excitations élémentaires. En outre, l'essentiel de l'analyse a porté sur un point particulier de l'espace des paramètres, à savoir le modèle $J_2 - J_4$ à $J_2/J_4 = -2$. Nous essayons dans ce dernier chapitre d'élargir le champ en se replaçant dans le cadre des films d' ^3He solides. L'éventuelle réalisation d'un liquide de spins dans l' ^3He solide est une motivation importante pour extraire du modèle d'échange multiple des quantités mesurables. Nous présentons des calculs à température finie pour des hamiltoniens aux paramètres d'échange réalistes pour l' ^3He .

Bien que leurs fondamentaux soient singulets, ces hamiltoniens sont proches de la frontière ferromagnétique, et ce en raison d'une contribution importante de l'échange à 5 corps. Le gap de spin est relativement petit et on attend une longueur de corrélation sensiblement plus grande qu'au point $J_2/J_4 = -2$. Ainsi, des effets de tailles importants limitent souvent l'interprétation des résultats de diagonalisations. Néanmoins, grâce à des calculs jusqu'à $N = 24$, nous montrons que le modèle d'échange multiple peut rendre compte des anomalies de basse température observées dans les expériences de calorimétrie. Les diagonalisations apportent aussi les premières données concernant la physique sous champ magnétique : la possibilité d'observer expérimentalement le plateau d'aimantation $uuud$ est discutée à la section 8.2, ainsi qu'une éventuelle transition de phase à température finie. La dernière section présente le calcul de la chaleur spécifique, susceptibilité et aimantation pour un jeu de fréquences d'échange qui est précisément celui extrait du comportement haute température de la seconde couche d' ^3He solide [14].

8.1 Chaleur spécifique

8.1.1 Données expérimentales

Plusieurs groupes ont effectué des mesures de chaleur spécifique à très basse température sur des films d' ^3He solides (Bell Laboratories à Murray Hill [51, 52], Royal Holloway à Londres [26, 129], Universités de Tsukuba [65] et de Tokyo [64]). Dès 1989, GREYWALL et BUSCH [52] suggèrent qu'une fraction anormalement grande de l'entropie se trouve en dessous de 2.5mK, ce qui les conduit à imaginer que des mesures à plus basse température pourraient révéler un second pic de chaleur spécifique. Les mesures à ultra-basse température (92 μK) effectuées en seconde couche par ISHIDA *et al.* [65] montrent effectivement une bosse de chaleur spécifique à une température inférieure à l'échange typique $J_{C_v} \sim 2\text{mK}$ (Fig. 8.1). Une anomalie semblable a été observée dans une couche solide d' ^3He à basse densité sur double couche de HD [26]. Ce comportement est très différent de celui d'un système avec de l'ordre de Néel où les ondes de spins donneraient un comportement à basse température en $C_v(T) \sim T^2$, suivi d'un pic¹ unique pour $T \sim J$.

Un grand nombre de degrés de liberté à basse température est au contraire une signature de la frustration importante du système. La structure à deux bosses amène d'ailleurs ISHIDA *et al.* [65] à émettre l'hypothèse d'un fondamental désordonné. Nos résultats numériques sur le modèle d'échange multiple prédisent un liquide de spins à température nulle et la possibilité d'un gap. Les données de chaleur spécifique n'excluent pas un tel gap, même si un régime thermiquement activé du type $C_v(T) \sim \exp(-\Delta/k_B T)$ n'est pas encore atteint à 100 μK (Fig. 8.1)².

8.1.2 Chaleur spécifique par les diagonalisations exactes

Souvent limitées aux propriétés du fondamental et des tous premiers états excités, les diagonalisations exactes peuvent en fait étudier d'autres échelles d'énergie et les propriétés thermodynamiques à température finie comme chaleur spécifique, susceptibilité ou aimantation. Les précédentes diagonalisations du modèle d'échange multiple sur réseau triangulaire étaient limitées à 16 sites [17, 106]. Pour la première fois, nous proposons une

¹Le modèle d'Heisenberg $H = 2J \sum_{i < j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ donne un maximum à $T \simeq 0.7J$ sur le réseau triangulaire [42].

²En première approximation, ceci semble fixer une limite supérieure à la valeur du gap éventuel. Toutefois, la comparaison avec les $C_v(T)$ calculés numériquement montre que l'on n'entre dans le régime activé qu'à une température sensiblement plus basse que le gap de spin. Ainsi les chaleurs spécifiques pour $N = 20$ ou 24 (Fig. 8.2) ne sont exponentiellement décroissantes qu'en dessous de $T \sim J_4/5$ alors que le gap de spin est $\Delta = 1.1J_4$ dans les deux cas. Même si l'effet est peut-être amplifié à taille finie, la densité d'état juste *au dessus* du gap de spin influe considérablement sur la chaleur spécifique aux températures en *dessous* du gap.

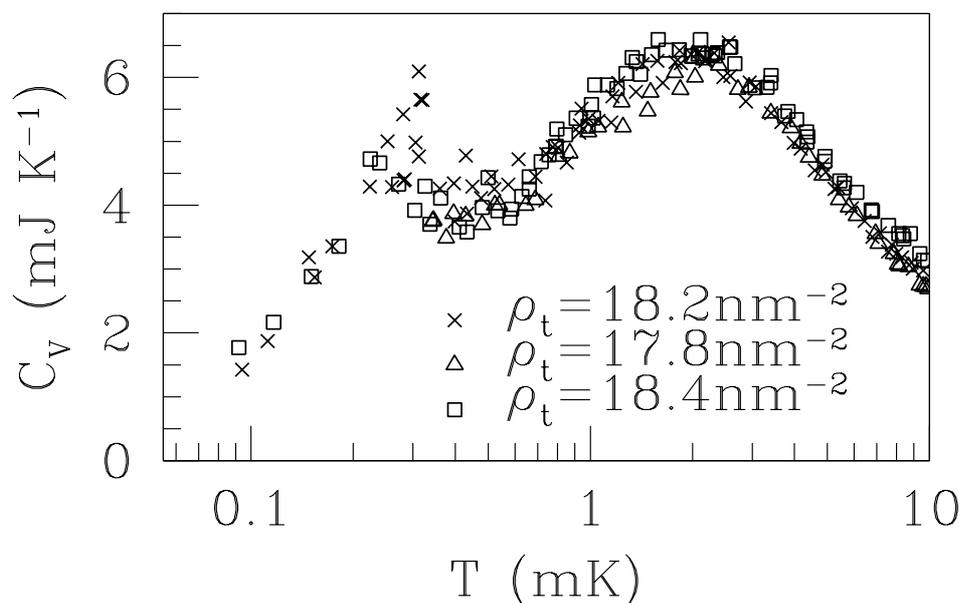


FIG. 8.1: Chaleur spécifique expérimentale de la seconde couche d'³He adsorbée sur du graphite mesurée par ISHIDA *et al.* [65].

analyse sur plusieurs tailles dans un calcul de thermodynamique à partir de spectres exacts jusqu'à 24 sites.

Effets de taille

Pour $N = 16$ et 20 , les quantités thermodynamiques sont calculées exactement à partir des 2^N états. Pour $N = 24$, nous employons une méthode approchée décrite dans l'annexe D. Elle utilise à la fois le spectre de basse énergie calculé exactement par Lanczös et un développement haute température. Cette technique donne des quantités exactes à basse et haute température et qualitativement correctes dans le régime intermédiaire, même en présence de champ magnétique extérieur.

Il reste le problème important des effets de taille finie. À haute ou moyenne température, la longueur de corrélation est réduite. Les chaleurs spécifiques calculées à taille finie sont quasiment celles du système infini. Aux températures plus basses, comparables ou inférieures aux échanges, les grandeurs thermodynamiques peuvent dépendre fortement de la taille de l'échantillon et de sa forme. Les informations que l'on peut tirer dans cette gamme sont en général peu nombreuses et au mieux qualitatives. Il existe toutefois des cas particuliers où l'exploitation quantitative est possible jusqu'à des températures assez basses. C'est le cas, par exemple, si le spectre possède un gap important qui dépend peu de la taille du système. Le C_v pourra être proche de sa limite thermodynamique dans une grande gamme

de température.

Les chaleurs spécifiques coïncident à haute température, typiquement pour $T \gtrsim 2J_{C_v}$ comme on peut le constater sur les figures 8.2 et 8.4. Cette convergence à haute température semble permettre de descendre un peu plus bas en température que les approximants de Padé des séries [107]. À basse température, les différences d'une taille à l'autre peuvent rendre difficiles les prédictions sur la limite thermodynamique. La basse température est très sensible aux détails des tous premiers états comme la valeur du gap, la dégénérescence ou quasi-dégénérescence du fondamental. La figure D.2 (page 160) fournit un exemple de tels effets. Le système à 20 sites pour $J_2/J_4 = -2$ possède un gap de spin très important ($\Delta = 4.2J_4$, voir Fig. 4.12), ce qui se traduit par un "démarrage" de la chaleur spécifique à une température élevée. Pour conserver l'entropie totale $\int_0^\infty C_v(T)d(\log T) = N \log 2$, le maximum se trouve à une valeur anormalement haute.

Bosse de basse température

Il peut arriver qu'une structure à température intermédiaire $0.2J_{C_v} \lesssim T$ persiste pour les trois tailles $N = 16, 20$ et 24 . Nous faisons alors l'hypothèse qu'elle demeure pour les grands systèmes. C'est le cas de la bosse à $T/J_{C_v} \simeq 0.35$ représentée Fig. 8.2. Les effets de tailles restent importants, notamment de $N = 16$ à 20 , et ces systèmes sont encore trop petits pour fournir quantitativement le $C_v(T)$ du système infini. Ce qui est remarquable, c'est la stabilité de la température du maximum, et la stabilité de la courbe entière de $N = 20$ à 24 . Par ailleurs, même sur la plus petite taille ($N = 16$), la bosse met en jeu plusieurs dizaines de niveaux d'énergie et n'est pas due à la discrétisation du bas du spectre. Roger [106] calcule la chaleur spécifique à $J_2/J_4 = -4$ et $J_6/J_4 = 1$ pour 16 sites et trouve une bosse à basse température semblable. En fait, de nombreuses fréquences d'échange dans cette région de l'espace des paramètres donnent sur $N = 16, 19$ ou 20 une double bosse ou un épaulement et une bosse (Fig. 8.2 et 8.3). Dans la suite nous concentrons la discussion sur l'hamiltonien $J_2/J_4 = -2$, $J_5/J_4 = 0.2$, $J_6/J_4 = 0.08$, qui est intéressant pour plusieurs raisons :

- Les rapports J_2/J_4 et J_5/J_4 sont proches de ceux mesurés [109] en seconde couche à basse densité (voir aussi Tab. 1.3 page 10). Par contre, J_6/J_4 est probablement sous-estimé.
- Le spectre donne lieu à un large plateau d'aimantation $uuud$ (Fig. 7.6 page 117). Il n'est pas absurde de supposer que la physique soit similaire à celle trouvée à $J_2/J_4 = -2$ (gaps de spin etc.).
- La stabilité de la courbe de C_v entre 20 et 24 est un gage de stabilité vis-à-vis des effets de taille.

Comparons les résultats numériques de la figure 8.2 avec les données expérimentales du groupe de Tsukuba (Fig. 8.1). L'accord est qualitatif seulement puisqu'il y a entre les

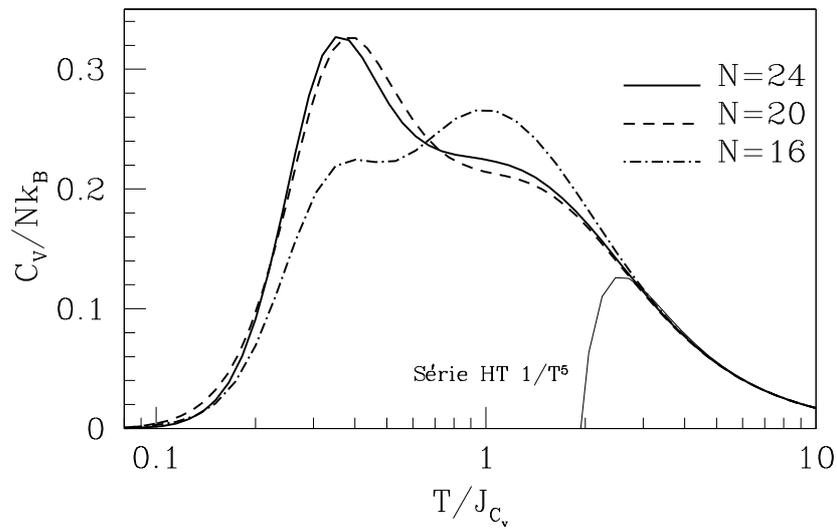


FIG. 8.2: Chaleurs spécifiques $N = 16, 20$ et 24 . Paramètres d'échange : $J_2/J_4 = -2$, $J_5/J_4 = 0.2$, $J_6/J_4 = 0.08$, $J_{C_v}/J_4 = 0.932$. Gap de spin $\Delta_{N=24} = 1.15J_4$. Borne supérieure sur gap à la limite thermodynamique $\Delta_\infty \sim 0.7J_4$. La courbe $N = 24$ utilise la méthode approchée décrite annexe D. Suffisamment de niveaux exacts (resp. de traces de H) sont calculé(e)s pour que $C_v(T)$ soit exact à $T \lesssim 0.4J_{C_v}$ (resp. $T \gtrsim 2J_{C_v}$).

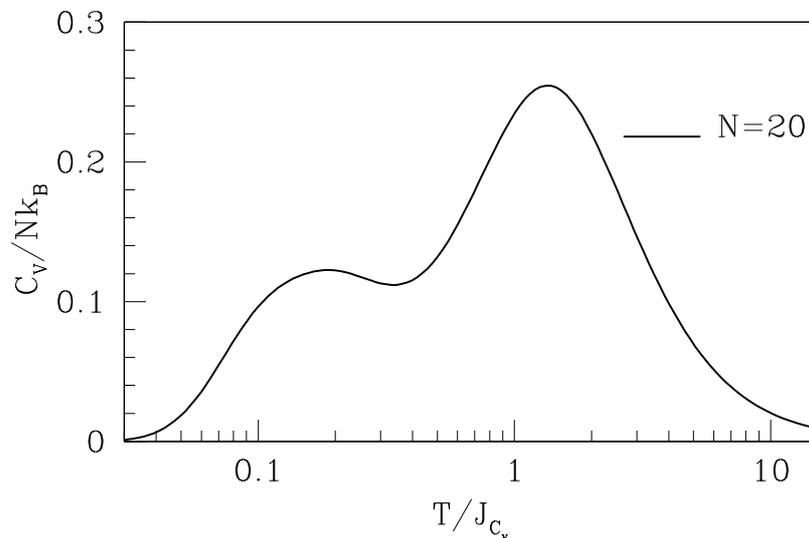


FIG. 8.3: Chaleur spécifique $N = 20$ pour $J_2/J_4 = -1.6$, $J_5/J_4 = 0.3$, $J_6/J_4 = 0.5$, $J_{C_v}/J_4 = 0.846$. Gap de spin $\Delta_{N=20} = 0.24J_4$. Estimation du gap thermodynamique $\Delta_\infty < 0.25J_4$.

deux maxima expérimentaux un facteur dix en température, et seulement un facteur trois dans la simulation, et que les hauteurs relatives ne coïncident pas non plus. Ceci n'est pas surprenant dans la mesure où les pics de chaleurs spécifique dépendent de propriétés fines de la densité d'états³. On s'attend notamment à ce que la valeur du gap de spin joue un rôle important. Dans une image simple où le gap de spin décroît régulièrement à l'approche de la transition ferromagnétique, on comprend que l'échelle de température du premier maximum tende vers zéro. Ainsi, l'hamiltonien $J_2/J_4 = -1.6$, $J_5/J_4 = 0.3$ et $J_6/J_4 = 0.5$ qui se trouve plus proche de la frontière ferromagnétique que celui Fig. 8.2 et avec un gap de spin plus petit, possède un premier maximum de C_v à plus basse température (Fig. 8.3).

Excitations de basse température

De manière générique, il existe dans les systèmes de spins en deux dimensions un maximum de chaleur spécifique autour de $T \sim J_{C_v}$. Venant des hautes températures, ce maximum signale l'apparition d'ordre à courte portée imposé par les interactions. À cette température, les spins en chaque site ne sont plus indépendants puisqu'en retourner un coûte une énergie $\sim J$ qui devient comparable à la température. Qu'en est-il du maximum de basse température ?

Nous cherchons à identifier les états excités qui sont explorés thermiquement à la température de ce pic de chaleur spécifique. Pour cela, on tronque le spectre à une énergie E_0 et on calcule la chaleur spécifique avec seulement les états d'énergie inférieure E_0 . Le résultat est une courbe qui coïncide avec le $C_v(T)$ complet en dessous d'une température T_0 , et qui tend rapidement vers zéro au delà. La plus petite énergie de coupure E_0 qui permet de reproduire exactement la chaleur spécifique jusqu'au premier maximum indique jusqu'où se trouvent les états qui contribuent à la bosse de basse température. Ce travail, mené pour l'hamiltonien Fig. 8.2, montre que pour toutes les tailles, l'énergie E_0 correspond à l'énergie du fondamental du secteur de spin $S = N/4$. Autrement dit, les excitations responsables de la bosse de basse température sont celles d'énergie inférieure à l'énergie de l'état $uuud$, et donc d'aimantation inférieure à $m = \frac{1}{2}$. Connaissant le rôle joué par cet état dans la physique sous champ magnétique, il ne s'agit probablement pas d'une coïncidence.

Nous proposons un scénario qui permet d'associer une image microscopique au pic de basse température. Il tient compte de l'aimantation $m < \frac{1}{2}$ des états excités mis en jeu ainsi que de notre connaissance des corrélations induites par la compétition entre l'échange J_4 et l'échange ferromagnétique à deux corps. Aux températures inférieures à celle T_0 de la bosse de basse température, les corrélations entre premiers et seconds voisins se développent et les degrés de liberté effectifs ne sont plus des spins libres mais des objets plus grands. Lesquels ?

³La densité d'états $\rho(E)$ des spectres qui exhibent une chaleur spécifique à deux bosse présente en général une légère diminution de $d\rho(E)/dE$ à basse énergie, mais pas de diminution de $\rho(E)$ elle-même.

Nous nous tournons vers les losanges de spins 1 discutés au chapitre 5. Ils constituent un candidat potentiel pour décrire les degrés de liberté aux températures du premier maximum de C_v pour les raisons suivantes :

- Ils décrivent des états d'aimantation inférieure à $m = \frac{1}{2}$.
- Le calcul de projection (§ 5.3) montre qu'ils sont reliés à un sous-espace de basse énergie pour le modèle.
- Ils contiennent une partie des corrélations à courte portée du fondamental, à savoir l'existence de moments locaux. Ces moments locaux résultent d'une compétition entre $J_2 < 0$ et J_4 . Ils n'existent pas à haute température mais ils doivent se former quand on abaisse la température.
- L'entropie du sous-espace des losanges de spin 1 est : $\log(3^{\frac{N}{4}}) = 0.39N \log(2)$, en bon accord avec les calculs de chaleur spécifique.

Si nous identifions les degrés de liberté responsables de la bosse de basse température à ces spins 1 construits sur 4 sites, l'apparition de la bosse de basse température s'inscrit dans un cadre simple. Le système apparaît avec trois échelles d'énergie. La plus haute est fixée par les interactions nues, elle vaut typiquement J_{C_v} et décide de la température à laquelle les corrélations premiers voisins apparaissent, apparition accompagnée de la bosse de haute température. La deuxième échelle est donnée par l'état $uuud$. En dessous de cette température, il n'est plus possible d'exciter thermiquement un losange dans son état ferromagnétique, ceci étant trop défavorable du point de vue de l'échange à 4 corps. Il n'est plus possible non plus d'exciter un losange dans un état $S = 0$ ou dans un autre état $S = 1$ que celui Eq. 5.2 (page 82), ceci à cause du couplage $J_2 < 0$. L'apparition de cet ordre local se manifeste par le pic de basse température. Enfin, à l'échelle du gap de spin, le système s'organise en un état $S = 0$ et la chaleur spécifique suit une loi activée.

Dans cette image extrêmement schématique ⁴, c'est le gap qui sépare l'état $S = 1$ des autres états dans le "spectre effectif" d'un losange qui serait à la fois responsable du pic de basse température et du plateau d'aimantation.

8.2 Transition de phase sous champ magnétique

MOMOI *et al.* [94] montrent par des simulations Monte-Carlo que le modèle $J_2 - J_4$ classique possède sous champ magnétique une transition de phase à température finie associée à l'ordre à longue portée de l'état $uuud$. Leurs résultats à $J_2/J_4 = -2$ mettent en évidence une divergence de la chaleur spécifique à $T_c = 0.47J_4$ pour $\mu B = 5J_4$. Cette température critique correspond à la disparition de l'aimantation des quatre sous-réseaux.

⁴Cette interprétation possède des limites importantes, notamment le fait que le point $J_2/J_4 = -2$ possède un large plateau d'aimantation $uuud$ mais pas de bosse de chaleur spécifique sur aucune des tailles étudiées.

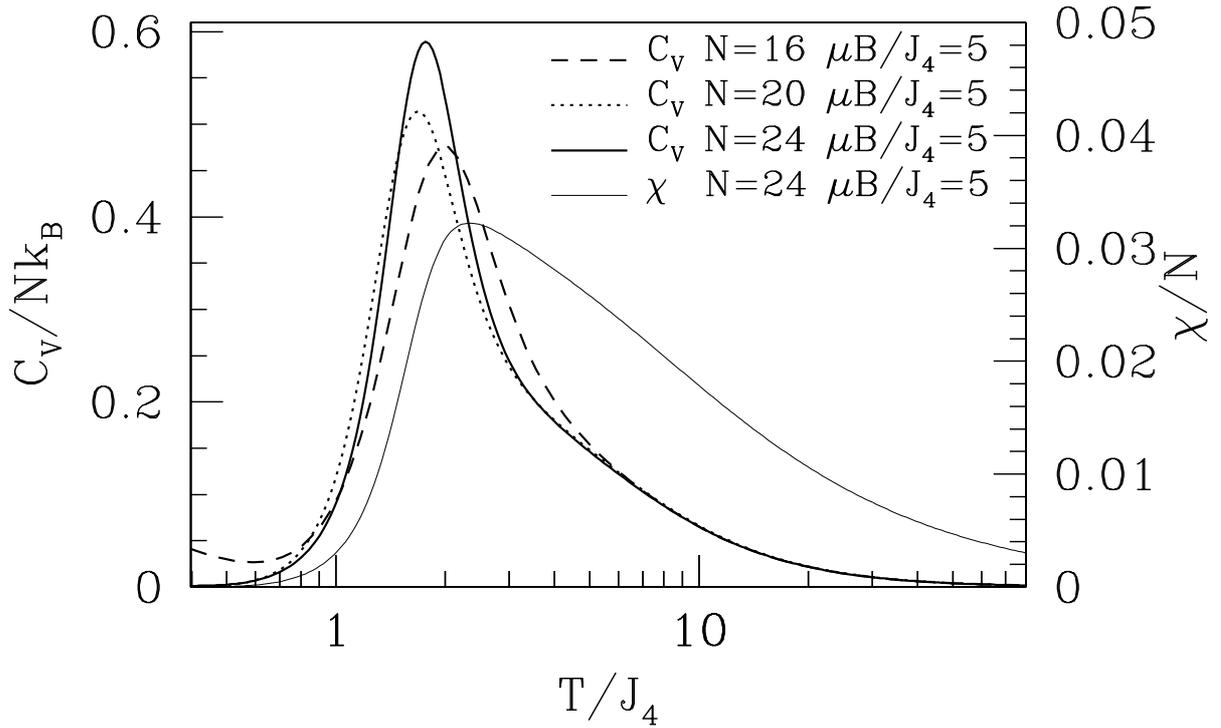


FIG. 8.4: Chaleurs spécifiques sous champ magnétique pour $N = 16, 20$ et 24 à $J_2/J_4 = -2$. La hauteur du pic croît de manière significative avec la taille du système tandis que sa position en température est stable. Il pourrait s'agir d'une transition de phase analogue à celle trouvée par MOMOI *et al.* [94] dans le système classique. Hauteurs des maxima : $\text{Max}(C_v^{N=16}/N)=0.476$, $\text{Max}(C_v^{N=20}/N)=0.514$ et $\text{Max}(C_v^{N=24}/N)=0.589$. Nous attirons l'attention sur le facteur quatre d'écart entre la température critique classique $T_c = 0.47J_4$ trouvée par MOMOI *et al.* [94] et la position du maximum quantique de chaleur spécifique à $T_{\text{max}} \simeq 1.8J_4$.

L'existence de cette transition de phase dans le cas quantique pourrait donner une signature expérimentale spectaculaire de la phase $uuud$ pour un champ expérimentalement accessible de quelques Teslas dans l' ^3He . Nous donnons ici quelques résultats qui suggèrent que cette transition survit aux fluctuations quantiques dans le modèle d'échange multiple.

Nous calculons la chaleur spécifique de trois systèmes $N = 16, 20$ et 24 pour les valeurs des fréquences d'échange étudiées par MOMOI *et al.*. Les résultats Fig. 8.4 font apparaître un pic significativement plus étroit et plus haut qu'en l'absence de champ magnétique (le $C_v(T)$ en champ nul pour cet hamiltonien est donné en annexe Fig. D.2). Pour la plus grande taille $N = 24$, la chaleur spécifique présente un pic $\frac{2}{3}$ plus haut et dont la largeur à mi-hauteur est 2 fois plus faible qu'à champ nul. On constate sur la courbe d'aimantation Fig 7.5 que le champ magnétique $\mu B = 5J_4$ place le système quasiment au milieu du plateau d'aimantation. À ce point, le gap est donc important pour les excitations magnétiques $\Delta S = +1$ comme pour celles de $\Delta S = -1$. En fait, il existe aussi au dessus de l'état $uuud$ un gap important pour les excitations $\Delta S = 0$ [94], comme on peut le voir sur le spectre Fig. 7.8. Ce sont ces gaps qui expliquent que la chaleur spécifique sous champ est exponentiellement décroissante pour des températures aussi grandes que $T \sim J_4$. En effet, un pic de hauteur croissante sur $N = 16, 20$ et 24 sites n'est observé que pour les champs magnétiques à l'intérieur du plateau. Les systèmes sans plateau (non multiples de quatre ou bien avec un hamiltonien différent) n'ont pas, non plus, cette caractéristique. Autre conséquence du plateau et du gap important au dessus de l'état $uuud$, la susceptibilité magnétique (Fig. 8.4) présente un comportement exponentiellement activé en dessous de $T \sim J_4$. Ceci reflète l'absence de fluctuations d'aimantation à basse température : $\chi(T) = \frac{1}{T}(\langle (S_{\text{tot}}^z)^2 \rangle - \langle S_{\text{tot}}^z \rangle^2) \simeq 0$.

Les tailles étudiées par diagonalisation sont extrêmement petites devant celles des simulations Monte-Carlo classiques et l'étude quantitative d'un phénomène critique est probablement hors de la portée de cette méthode. Cependant, la croissance significative et régulière du maximum de $C_v(T)$ avec la taille du système rend tout à fait plausible cette transition de phase dans le cas quantique.

8.3 Fréquences d'échange $^3\text{He}/^4\text{He}/\text{graphite}$

Cette dernière section rassemble les données numériques obtenues pour un hamiltonien d'échange multiple particulier. Contrairement aux autres points du diagramme de phases discutés jusqu'ici, celui-ci n'est pas choisi pour mettre en avant un phénomène particulier où parce que les effets de taille y sont mieux contrôlés. L'hamiltonien étudié ici correspond à un jeu de fréquences d'échanges multiples J_2, J_4, J_5 et J_6 obtenu à partir des mesures du groupe de Grenoble. À ce point particulier, les effets de taille sont importants et les diagonalisations permettent difficilement de prédire la physique pour des températures

inférieures à celles accessibles par les séries haute température. Il n'en reste pas moins que la thermodynamique est caractérisée par une grande entropie de basse température et une aimantation sous champ fortement non linéaire.

8.3.1 Aimantation

Nous reproduisons Fig. 8.5 des données d'aimantation du groupe de Grenoble [13]. Ces mesures sont faites en seconde couche, sous un champ magnétique de 113mT, dans un système $^3\text{He}/^4\text{He}/\text{Graphite}$ ⁵. La couche d' ^3He est solide et commensurée dans un rapport $\rho_2/\rho_1 = 4/7$ avec la première couche d' ^4He . C'est la couverture la plus favorable à l'interprétation des expériences par le modèle d'échange multiple sur le réseau triangulaire, puisqu'il n'y a pas ou très peu de liquide en deuxième et en troisième couche. Ces données ont été analysées par BÄUERLE *et al.* [14] avec le développement haute température de l'hamiltonien d'échange multiple [107]. L'hamiltonien qui en résulte est donné Tab. 1.2 (page 10). Notons au passage que le champ est suffisamment faible pour ne pas modifier la susceptibilité pour $T \gtrsim 2\text{mK}$, puisque l'énergie Zeeman est d'une centaine de micro Kelvin ⁶. Ceci autorise l'ajustement (le "fit") des données par des séries haute température qui ne sont en principe valables qu'à champ nul. L'aimantation obtenue par diagonalisation exacte avec cet hamiltonien, sous le même champ magnétique ⁷, est donnée sur la même figure. L'accord parfait à haute température ($T > 5J_{C_v} = 10\text{mK}$) résulte simplement de la cohérence entre les séries haute température, la détermination des fréquences d'échange et les diagonalisations. Jusqu'à $T = 2J_{C_v}$, il est intéressant de noter que l'accord reste satisfaisant alors que l'on se trouve à la limite de la région de convergence des approximants de Padé. En accord avec l'analyse faite par les auteurs [14], nous trouvons donc que les résultats expérimentaux sont bien décrits par le modèle d'échange multiple au dessus de 2mK.

En dessous de $T \simeq 0.6J_{C_v}$, l'aimantation des systèmes de tailles finie tombe à zéro tandis que celle du film d' ^3He tend vers une valeur finie de M/M_{sat} (de l'ordre de 20% à 30%?). Cette différence est un effet de taille finie. Les courbes d'aimantation à température nulle (Fig. 8.5) indiquent que le fondamental reste de spin nul pour un champ de $B = 113\text{mT}$ sur les tailles étudiées ($N = 16, 20$ et 24). Il est raisonnable d'imaginer, en interpolant par une courbe lisse la structure en escalier de l'aimantation des systèmes finis, que des échantillons plus grands possèdent une aimantation finie pour ce champ B . Nous nous trouvons dans une situation où il n'y a ni plateau d'aimantation ni gap de spin suffisamment grand pour imposer de manière rigide le spin du fondamental, ce qui aurait pu permettre des

⁵Substrat de graphite commercialisé sous le nom de "Papyex" ®.

⁶Ceci est vérifié par le calcul exact à taille finie de $\chi(T)$ en champ nul et sous 113mT.

⁷L'hamiltonien sous champ est : $H = J_2 \sum P_{i,j} + J_4 \sum (P_4 + P_4^{-1}) - J_5 \cdots + J_6 \cdots - \mu B \sum_i S_i^z$ avec $S_i^z = \pm \frac{1}{2}$ et $\mu=1.556\text{mK}/\text{Tesla}$ pour un atome d' ^3He .

N	Gap $E_{S=1} - E_{S=0}$	$E_{S=0}/N$
24	1.19713	-5.07013
20	0.35323	-5.07349
16	2.65915	-5.30128

TAB. 8.1: Gap de spin à taille finie pour l'hamiltonien $J_2 = -2.72\text{mK}$, $J_4 = 1.42\text{mK}$, $J_5 = 0.497\text{mK}$ et $J_6 = 1.92\text{mK}$. $J_{C_v} = 2\text{mK}$. Exceptionnellement pour $N = 16$, le premier niveau $S = 2$ est plus bas que le premier $S = 1$ ($E_{S=2} - E_{S=0} = 1.10733$).

prédictions quantitatives en dessous de $T \sim J_{C_v}$ pour la susceptibilité ou l'aimantation sous champ.

À température nulle, il n'y a pas de plateau d'aimantation à $M/M_{\text{sat}} = \frac{1}{2}$ pour cet hamiltonien particulier. Quant à la rapide croissance de l'aimantation $m(B)$ pour les champs faibles, elle laisse penser que le plateau à $M/M_{\text{sat}} = 0$ (lié à un gap de spin éventuel ⁸) est nul ou très faible pour ce modèle. Il faut garder à l'esprit les importantes barres d'erreurs sur les fréquences d'échange déterminées par les analyses de haute température [109]. Compte-tenu de ces incertitudes sur les J_n , qui atteignent 20% sur J_6/J_4 , et de la grande sensibilité de la courbe d'aimantation, nous pensons que les résultats pour ce jeu d'énergies d'échange laisse ouverte la possibilité d'une phase *uud* dans les films d' ^3He .

8.3.2 $\chi(T)$ et $C_v(T)$

Et ce qui concerne la susceptibilité et la chaleur spécifique, les calculs pour $N = 16, 20$ et 24 (Fig. 8.7 et 8.8) souffrent également d'effets de taille finie importants en dessous de $T \simeq J_{C_v} = 2\text{mK}$. Et ce, à cause des problèmes de longueur de corrélation évoqués au début de ce chapitre. Néanmoins, il semble que les diagonalisations exactes permettent de descendre légèrement plus bas en température qu'avec les approximants de Padé construits ⁹ sur la série haute température à l'ordre $1/T^5$.

Comme pour la totalité des points du diagramme de phases étudiés dans ce travail, la chaleur spécifique révèle qu'une proportion importante de l'entropie se trouve en dessous de $J_{C_v}/2$.

⁸Le gap de spin ne varie pas de manière monotone sur $N = 16, 20$ et 24 (Tab. 8.1), d'autres données seraient nécessaires pour une estimation fiable de la valeur thermodynamique.

⁹Comme dans [107], les approximants de Padé sont calculés après une transformation d'Euler $\beta' = \beta/(1 - \beta)$ de la série. Les chiffres $[D, N]$ entre crochets Fig. 8.7 et 8.8 indiquent les degrés des polynômes au dénominateur et au numérateur.

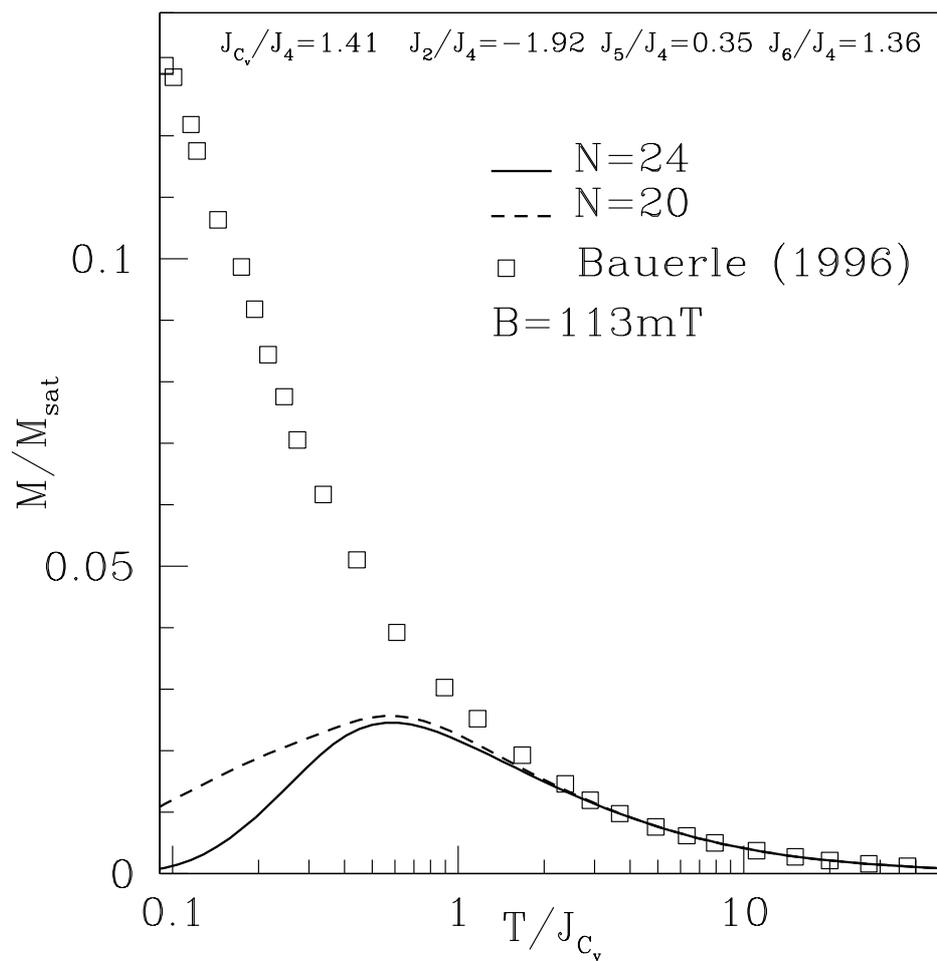


FIG. 8.5: Aimantation en fonction de la température à $B=113\text{mT}$: données expérimentales de BÄUERLE *et al.* [13, 14] pour un système $^3\text{He}/^4\text{He}/\text{graphite}$ et calculs de taille finie avec le hamiltonien $J_2 = -2.72\text{mK}$, $J_4 = 1.42\text{mK}$, $J_5 = 0.497\text{mK}$ et $J_6 = 1.92\text{mK}$. $J_{c_v} = 2\text{mK}$.

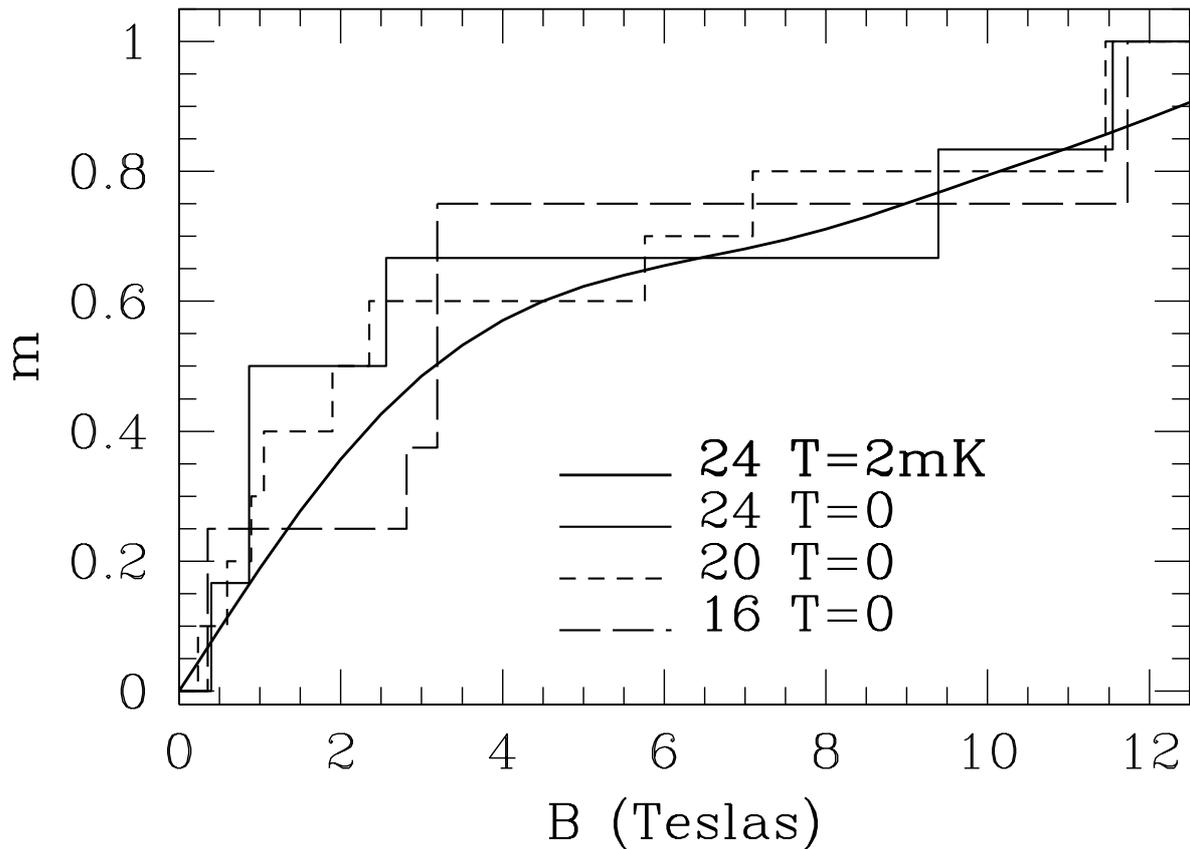


FIG. 8.6: Aimantation à $T = 0$ pour $N = 16, 20$ et 24 . Même hamiltonien que Fig. 8.5. Il n'y a pas d'indication d'un plateau à $m = \frac{1}{2}$ mais on peut se poser la question d'un plateau éventuel au voisinage de $m = \frac{2}{3}$ ou $\frac{3}{4}$ (voir également la courbe d'aimantation Réf. [106]). À $T = J_{C_v} = 2\text{mK}$, l'erreur due à la taille finie sur le résultat $N = 24$ est inférieure à 10%.

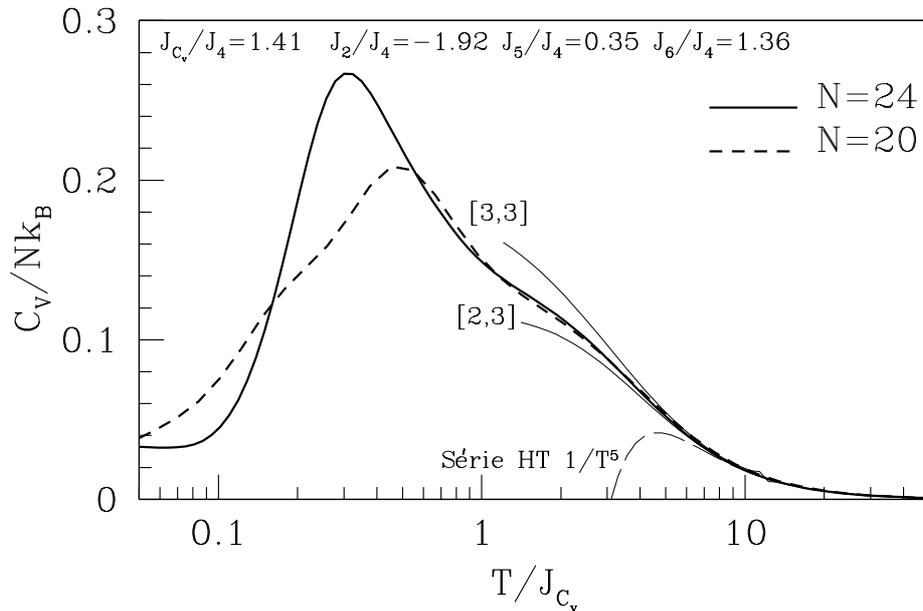


FIG. 8.7: Chaleurs spécifiques pour $N = 20$ et 24 comparées avec la série haute température [107] jusqu'à $1/T^5$ et deux approximants de Padé. Les paramètres d'échange sont ceux obtenus par l'analyse haute température des données $^4\text{He}/^3\text{He}/\text{Graphite}$ du groupe de Grenoble [14]. Hamiltonien : $J_2 = -2.72\text{mK}$, $J_4 = 1.42\text{mK}$, $J_5 = 0.497\text{mK}$ et $J_6 = 1.92\text{mK}$. $J_{C_v} = 2.0\text{mK}$ (mêmes échanges que Fig. 8.5).

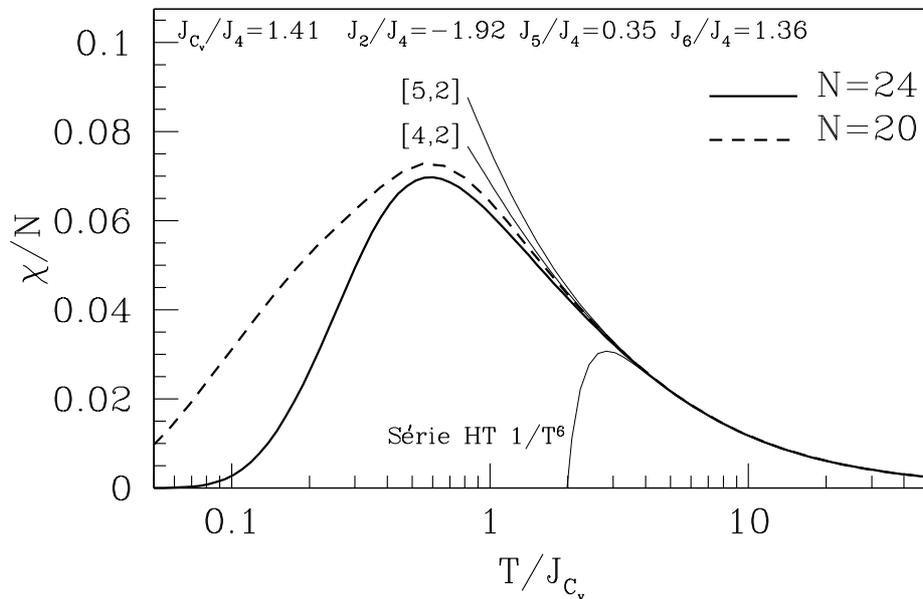


FIG. 8.8: Susceptibilités pour $N = 20$ et 24 comparées avec les série haute température [107] et deux approximants de Padé (mêmes échanges que Fig. 8.5, 8.6 et 8.7).

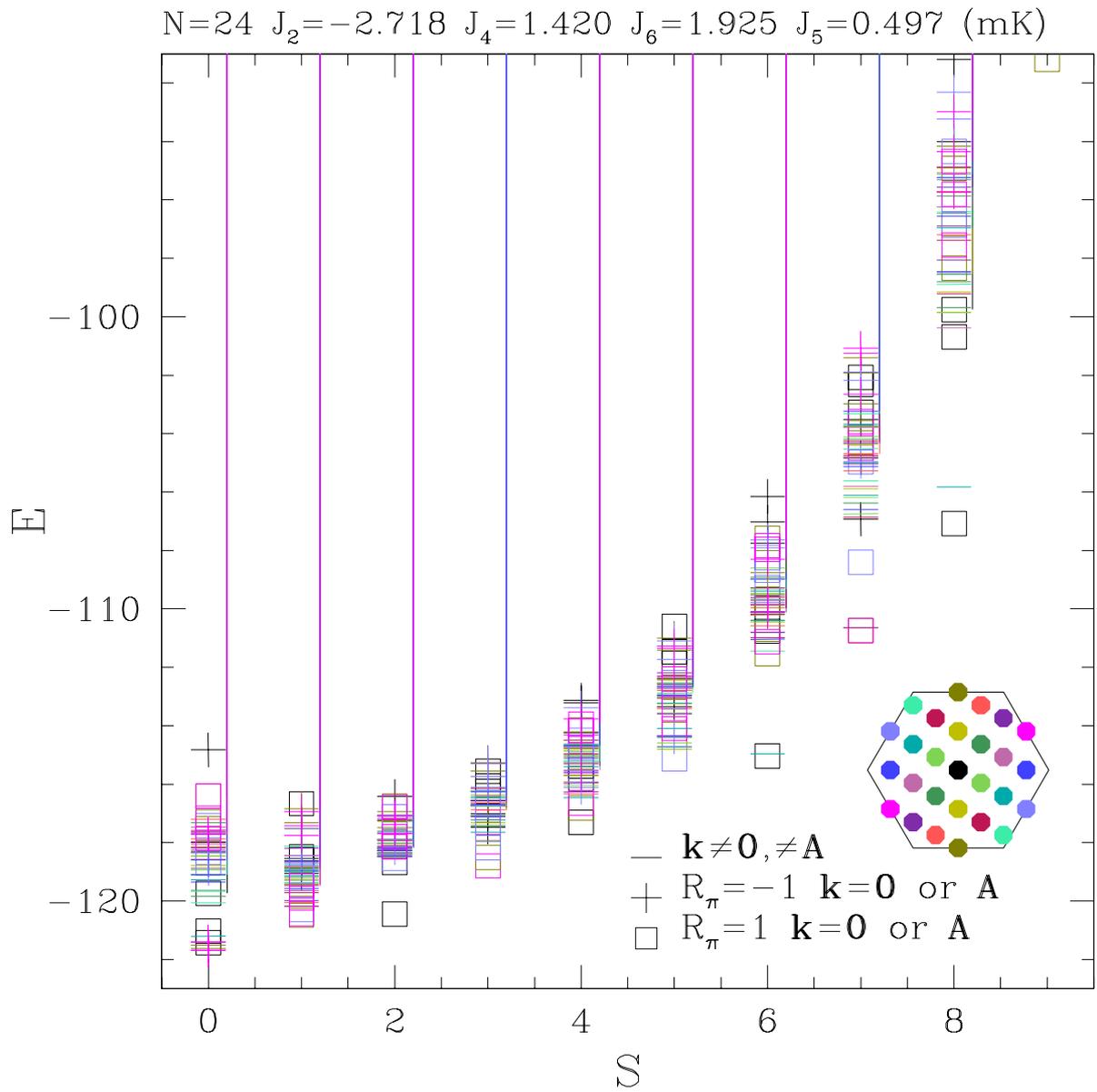


FIG. 8.9: Spectre pour $N = 24$ et $J_2 = -2.72\text{mK}$, $J_4 = 1.42\text{mK}$, $J_5 = 0.497\text{mK}$ et $J_6 = 1.92\text{mK}$. Seuls les trois premiers niveaux de chaque RI sont représentés.

Conclusions

Ce travail jette les bases d'une compréhension du modèle d'échange multiple sur le réseau triangulaire. La pertinence de ce modèle dans la description du magnétisme nucléaire des films d' ^3He solide est reconnue et il existe très probablement d'autres champs d'applications, comme le cristal de Wigner [99] pour des électrons en deux dimensions et même, sur un réseau carré, les cuprates où certaines anomalies dans des spectres de diffusion Raman ont été interprétées comme la signature d'échanges à quatre corps importants [111, 130].

L'hamiltonien d'échange multiple possède un diagramme de phases d'une grande richesse et exhibe une large variété de phénomènes : ordre de Néel et liquide de spins avec gap et plateaux d'aimantation. Dans cette phase liquide, aucune forme d'ordre à longue distance n'a été décelée, et en particulier pas d'ordre de dimères. L'interprétation topologique de la quasi-dégénérescence du fondamental dans le spectre $N = 36$ signifie que ce système possède un fondamental sans brisure de symétrie, et constitue un des tous premiers exemples d'état RVB à courte portée.

Pour des spins $\frac{1}{2}$ en deux dimensions, les modèles avec ce type de fondamental sont rares. Le "Quantum Hard-Core Dimer Model" (QHCDM) de ROKHSAR et KIVELSON [115] est le modèle qui, par son fondamental sans brisure de symétrie, son gap de spin et sa dégénérescence topologique, semble le plus proche de la phase liquide de spins que nous avons trouvée.

Quant aux *résonnons* du modèle QHCDM, s'ils existent dans le problème d'échange multiple, ils doivent posséder un gap puisque nous ne trouvons, dans la région de l'espace des paramètres explorée, aucune indication d'un mode de singulets à basse énergie. Cette présence d'un gap pour les excitations singulet est une propriété importante du modèle d'échange multiple, qui le distingue d'autres phases liquide de spins comme celle qui apparaît dans le modèle d'Heisenberg sur le réseau kagome [140], ou dans les théories RVB avec dimères à longue portée [9, 12].

Que les modèles de liquide de spins sans brisure de symétrie (modèles VBS [4] et QHCDM [115]) contiennent des interactions à plusieurs spins n'est probablement pas une coïncidence. Les interactions d'échange multiple semblent un moyen puissant de détruire l'ordre magnétique et non magnétique, probablement plus efficace que l'introduction de couplages $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ frustrants ou que la géométrie du réseau elle-même.

Dans la mesure où cette phase liquide de spins serait effectivement réalisée dans les films d' ^3He adsorbés, ce qui est tout à fait compatible avec les mesures expérimentales, nous serions en présence d'un système magnétique exemplaire par la simplicité de ses constituants et de ses interactions (atomes d'hélium et interactions de Van der Waals), et par la complexité dans sa physique de basse énergie. Les expériences dans les films d' ^3He sous champ magnétique envisagées notamment par les équipes de GODFRIN à Grenoble et de SAUNDERS à Londres apporteront des données précieuses. À basse température, la donnée $m(B)$ est une information très riche sur le système, en raison de la multiplicité des comportements possibles. Sont en jeu les questions de l'existence de plateaux d'aimantation, de transition(s) métamagnétique(s), d'un gap de spin, et d'une manière générale, d'une meilleure connaissance des fréquences d'échange.

Pour la compréhension de la phase liquide de spins, plusieurs questions restent ouvertes. Elles indiquent quelques prolongements possibles de cette étude.

Le problème des excitations élémentaires, de leur spin et de leur statistique est central. Les quelques données dont nous disposons suggèrent qu'elles possèdent un spin $S = 1$ (comme des spinons confinés), mais les résultats numériques ne disent rien sur leur statistique. Pour rester dans le cadre des diagonalisations exactes, le facteur de structure dynamique $\vec{S}(\mathbf{q}, \omega)$ devrait apporter des éléments d'information sur l'existence de quasi-particules. L'investissement numérique nécessaire à ce type de calculs semble valoir la peine d'être fourni, même si la structure discrète en \mathbf{q} et en ω ne nous dispensera pas d'une analyse soignée et peut-être difficile des effets de taille et de géométrie. Une meilleure compréhension des excitations élémentaires devrait apporter plus de précisions sur la thermodynamique de basse température et peut-être même des critères pour caractériser ce liquide de spins du point de vue expérimental, dans les films d' ^3He ou d'autres systèmes.

La question d'une éventuelle brisure spontanée de l'invariance par renversement du temps n'est pas complètement close. Dans le domaine de paramètres étudié, nous avons avancé deux arguments contre cette hypothèse, à savoir la faiblesse des corrélations chirales et le confinement probable des spinons. Une étude détaillée des spectres pour le modèle J_4 pur, et l'étude d'autres fonctions de corrélations chirales pourraient apporter des éclaircissements sur ce point.

La nature de la transition de la phase liquide de spins vers le ferromagnétisme et la possibilité d'une transition de phase critique est aussi un problème important du point de vue théorique. Les diagonalisations exactes trouvent ici leur limite et ne sont vraisemblablement pas l'outil adapté à un système dans lequel la longueur de corrélation devient très grande. Bosons de Schwinger, limite de grand N capable de traiter les termes à quatre spins, ou la mise en place d'une théorie effective continue de type modèle σ non linéaire, semblent plus prometteurs. En ce qui concerne ces diverses approches, une difficulté à surmonter est de pouvoir extraire les variables capables de décrire l'ordre *local*. Les résultats obtenus avec la méthode des bosons de Schwinger peuvent laisser penser que les champs de

liens triplet et singulet ne sont pas optimaux. Une autre transition est celle qui sépare la phase de Néel à trois sous-réseaux du modèle d'Heisenberg (J_2 pur) et la phase liquide de spins avec échange à quatre corps. La façon dont l'ordre de Néel est détruit par l'échange multiple est une question susceptible d'apporter des informations nouvelles sur la phase désordonnée, mais c'est aussi une question pertinente vis-à-vis des expériences dans les systèmes triangulaires, où J_4 n'est en général pas strictement nul. Dans la mesure où les propriétés spectrales de la phase ordonnée sont bien comprises, ce point peut être abordé par diagonalisations exactes.

Le dernier axe de recherche suggéré par les résultats de ce travail concerne l'effet du dopage sur la phase liquide de spins. Dans le cadre du réseau triangulaire, il peut s'agir du problème des sites vacants dans l' ^3He solide et de savoir comment ils affectent, par leur mouvement de point zéro, les propriétés magnétiques du cristal. On peut aussi s'intéresser au modèle d'échange multiple sur le réseau carré. ROGER et DELRIEU [111] ont étudié le modèle d'échange à quatre corps pur et concluent, en l'absence de dopage, à un ordre antiferromagnétique à deux sous-réseaux. Un diagramme de phases avec échange à deux et quatre corps a été obtenu par CHUBUKOV *et al.* [34]. Se basant sur des calculs d'ondes de spins, des développements en série autour d'états dimérisés et de diagonalisations exactes ($N = 16$), les auteurs prédisent l'existence d'ordres de Néel et de phases spontanément dimérisées (VBC). Notre étude du modèle triangulaire nous amène à questionner ces résultats : on peut aussi imaginer l'existence de phases sans brisure de symétrie pour le réseau carré. Dans le cadre des plans cuivre-oxygène, le problème du dopage prend une dimension toute particulière. Un modèle $t - J$ comprenant de l'échange à quatre corps permettrait d'aborder par diagonalisations exactes le problème du mouvement des trous et de leur appariement dans un liquide de spins créé par l'échange multiple. Nous avons vu que cet environnement est très différent d'un ordre antiferromagnétique conventionnel, et on peut imaginer que cela modifiera profondément la dynamique des porteurs de charge.

Annexe A

Théorie des groupes dans une tour des états

Ce paragraphe présente les notions de théorie des groupes qui prédisent les symétries des états quantiques d'un système ordonné à p sous-réseaux. Les cas $p = 3$ et $p = 4$ sur le réseau triangulaire sont traités dans [18–20, 79, 80]. Le cas du réseau kagome, où cette fois il n'y a pas d'ordre de Néel, a aussi été étudié dans ce cadre [79, 81].

Le groupe de symétrie de l'hamiltonien est le produit direct de deux groupes : $\mathcal{G} = SU(2) \times G$ où G est le groupe des symétries du réseau (translations, rotations etc...). Les états propres de H se classent en fonction de la représentation irréductible de \mathcal{G} à laquelle ils appartiennent. Faisant l'hypothèse que le système s'ordonne à basse température en une structure de type Néel à p sous-réseaux, on cherche à caractériser les niveaux de basse énergie par leurs dégénérescences et leurs symétries. On écrit alors H sous la forme $H = H_0 + H_1$ où H_0 est exactement soluble et favorise les états à p sous-réseaux ferromagnétiques. H_0 est génériquement proportionnel à la somme des facteurs de structure aux points de symétrie de l'ordre envisagé : $\{\mathbf{0}, \mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2\}$ pour l'ordre de Néel à trois sous-réseaux ou bien $\{\mathbf{0}, \mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3\}$ pour 4 sous-réseaux¹. On obtient $H_0 \sim \frac{1}{N} \left[\vec{S}^2 - \sum_{i=1}^p \vec{S}_i^2 \right]$. Les spins des sous-réseaux commutent : $[\vec{S}_i, \vec{S}_j] = 0$. Ils commutent aussi avec le carré du spin total puisque $\vec{S}^2 = \sum_{i=1}^p \vec{S}_i^2 + 2 \sum_{i < j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$. Les opérateurs $\left\{ \vec{S}^2, S^z, \vec{S}_1^2, \dots, \vec{S}_p^2 \right\}$ peuvent être diagonalisés simultanément et les énergies propres de H_0 sont données par le

¹Dans le cas de l'hamiltonien d'Heisenberg sur le réseau triangulaire cette décomposition se fait en écrivant H en transformée de Fourier et en ne gardant dans H_0 que les vecteurs d'onde $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ et $\mathbf{q} = \pm \mathbf{B}$ (coins de zone, voir Fig.1.5) : $H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = 3J \sum_{\mathbf{q}} \gamma_{\mathbf{q}} \vec{S}_{\mathbf{q}} \cdot \vec{S}_{-\mathbf{q}}$ où $\gamma_{\mathbf{q}} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_i)$. On prend alors $H_0 = 3J \sum_{\mathbf{q} \in \{\mathbf{0}, \mathbf{B}, -\mathbf{B}\}} \gamma_{\mathbf{q}} \vec{S}_{\mathbf{q}} \cdot \vec{S}_{-\mathbf{q}}$. H_0 se réécrit dans l'espace direct en terme des spins des trois sous-réseaux : $H_0 = \frac{9J}{N} \left[\vec{S}^2 - \vec{S}_A^2 - \vec{S}_B^2 - \vec{S}_C^2 \right]$. La même décomposition pour un système à quatre sous-réseaux se fait en gardant dans H_0 les vecteurs $\mathbf{0}$ et $\mathbf{A}_{i=1,2,3}$.

spin total S et ceux des p sous-réseaux S_1, \dots, S_p :

$$E_0^{(S, S_1, \dots, S_p)} = \frac{1}{N} \left[S(S+1) - \sum_{i=1}^p S_i(S_i+1) \right] \quad (\text{A.1})$$

La dégénérescence de E_0 est le nombre de représentations \mathcal{D}^S du spin S obtenues par couplage des spins S_1, \dots, S_p . Par exemple, la dégénérescence du fondamental du secteur de spin S est donnée par les règles d'addition des moments cinétiques de p spins $S_i = \frac{N}{2p}$ (les p sous-réseaux sont complètement ferromagnétiques).

Pour valider ou infirmer l'hypothèse d'un ordre à p sous-réseaux on cherche à comparer le spectre de H_0 avec celui, calculé numériquement, de H . Le groupe G_0 des symétries spatiales de H_0 est beaucoup plus grand que celui de H , il contient les permutations des sous-réseaux (σ_p) mais aussi n'importe quelle permutation laissant chaque sous-réseau globalement stable.

On ne s'intéresse qu'aux états de basse énergie pour H_0 , ceux dont chaque sous-réseau a le spin maximum $\forall i \ S_i = \frac{N}{2p}$. Considérons l'espace propre \mathcal{H}_0^S de H_0 correspondant à la valeur propre $E_0(S) = E_0^{(S, \frac{N}{2p}, \dots, \frac{N}{2p})}$. Cet espace est stable par \mathcal{G} , il définit une représentation ρ du groupe d'espace G . Cette représentation se décompose en somme directe sur les RI de \mathcal{G} , où chaque représentation Γ intervient avec la multiplicité n_Γ :

$$\rho = \bigoplus_{\Gamma} \underbrace{(\Gamma \oplus \dots \oplus \Gamma)}_{n_\Gamma} \quad (\text{A.2})$$

La multiplicité n_Γ s'obtient à l'aide du caractère de Γ :

$$n_\Gamma = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi_\Gamma(g) \text{Tr}[g]_{|\mathcal{H}_0^S} \quad (\text{A.3})$$

La trace $\text{Tr}[g]_{|\mathcal{H}_0^S}$ se calcule dans les espaces propres de S^z pour les valeurs propres $S^z = S$ et $S^z = S+1$:

$$\text{Tr}[g]_{|\mathcal{H}_0^S} = \text{Tr}[g]_{|\mathcal{H}_0^{S^z=S}} - \text{Tr}[g]_{|\mathcal{H}_0^{S^z=S+1}} \quad (\text{A.4})$$

Puisque les sous-réseaux sont de spin maximum, l'espace $\mathcal{H}_0^{S^z}$ est invariant sous toute permutation des spins à l'intérieur d'un sous-réseau (l'état ferromagnétique est totalement symétrique). Donc l'action de l'élément g sur l'espace $\mathcal{H}_0^{S^z}$ est équivalente à une permutation $g' \in \sigma_p$ des sous-réseaux. En effet, g est une opération de symétrie pour l'hamiltonien initial H , il laisse aussi H_0 inchangé. Donc g laisse les sous-réseaux *globalement* invariants et on peut lui associer une permutation $\in \sigma_p$. Considérons par exemple le cas $p = 3$ sur le

réseau triangulaire et l'élément $g = T_{\mathbf{e}_1}$, translation d'un pas dans la direction \mathbf{e}_1 . Cette opération échange les 3 sous-réseaux A, B et $C : A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow A$. La permutation associée à g est $g' = (A, B, C)$.

La trace $Tr[g]_{|\mathcal{H}_0^{S^z}}$ est donc le nombre de configurations de spin de $\mathcal{H}_0^{S^z}$ invariantes par g' . Une telle configuration n'est invariante par g' qu'à condition que les sous-réseaux échangés aient la même valeur de S_i^z . On décompose donc g' en un produit de cycles disjoints de longueurs n_1, n_2, \dots, n_k (avec $\sum_{i=1}^k n_i = p$). La trace cherchée est le nombre de k -uplets S_1^z, \dots, S_k^z vérifiant $\sum_{i=1}^k n_i S_i^z = S^z$ et où S_i^z est l'aimantation de chacun des n_i sous-réseaux du cycle i . Autrement dit, nous devons compter le nombre de façons dont on peut associer un spin S_i^z à chaque sous-réseau en satisfaisant :

- n_1 sous-réseaux ont le spin S_1^z
- n_2 sous-réseaux ont le spin S_2^z
- \vdots
- n_k sous-réseaux ont le spin S_k^z
- la composante z du spin $\sum_{i=1}^k S_i^z$ est fixée à S^z

Une façon de résoudre ce problème combinatoire est d'utiliser le polynôme P_g :

$$P_g(X) = \prod_{i=1}^k \left(\sum_{S_i^z = -\frac{N}{2p}}^{\frac{N}{2p}} (X^{S_i^z})^{n_i} \right) \quad (\text{A.5})$$

Chaque facteur du produit représente un cycle de sous-réseaux. Chaque terme de la somme représente une valeur possible pour le spin (commun) des sous-réseaux du cycle correspondant. Reprenons l'exemple introduit plus haut où $g = T_{\mathbf{e}_1}$ est une translation et où il y a $p = 3$ sous-réseaux. $g' = (A, B, C)$ n'a qu'un cycle unique ($k = 1$) de longueur $n_1 = 3$. On obtient $P(X) = X^{-N/2} + X^{-N/2+3} + \dots + X^{N/2-3} + X^{N/2}$.

La trace $\mathcal{H}_0^{S^z}$ est finalement obtenue comme le coefficient de degré S^z de P_g . La multiplicité de Γ dans la tour d'état est donc :

$$n_\Gamma = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi_\Gamma(g) [\text{coeff}_S(P_g) - \text{coeff}_{S+1}(P_g)] \quad (\text{A.6})$$

En résumé, **pour le spin S , la tour d'état est constituée d'états quasi dégénérés à l'énergie $E \simeq E_0(S)$. Parmi ces états, la RI Γ apparaît avec la multiplicité n_Γ .** En l'absence de H_1 ces multiplets sont exactement dégénérés. Nous avons ramené le problème du calcul de n_Γ à un problème de théorie des groupes : 1) la détermination des RI de G et de sa table de caractères χ . 2) associer à chaque opération de symétrie g la permutation des sous-réseaux qu'elle entraîne et la décomposer en cycles disjoints.

Annexe B

Hamiltoniens de Klein : fondamentaux exacts

Cette section présente un système pour lequel des pavages de dimères sont des fondamentaux exacts. Il s'agit d'une application de la méthode décrite par KLEIN [73]. L'idée est la suivante : l'opérateur qui projette n spins dans leur sous-espace de spin maximum $S = n/2$ est une somme sur les $n!$ permutations des sites :

$$\Pi_n = \frac{1}{n!} \sum_{p \in \sigma_n} p \quad (\text{B.1})$$

Si la connectivité du réseau est z on peut choisir un hamiltonien H comme étant la somme de tous les Π_{z+1} correspondant à tous les $(z+1)$ -uplets de spins constitués d'un site et de ses z voisins i_1, \dots, i_z :

$$H = \sum_i \Pi_{z+1}^{\{i, i_1, \dots, i_z\}} \quad (\text{B.2})$$

H est une somme de projecteurs et ses valeurs propres sont ≥ 0 . Un état vérifiant $H|\psi\rangle = 0$ est donc fondamental. On constate en particulier que tous les pavages de dimères sont fondamentaux. Dans le cas du réseau triangulaire, H contiendrait des échanges jusqu'à 7 corps et couplerait des sites jusqu'à la distance 2. Par contre, sur un réseau triangulaire déplété d'un site sur sept (Fig. B), on peut se contenter de sommer sur les losanges.

Tous les sites restent équivalents sur ce réseau déplété et l'hamiltonien peut s'exprimer comme un hamiltonien d'échange multiple contenant des termes à deux corps $P_{i,j}$ à distances 1 ($J_2 = 5$) et $\sqrt{3}$ ($J_2^{\text{nn}} = 1$), de l'échange à quatre corps sur chaque losange ($J_4 = 1$ pour $P_{1,2,3,4} + \text{h.c.}$ et $J'_4 = 2$ pour le terme $P_{1,3}P_{2,4}$ sur le même losange). Il s'écrit donc :

$$H = 5 \sum_{\text{---}} P_{1,2} + \sum_{\text{---}} P_{1,2} + \sum_{\text{---}} (P_{1\dots 4} + P^{-1}) + 2 \sum_{\text{---}} (P_{1,3}P_{2,4}) \quad (\text{B.3})$$

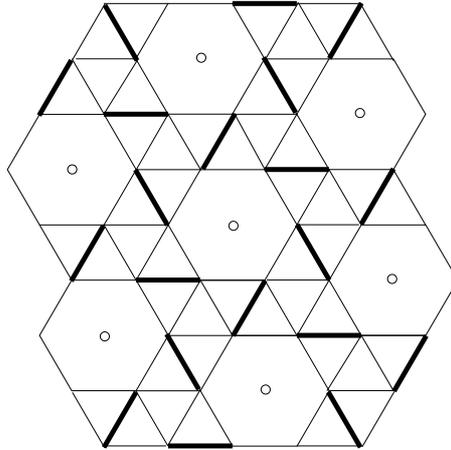



FIG. B.1: Réseau triangulaire avec un site sur sept manquant. L'état où les liens épais sont des singulets est un fondamental d'énergie nul pour l'hamiltonien de KLEIN B.3 : aucun losange ne peut être de spin 2 puisqu'il contient un singulet, il annule donc le projecteur correspondant.

En fait, cet état est aussi un état propre (mais pas le fondamental) pour l'hamiltonien d'Heisenberg antiferromagnétique (couplage premier voisin). Cette fonction d'onde s'apparente à un état de *dimères orthogonaux* (pour exemple en dimension un, voir SHASTRY et SUTHERLAND [122]). Une réalisation expérimentale en dimension deux est étudiée Réf. [68]), c'est-à-dire où les *liens* partagent le réseau en triangles qui contiennent tous un dimère sur un de leurs côtés. Un triangle à 6 spins contient 9 liens, son hamiltonien est la somme des hamiltoniens de 3 triangles à 3 spins, qui sont tous minimisés par l'état Fig. B. Cependant, l'énergie n'est pas minimale puisque les liens dimérisés sont communs à deux triangles de 6 sites. Cette fonction d'onde reste néanmoins un état propre puisqu'elle est diagonale pour les termes $P_{i,j}$ des liens comptés deux fois. Pour le modèle d'Heisenberg où l'échange est double ($J' = 2J$) sur les liens dimérisés, l'état Fig. B est donc le fondamental exact.

Annexe C

Dégénérescence topologique sur un tore

Nous rassemblons ici des arguments avancés par plusieurs auteurs [101, 115, 132] qui indiquent qu'un système de spins $\frac{1}{2}$ bidimensionnel où *toutes* les fonctions de corrélation décroissent rapidement avec la distance possède à la limite thermodynamique un fondamental quatre fois dégénéré si on lui applique des conditions périodiques dans les deux directions. Ces arguments fonctionnent pour n'importe quel réseau mais exigent que l'état fondamental $|\psi\rangle$ satisfasse une condition très forte : le poids des boucles dans l'écriture diagrammatique de $\langle\psi|\psi\rangle$ doit décroître rapidement avec la longueur de la boucle. Cette condition sera explicitée un peu plus loin mais signalons qu'elle implique une décroissance de toutes les fonctions de corrélation $\langle\psi|P_{i_1, i_2, i_3, \dots, i_k}|\psi\rangle$ quand les points $i_1, i_2, i_3, \dots, i_k$ s'éloignent deux à deux.

C.1 Pavages de dimères

On considère un réseau avec un nombre N pair de sites. Le sous-espace \mathcal{H}_0 des états de spin total $S = 0$ est engendré par les fonctions d'onde $|C\rangle$ qui sont des pavages de dimères. Dans une telle fonction d'onde, les sites sont appariés deux à deux en $N/2$ singulets. Choisissons de noter $C_1(\alpha)$ et $C_2(\alpha)$ les extrémités du dimère α dans le pavage C .

$$|C\rangle = \bigotimes_{\alpha=1}^{N/2} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_{C_1(\alpha)}\downarrow_{C_2(\alpha)}\rangle - |\downarrow_{C_2(\alpha)}\uparrow_{C_1(\alpha)}\rangle) \quad (\text{C.1})$$

Les dimères possèdent une orientation et il faut fixer chaque extrémité $C_1(\alpha)$ et $C_2(\alpha)$ sans ambiguïté pour que le signe de l'état $|C\rangle$ soit également fixé. On peut par exemple adopter la convention suivante :

- On oriente le tore en définissant une direction “plus” sur l’axe x et une direction “plus” sur l’axe y .
- Étant donnés deux sites i et j , on prend le plus court chemin sur le tore reliant i à j ¹.
- On choisit l’orientation du dimère (i, j) comme allant du “plus” (extrémité “1”) vers le “moins” (extrémité “2”) sur l’axe x en suivant le plus court chemin. (Si $x_i = x_j$ on prend l’axe y).

Cette convention de signe est invariante par translation : le translaté d’un pavage de dimères ainsi orienté satisfait également la convention. Enfin, rappelons que la famille d’états $\{C\}$ est une famille génératrice de \mathcal{H}_0 mais qu’elle est liée et ne constitue donc en aucun cas une base. Cependant le produit scalaire de deux pavages de dimères se calcule graphiquement de manière simple.

C.2 Produit scalaire $\langle C|C'\rangle$: diagrammes de boucles

Pour deux pavages de dimères C et C' donnés, SUTHERLAND [132] propose la manière suivante de calculer $\langle C|C'\rangle$:

- On trace sur le réseau les $N/2$ dimères de C : $[C_1(\alpha), C_2(\alpha)]_{\alpha=1\dots N/2}$ ainsi que les $N/2$ dimères de C' : $[C'_1(\alpha), C'_2(\alpha)]_{\alpha=1\dots N/2}$
- Dans le diagramme obtenu, chaque site appartient à un dimère de C et à un dimère de C' . Le réseau est donc recouvert de manière compacte par un ensemble de boucles fermées. On compte le nombre de boucles $n(C \cup C')$. Remarquons que la plus petite boucle possible contient deux sites i et j et deux dimères graphiquement confondus : de i à j et de j à i .
- On oriente chaque lien de $C \cup C'$ par une flèche dirigée vers l’extrémité “1” (C’est à dire vers le site qui a le plus petit indice d’après la convention proposée plus haut). On définit $x(C, C') = 1$ si le nombre de liens à retourner pour que tous les sites aient deux flèches sortantes ou deux flèches rentrantes est pair. S’il faut en retourner un nombre impair on pose $x(C, C') = -1$.² Il s’agit d’une méthode graphique pour calculer le signe de $\langle C|C'\rangle$, et x vaut $x(C, C') = \text{signe}(\langle C|C'\rangle)$.

¹Cette convention fixe le signe de n’importe quel pavage de dimère, quel que soit le réseau à condition que les dimères aient des longueurs plus petites que la moitié de la taille du tore, sinon il y a ambiguïté dans la définition du chemin le plus court de i à j . Cette hypothèse semble peu restrictive puisque des configurations avec des dimères de la taille du système engendreraient vraisemblablement de longues boucles faisant le tour complet du système.

²Il existe sur le réseau carré une convention de signe qui permet d’assurer que $x(C, C') = 1$ si C et C' sont des pavages de dimères de longueur 1. Ceci permet à SUTHERLAND [132] de faire le lien entre un produit scalaire de fonctions d’onde RVB et la fonction de partition d’un gaz de boucles.

On a alors le résultat :

$$\langle C|C'\rangle = 2^{n(C\cup C')-N/2}x(C\cup C') \quad (\text{C.2})$$

C.3 Hypothèse de décroissance du poids des grandes boucles

Une fonction d'onde singulet peut s'écrire sur la famille des états dimères :

$$|\psi\rangle = 2^{N/4} \sum_C \psi(C)|C\rangle \quad (\text{C.3})$$

On suppose avoir extrait de la famille liée des C une base (non orthogonale). Pour la suite cette base sera choisie *invariante par translation*, c'est à dire que si un pavage C est dans la base, ses translatés le sont aussi. Pour un hamiltonien invariant par translation l'impulsion \mathbf{k} est un nombre quantique et on trouve à partir de l'équation (C.3) : $\psi(C) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\psi(T_{\mathbf{x}}(C))$.

L'écriture n'est pas unique mais elle permet de calculer graphiquement la norme de $|\psi\rangle$:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{C,C'} \left[\psi(C)^\dagger \psi(C') 2^{n(C\cup C')} x(C,C') \right] \quad (\text{C.4})$$

Aux deux pavages C et C' , on associe une décomposition du réseau en boucles $C\cup C'$. Notons cet ensemble de boucles $\mathcal{G} = C\cup C'$. Il est simple de vérifier que $x(C,C')$ ne dépend pas de C et C' séparément mais seulement de $C\cup C'$: $x(C,C') = x(\mathcal{G})$. Pour $n(C\cup C')$ cette propriété est évidente : le nombre de boucles n'est pas une propriété de (C,C') mais bien de leur réunion graphique \mathcal{G} . Plutôt que de sommer sur les pavages C et C' on réécrit donc l'équation (C.4) comme une somme sur les ensembles de boucles \mathcal{G} :

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{\mathcal{G}} 2^{n(\mathcal{G})} x(\mathcal{G}) \left[\sum_{C,C'/C\cup C'=\mathcal{G}} \psi(C)^\dagger \psi(C') \right] \quad (\text{C.5})$$

C'est à dire :

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{\mathcal{G}} 2^{n(\mathcal{G})} x(\mathcal{G}) \Gamma(\mathcal{G}) \quad (\text{C.6})$$

où on a posé :

$$\Gamma(\mathcal{G}) = \sum_{C,C'/C\cup C'=\mathcal{G}} \psi(C)^\dagger \psi(C') \quad (\text{C.7})$$

L'hypothèse que l'on fait sur $|\psi\rangle$ est la suivante : **(A)** *Il existe une base de pavages de dimères (Eq. (C.3)) telle que $|\Psi(\mathcal{G})|$ soit nul si une boucle de \mathcal{G} fait un tour ou plus autour du tore (i.e $\Psi(\mathcal{G}) = 0$ si \mathcal{G} contient une boucle qui n'est pas homotopiquement triviale).*

C.4 Composante “paire” et composante “impaire”

Fixons un chemin fermé Δ sur le tore qui fasse un tour dans l’une ou l’autre direction. La coupure Δ est choisie pour traverser des liens mais ne passer par aucun site. Pour chaque pavage C , notons $\Delta(C)$ le nombre de dimères qui traversent Δ ³. On peut décomposer $|\psi\rangle$ en la somme de deux vecteurs : l’un, $|\psi_{\Delta,+}\rangle$, ne contenant que les pavages C où $\Delta(C)$ est pair et l’autre, $|\psi_{\Delta,-}\rangle$, ceux C' où $\Delta(C')$ est impair. Formellement :

$$|\psi\rangle = |\psi_{\Delta,+}\rangle + |\psi_{\Delta,-}\rangle \quad (\text{C.8})$$

où :

$$|\psi_{\Delta,+}\rangle = \left(\frac{1}{2}\right)^{-N/4} \sum_{C/\Delta(C) \text{ pair}} \psi(C)|C\rangle \quad (\text{C.9})$$

$$|\psi_{\Delta,-}\rangle = \left(\frac{1}{2}\right)^{-N/4} \sum_{C'/\Delta(C') \text{ impair}} \psi(C)|C\rangle \quad (\text{C.10})$$

Considérons un système possédant un nombre impair de sites dans la direction Δ et une configuration C de parité $\Delta(C)$. On translate C de un site “perpendiculairement” à Δ par le vecteur \mathbf{e}_1 . On peut vérifier que cette nouvelle configuration possède la parité $\Delta(T_{\mathbf{e}_1}(C)) = -\Delta(C)$. Or l’invariance par translation de $|\psi\rangle$ implique que si $\psi(C) \neq 0$ alors $\psi(C')$ est également non nul sur les configurations C' translattées. On vient de voir que certaines d’entre elles ont la parité opposée, on en déduit que $|\psi_{\Delta,+}\rangle \neq 0$ et $|\psi_{\Delta,-}\rangle \neq 0$.

C.5 Orthogonalité des composantes paires et impaires

On va montrer que $\langle \psi_{\Delta,+} | \psi_{\Delta,-} \rangle = 0$. En effet :

$$\langle \psi_{\Delta,+} | \psi_{\Delta,-} \rangle = \sum_{\mathcal{G}} 2^{n(\mathcal{G})} x(\mathcal{G}) \left[\sum_{\substack{C, C' \\ \left\{ \begin{array}{l} C \cup C' = \mathcal{G} \\ C \text{ pair}, C' \text{ impair} \end{array} \right.}} \psi(C)^\dagger \psi(C') \right] \quad (\text{C.11})$$

On utilise alors la propriété suivante : *Soit \mathcal{G} un recouvrement du réseau par des boucles. \mathcal{G} est topologiquement trivial (i.e. toutes ses boucles sont homotopiquement triviales) si et seulement si les couples de pavages de dimères C et C' vérifiant $\mathcal{G} = C \cup C'$ sont de même*

³Les croisements s’obtiennent en traçant le chemin *continu* le plus court sur le tore qui relie les deux extrémités du dimère. Il n’y a pas d’ambiguïté tant que les dimères sont plus courts que la moitié de la taille du système, puisque ce plus court chemin est alors unique.

parité (par rapport à Δ). On en déduit que la somme sur \mathcal{G} dans l'équation (C.11) ne contient que des termes où \mathcal{G} n'est pas topologiquement trivial. Donc, grâce à l'hypothèse (A) :

$$\langle \psi_{\Delta,+} | \psi_{\Delta,-} \rangle = \sum_{\mathcal{G} \text{ non triv.}} 2^{n(\mathcal{G})} x(\mathcal{G}) \Psi(\mathcal{G}) \quad (\text{C.12})$$

$$= 0 \quad (\text{C.13})$$

On définit un nouvel état : $|\psi_{\Delta}\rangle = |\psi_{\Delta,+}\rangle - |\psi_{\Delta,-}\rangle$. Cet état a la même norme que $|\psi\rangle$, il est obtenu à partir de l'écriture ⁴ de $|\psi\rangle$ en changeant le signe des configurations dimères qui traversent un nombre impair de fois Δ :

$$|\psi_{\Delta}\rangle = \sum_C \psi(C) (-1)^{\Delta(c)} |C\rangle \quad (\text{C.14})$$

C.6 Impulsion

Une translation d'un site perpendiculairement à Δ ($C \rightarrow T_{\mathbf{e}_1} C$) change le signe de $\Delta(C)$. Partant d'une fonction d'onde $|\psi\rangle$ d'impulsion \mathbf{k} on peut calculer l'action d'une translation $T_{\mathbf{x}}$ sur $|\psi_{\Delta}\rangle$:

$$T_{\mathbf{x}} |\psi_{\Delta}\rangle = \sum_C \psi(C) (-1)^{\Delta(C)} |T_{\mathbf{x}} C\rangle \quad (\text{C.15})$$

$$= \sum_{C'=T_{\mathbf{x}}C} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi(C') (-1)^{\Delta(T_{\mathbf{x}}C')} |C'\rangle \quad (\text{C.16})$$

$$= e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}_{\Delta})\cdot\mathbf{x}} |\psi_{\Delta}\rangle \quad (\text{C.17})$$

$$(\text{C.18})$$

où le vecteur d'onde \mathbf{k}_{Δ} est un vecteur de milieu de bord de zone de Brillouin ⁵ et orthogonal à Δ , de sorte que pour tout vecteur \mathbf{x} du réseau et toute configuration C :

$$(-1)^{\Delta(T_{\mathbf{x}}C)} = e^{i\mathbf{k}_{\Delta}\cdot\mathbf{x}} (-1)^{\Delta(C)} \quad (\text{C.19})$$

Changer le signe des dimères traversant Δ a donc modifié la composante transversale à Δ de l'impulsion.

⁴L'état ainsi obtenu dépend a priori de la façon dont on choisit d'écrire $|\psi\rangle$ à partir de la famille liée des pavages C . Autrement dit, cette opération dépend d'un choix de base et n'est pas une opération intrinsèque qui correspondrait à l'action d'un opérateur sur $|\psi\rangle$.

⁵c'est à dire $\forall \mathbf{x} e^{i\mathbf{k}_{\Delta}\cdot\mathbf{x}} = \pm 1$. Pour un réseau de Bravais en dimension d ces vecteurs d'onde sont au nombre de $2^d - 1$ puisque choisir un tel vecteur revient à choisir une phase ± 1 pour chacun des d générateurs du réseau. À l'exception du choix $+1$ pour tous les générateurs, qui correspond à un état uniforme $\mathbf{k} = 0$.

C.7 Action d'une permutation cyclique sur les boucles

On va maintenant montrer que $|\psi_\Delta\rangle$ et $|\psi\rangle$ ont les mêmes fonctions de corrélation à courte portée, et donc la même énergie (Les interactions de l'hamiltonien sont supposées être de courte portée). Comparons $\langle\psi|P|\psi\rangle$ et $\langle\psi_\Delta|P|\psi_\Delta\rangle$. P est une permutation agissant sur un ensemble de sites du réseau. La situation la plus simple est $P = P_{i,j}$. P transforme un pavage de dimères en un autre pavage de dimères ⁶.

$$\langle\psi|P|\psi\rangle = \sum_{C,C'} \left[\psi(C)^\dagger \psi(C') 2^{n(C \cup P(C'))} x(C \cup P(C')) \right] \quad (\text{C.20})$$

$$= \sum_{\mathcal{G}} 2^{n(P(\mathcal{G}))} \left[\sum_{C,C'/C \cup C' = \mathcal{G}} x(C \cup P(C')) \psi(C)^\dagger \psi(C') \right] \quad (\text{C.21})$$

Dans la deuxième égalité nous avons utilisé : $n(C \cup P(C')) = n(P(\mathcal{G}))$. En effet, le nombre de boucles obtenues en superposant C avec $P(C')$ ne dépend que de \mathcal{G} et P , et non de la décomposition particulière $C \cup C'$ choisie. Il en est de même pour $x(C \cup C')$: deux décompositions $\{C, C'\}$ et $\{C'', C'''\}$ de \mathcal{G} vérifient $x(C \cup P(C')) = x(C'' \cup P(C'''))$ ⁷. Il est donc légitime d'écrire $x(C \cup P(C')) = x(P(\mathcal{G}))$ et on obtient :

$$\begin{aligned} \langle\psi|P|\psi\rangle &= \sum_{\mathcal{G}} 2^{n(P(\mathcal{G}))} x(P(\mathcal{G})) \left[\sum_{C,C'/C \cup C' = \mathcal{G}} \psi(C)^\dagger \psi(C') \right] \\ &= \sum_{\mathcal{G}} 2^{n(P(\mathcal{G}))} x(P(\mathcal{G})) \Psi(\mathcal{G}) \end{aligned} \quad (\text{C.22})$$

C.8 Conclusion

Le calcul de $\langle\psi|P|\psi\rangle$ au paragraphe précédent peut être mené identiquement avec l'état modifié $|\psi_\Delta\rangle$. On obtient :

$$\langle\psi_\Delta|P|\psi_\Delta\rangle = \sum_{\mathcal{G}} 2^{n(P(\mathcal{G}))} x(P(\mathcal{G})) \Psi_\Delta(\mathcal{G}) \quad (\text{C.23})$$

⁶Le nouveau pavage ainsi obtenu ne satisfait pas forcément la convention de signe fixée au début qui oriente les dimères.

⁷Puisque $x(C, C') = \text{signe}(\langle C|C'\rangle)$, cette propriété est évidente dans le cas des décompositions (C, C') et (C', C) . Dans ce cas simple, elle revient à dire $\langle C|P|C'\rangle = \langle C'|P|C\rangle$, ce qui est vrai puisque les états pavages de dimères C et C' sont réels. Une démonstration formelle dans le cas général n'a pas encore été écrite.

avec :

$$\Psi_{\Delta}(\mathcal{G}) = \sum_{C, C' / C \cup C' = \mathcal{G}} \psi(C)^{\dagger} \psi(C') (-1)^{\Delta(C) + \Delta(C')} \quad (\text{C.24})$$

Or $\Psi_{\Delta}(\mathcal{G}) = \Psi(\mathcal{G})$ lorsque \mathcal{G} est topologiquement trivial et $\Psi_{\Delta}(\mathcal{G}) = -\Psi(\mathcal{G})$ sinon (cf. l'argument utilisé pour montrer l'orthogonalité des composantes paires et impaires). Puisque par hypothèse $\Psi(\mathcal{G}) = 0$ sur ces boucles non triviales on aboutit à :

$$\langle \psi_{\Delta} | P | \psi_{\Delta} \rangle = \langle \psi | P | \psi \rangle \quad (\text{C.25})$$

Ceci établit que $|\psi_{\Delta}\rangle$ ont la même énergie (en prenant pour P les différent termes de l'hamiltonien). Puisqu'ils n'ont pas la même impulsion ils sont orthogonaux et le niveau d'énergie est au moins deux fois dégénéré.

Étant sur un tore, il existe une deuxième direction pour placer une coupure Δ' topologiquement distincte de Δ . Cet argument permet de comprendre la dégénérescence 4 comme le produit de deux dégénérescences 2 pour Δ et Δ' ⁸. Cependant, il n'est plus possible d'employer exactement la même construction que précédemment puisqu'il faudrait disposer d'un nombre impair de sites dans la direction Δ' . Or nous avons déjà supposé avoir un nombre impair de sites dans la direction Δ et cela impliquerait un nombre impair de sites au total... Nous proposons l'argument (non rigoureux) suivant pour contourner cette difficulté.

Nous avons établi qu'un système sur un tore qui possède un état singulet $|\psi, \mathbf{k} = 0\rangle$ avec des "petites" boucles est dégénéré avec un état $|\psi, \mathbf{k}_{\Delta}\rangle$ où \mathbf{k}_{Δ} est un vecteur d'onde milieu de bord de zone de Brillouin. Il est naturel d'admettre que, au moins pour des systèmes assez grands, cette propriété est vraie quel que soit la parité de la dimension du système dans la direction perpendiculaire à \mathbf{k}_{Δ} . Rien n'empêche alors de considérer un système pair dans les deux directions. De tels réseaux ont trois vecteurs en milieu de bord de zone qui sont équivalents. On sait donc, par symétrie, que les niveaux d'impulsion en milieu de bord de zone sont dégénérés trois fois. Ceci achève la démonstration d'une dégénérescence (au moins) égale à quatre : un état d'impulsion $\mathbf{k}_0 = 0$ et trois autres d'impulsions \mathbf{k}_{Δ} , $\mathbf{k}_{\Delta'}$ et $\mathbf{k}_{\Delta''}$.

⁸Dans le cas d'un système de dimension supérieure d , les lignes de coupures devront être remplacées par des hypersphères (dimension $d - 1$). Le nombre d'hypersphères topologiquement inéquivalentes est, le nombre de générateurs du $(d - 1)^{\text{eme}}$ groupe d'homotopie de la variété. Les arguments avancés jusqu'à présent ne sont pas spécifiques à la dimension deux ni au tore et on peut imaginer la conjecture suivante : une fonction d'onde dont les boucles sont toutes homotopes au chemin trivial possède une dégénérescence (au moins) égale à 2 à la puissance le nombre de générateurs du $d - 1^{\text{eme}}$ groupe d'homotopie Π_{d-1} de la variété. Avec des conditions périodiques dans les d directions (un "hyper-tore" ?) on trouverait par exemple une dégénérescence 2^d .

Annexe D

Méthode des traces pour la thermodynamique

D.1 Idée générale

Dans le cas du modèle d'Heisenberg $S = \frac{1}{2}$ sur le réseau triangulaire, le développement de la susceptibilité $\chi(T)$ est connu jusqu'au terme en $1/T^{14}$ et celui de la chaleur spécifique jusqu'à $1/T^{13}$ [42]. Pour le modèle d'échange multiple avec échanges à 2, 4, 5 et 6 corps, le développement a été calculé jusqu'à $1/T^5$ [107]. Ces séries haute température, même prolongées par des approximants de Padé, ne donnent pas d'information sur la thermodynamique en dessous d'une température de l'ordre de l'échange typique ¹, à moins que de l'information sur le comportement de basse température ne soit introduite [108]. La technique proposée ici permet de calculer des quantités thermodynamiques pour des systèmes de taille finie jusqu'à une trentaine de sites. Jusqu'à 21 sites, le calcul des énergies des 2^N états propres est possible et nous calculons la fonction de partition en sommant les facteurs de Boltzmann de tous les états propres. On obtient ainsi chaleur spécifique, aimantation ou susceptibilité de manière exacte. Lorsque le système est plus grand, la totalité du spectre n'est plus accessible aux diagonalisations. Pour $N = 24$ (ainsi que $N = 36$ pour le modèle d'Heisenberg sur le réseau kagome [127]), nous employons une technique approchée. Elle consiste à utiliser simultanément un développement haute température et l'information des diagonalisations pour la partie basse température.

Une représentation irréductible (RI) comprend en bas de son spectre une structure, éventuellement complexe, qui reflète ses degrés de liberté de basse énergie. Cette zone n'est probablement pas accessible par des calculs de moments de la densité d'états. Elle

¹Pour le modèle d'Heisenberg sur le réseau triangulaire, Elstner *et al.* [42] calculent la chaleur spécifique et susceptibilité jusqu'à $T \simeq 0.4J$ dans les unités où $H = 2J \sum_{i < j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$. Pour l'échange multiple sur le réseau triangulaire, les séries sont fiables, avec des approximants de Padé, jusqu'à $T \simeq 2.5J_{C_v}$ [107] où $J_{C_v}^2$ est le terme dominant dans la chaleur spécifique à haute température : $C_v(T) = \frac{9}{4}(J_{C_v}/T)^2 + \mathcal{O}(1/T^3)$.

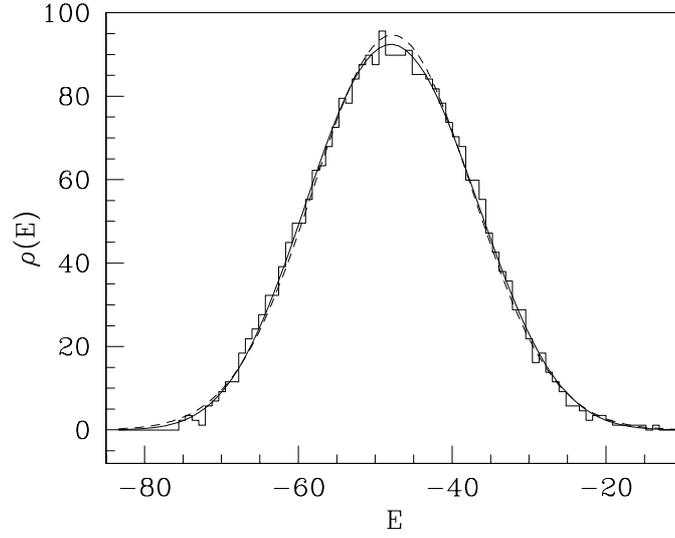


FIG. D.1: Histogramme : densité d'état d'une représentation irréductible de spin $S = 2$ d'un système à 20 sites ($J_2 = -2, J_4 = 1$) contenant 2454 niveaux entre $E_{\min} = -75.332$ et $E_{\max} = -13.217$. La ligne continue est la courbe d'entropie maximale qui possède sur $[E_{\min}, E_{\max}]$ les mêmes 5 premiers moments que la distribution exacte. Le résultat pour seulement 3 premiers moments (gaussienne) est en pointillés.

est d'autant plus difficile à reproduire que sa structure est discrète sur les petits systèmes. Elle peut aussi être discrète pour les grands systèmes si la physique engendre des gap(s). On utilise les premiers états propres du spectre (plusieurs centaines dans chaque RI pour $N = 24$) pour avoir précisément ce comportement de basse température. À plus haute énergie, la densité d'états est beaucoup plus élevée mais d'allure plus ou moins gaussienne. On peut le constater sur la figure D.1 qui montre la densité d'états d'une RI de spin $S = 2$ pour un système de 20 sites. La gaussienne (pointillés Fig. D.1) qui possède sur l'intervalle du spectre de la RI le même nombre d'états et les mêmes moments $\langle E \rangle$ et $\langle E^2 \rangle$ est une relativement bonne approximation de la densité d'états exacte.

Cette propriété est particulière aux hamiltoniens de spins que nous avons considérés. Dans la mesure où il serait illusoire de vouloir décrire une structure compliquée avec peu de moments, ce caractère "quasi-gaussien" constitue un ingrédient important de la méthode. On y approxime la densité d'état à l'aide d'un calcul exact des premiers moments suivi d'une procédure de maximum d'entropie. Les états de cette gamme d'énergie ne sont pas excités à basse température et il n'est pas nécessaire d'avoir une grande résolution en énergie sur leur répartition pour connaître précisément la chaleur spécifique ou la susceptibilité du système.

L'originalité de la méthode est le traitement séparé de chaque secteur de symétrie.

La densité d'états totale est la somme des contributions de chaque RI. Or, pour deux RI différentes, ni les maxima ni les largeurs de densités d'états ne coïncident en général, surtout si les spins totaux sont différents. La densité d'états totale contient donc plus de structure que les spectres de chaque RI pris séparément. À partir de là, on comprend qu'il est économique de décrire indépendamment chaque RI par peu de moments (4 ou 5) et de consacrer une grande partie du temps de calcul à l'accumulation d'un grand nombre de niveaux de basse énergie par la méthode de Lanczös. La courbe continue de la figure D.1 permet d'apprécier le résultat d'entropie maximale pour 5 moments seulement ($\langle E^n \rangle$, $n = 0, \dots, 4$) et de le comparer à la densité exacte. La figure D.3 illustre la performance de la méthode dans une situation très défavorable où la chaleur spécifique présente une structure complexe à trois bosses ². La comparaison avec la chaleur spécifique exacte révèle un bon accord dans toute la gamme de température, alors que seulement un état exact en bas de chaque RI est utilisé (et un en haut). Cette structure ne peut pas être reproduite avec seulement cinq moments si le calcul de la densité d'états n'est pas effectué dans chaque secteur de spin.

Il s'agit d'une stratégie différente de celle de SILVER et RÖDER [124, 125] et SILVER *et al.* [126]. Ces auteurs évaluent stochastiquement un beaucoup plus grand nombre de moments (de Chebyshev) pour obtenir une bonne résolution spectrale. Nous n'avons pas effectué de comparaison entre les deux approches mais il semble, au vu des tailles de systèmes de spins traités ($N = 26$ dans Réf. [124]), que notre approche soit compétitive avec la technique, plus sophistiquée, de SILVER *et al.* .

D.2 Maximum d'entropie

La densité d'états de chaque RI est évaluée de la manière suivante : dans l'intervalle d'énergie $[a, b]$ où l'algorithme de Lanczös n'a pas permis de calculer les valeurs propres, on cherche la courbe *la plus probable* satisfaisant des contraintes de moments. La façon de traiter le problème de moments par une méthode de maximum d'entropie est décrite dans la Réf. [88], nous en présentons ici les grandes lignes. On interprète $\rho(E)$ comme la densité de probabilité de trouver une valeur propre à l'énergie E . On définit alors l'entropie de ρ sur $[a, b]$ par :

$$S = \int_a^b \rho(E) \log(\rho(E)) dE \quad (\text{D.1})$$

Les moments de la densité d'états sont donnés par les traces de l'hamiltonien. Pour un système fini donné (typiquement $N = 24$ ou 36) les traces $\text{Tr}[H^n]$ sont calculées

²La bosse de basse température est un effet de taille finie. Pour une discussion sur la thermodynamique du modèle kagome, voir la Réf. [127].

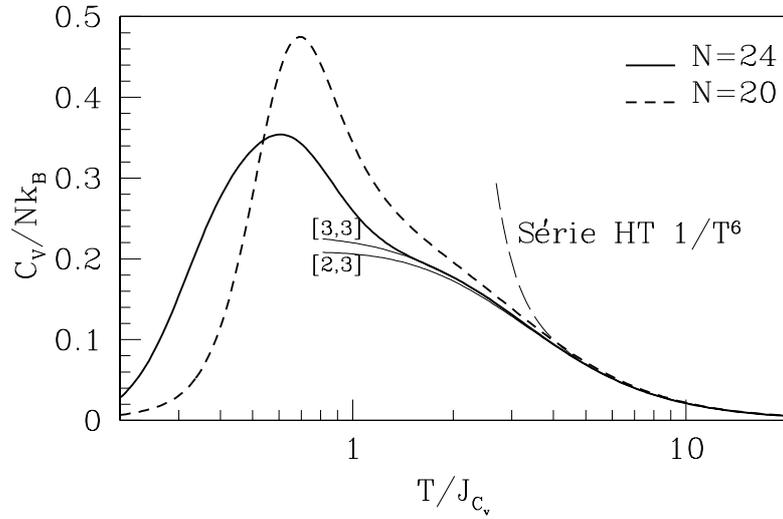


FIG. D.2: $C_v(T)$ calculés à partir de spectres $N = 20$ et 24 à $J_2/J_4 = -2$ ($J_{C_v}/J_4 = 1.5$). La courbe $N = 20$ est exacte et celle pour $N = 24$ est calculée par la méthode des traces jusqu'à $Tr[H^4]$. Au total, plusieurs milliers d'états exacts ont été calculés. On constate un bon accord avec les approximants de Padé haute température [107]. Pour cet hamiltonien, les effets de taille pour $T \lesssim J_{C_v}$ sont bien supérieurs à l'erreur due à l'approximation faite sur $N = 24$.

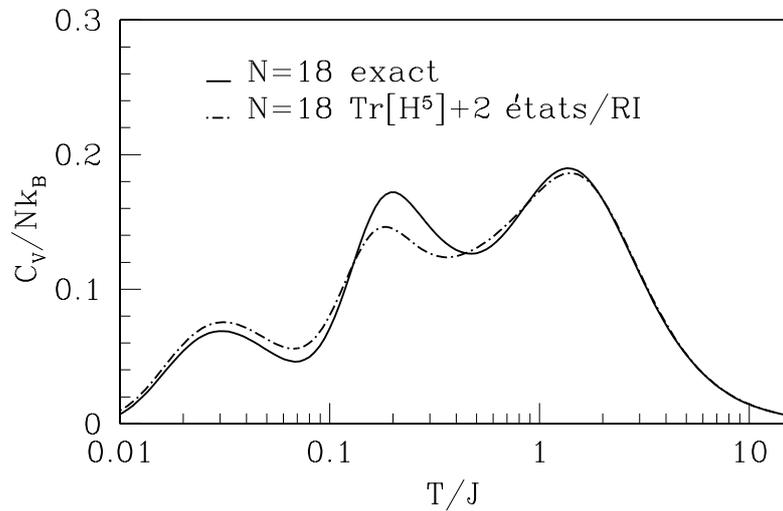


FIG. D.3: Chaleurs spécifiques exacte et approchée par la méthode des traces pour le modèle d'Heisenberg sur le réseau kagome ($N = 18$). Seulement deux états exacts et les traces de hamiltonien jusqu'à H^5 sont utilisés pour le calcul approché.

dans chaque espace de représentation irréductible jusqu'à $n_{\max} = 4$ ou 5 d'une manière algébrique décrite au paragraphe § D.3. On minimise alors S compte tenu des $n_{\max} + 1$ contraintes ³ :

$$C_n[\rho] = \int_a^b \rho(E) E^n dE - \left[\text{Tr}[H^n] - \sum_{\alpha} E_{\alpha}^n \right] = 0 \quad (\text{D.2})$$

Les E_{α} sont les valeurs propres connues, elles sont en dehors de l'intervalle $[a, b]$. Soit λ_n le multiplicateur de Lagrange associé à la $n^{\text{ème}}$ contrainte. Il existe un ensemble de λ_n tels que pour tout $x \in [a, b]$:

$$\frac{\partial}{\partial[\rho(x)]} S[\rho] = \sum_{n=0}^{n_{\max}} \lambda_n \frac{\partial}{\partial[\rho(x)]} C_n[\rho] \quad (\text{D.3})$$

C'est-à-dire :

$$1 + \log(\rho(x)) = \sum_{n=0}^{n_{\max}} \lambda_n x^n \quad (\text{D.4})$$

La forme de la densité d'état est donc l'exponentielle d'un polynôme et il faut résoudre le système non linéaire à $n_{\max} + 1$ équations :

$$\int_a^b \underbrace{\exp\left(-1 + \sum_{n=0}^{n_{\max}} \lambda_n E^n\right)}_{=\rho(E)} E^n dE = X_n \quad (\text{D.5})$$

où les seconds membres sont connus :

$$X_n = \text{Tr}[H^n] - \sum_{\alpha} E_{\alpha}^n \quad (\text{D.6})$$

Ce système est ramené à un problème de minimisation en introduisant un potentiel $\Gamma(\lambda_i)$

$$\Gamma(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N) = \sum_{n=0}^{n_{\max}} \lambda_n X_n - \int_a^b \exp\left(-1 + \sum_{n=0}^{n_{\max}} \lambda_n E^n\right) dE \quad (\text{D.7})$$

dont la stationnarité par rapport aux λ_i équivaut au système Eq. (D.5). Γ est convexe et peut être minimisé numériquement ⁴, ce qui conclut le calcul approché de $\rho(x)$ dans

³Une méthode alternative consiste à prendre pour ansatz de densité d'états le produit d'un polynôme P par une gaussienne G . Les paramètres de la gaussienne sont fixés par les trois premiers moments de H dans l'espace de la RI. On impose ensuite au polynôme de corriger les moments de $P \cdot G$ pour qu'ils coïncident sur $[a, b]$ avec ceux de H . Les moments de H sur $[a, b]$ étant connus en soustrayant aux traces exactes la contribution des énergies calculées par la méthode de Lanczös. Les équations que doivent satisfaire les coefficients du polynôme peuvent être résolues analytiquement, ce qui fait l'intérêt pratique de cette méthode simple. En revanche, la méthode échoue si le polynôme devient négatif sur $[a, b]$, ce qui arrive quand on dispose de trop peu d'états exacts.

⁴Code développé au LPTL par P. SINDZINGRE.

l'intervalle $[a, b]$.

D.3 Trace de H^n dans une représentation irréductible

L'algorithme pour calculer les moments d'un hamiltonien d'échange multiple dans une représentation irréductible du groupe de symétrie du réseau triangulaire a été développé par L. PIERRE et B. BERNU au LPTL. Nous en donnons ici le principe.

Notons par \mathcal{E}_i le sous-espace propre associé à la valeur propre λ_i de l'hamiltonien H , et par \mathcal{G} le groupe des symétries. Si Π_i est le projecteur orthogonal sur l'espace \mathcal{E}_i , on a :

$$H^n = \sum_n (\lambda_i)^n \Pi_i \quad \forall n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{D.8})$$

On cherche à calculer la trace $Tr[H_{|\Gamma}^n]$ de H^n dans le sous-espace des états qui se transforment suivant la RI Γ de \mathcal{G} . Pour cela, on s'intéresse à $Tr[\Pi_{i|\Gamma}]$. Cette trace est la multiplicité avec laquelle la représentation Γ apparaît dans l'espace \mathcal{E}_i . Elle peut être calculée à l'aide du caractère χ_Γ de Γ de la façon suivante. Les sous-espaces \mathcal{E}_i sont stables par l'action de \mathcal{G} , ce qui définit une représentation de \mathcal{G} dans \mathcal{E}_i :

$$\rho_i : \begin{array}{l} \mathcal{G} \longrightarrow Gl(\mathcal{E}_i) \\ g \longmapsto \rho_i(g) = \Pi_i g \end{array} \quad (\text{D.9})$$

Cette représentation ρ_i peut se décomposer sur les RI de \mathcal{G} . La multiplicité de Γ dans cette décomposition est obtenue par le produit scalaire des caractères de Γ et de ρ_i :

$$n(\Gamma, \rho_i) = \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{g \in \mathcal{G}} \chi_\Gamma(g) \underbrace{Tr[\Pi_i g]}_{\chi_{\rho_i}} \quad (\text{D.10})$$

Mais la multiplicité $n(\Gamma, \rho_i)$ n'est autre, à la dimension de Γ près, que le nombre d'états propres de \mathcal{E}_i qui se transforment sous Γ ⁵ :

$$Tr[\Pi_{i|\Gamma}] = n(\Gamma, \rho_i) \dim(\Gamma) \quad (\text{D.11})$$

de sorte que :

$$Tr[\Pi_{i|\Gamma}] = \dim(\Gamma) \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{g \in \mathcal{G}} \chi_\Gamma(g) Tr[\Pi_i g] \quad (\text{D.12})$$

⁵En général, $n(\Gamma, \rho_i)$ vaut 1 si les états d'énergie λ_i ont les nombres quantiques Γ , et zéro sinon. S'il y a une dégénérescence accidentelle supplémentaire entre plusieurs multiplets de Γ pour l'énergie λ_i , $n(\Gamma, \rho_i)$ est le nombre de multiplets dégénérés. C'est le cas si \mathcal{G} n'est pas le groupe complet des symétries de H .

On reconstruit la trace de H^n en sommant sur les valeurs propres avec un poids $(\lambda_i)^n$:

$$\begin{aligned}
Tr[H_{|\Gamma}^n] &= \sum_i (\lambda_i)^n Tr[\Pi_{i|\Gamma}] \\
&= \dim(\Gamma) \sum_i (\lambda_i)^n \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{g \in \mathcal{G}} \chi_{\Gamma}(g) Tr[\Pi_{i|g}] \\
&= \dim(\Gamma) \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{g \in \mathcal{G}} \chi_{\Gamma}(g) Tr[H^n g] \tag{D.13}
\end{aligned}$$

Enfin, puisque $Tr[H^n g_1] = Tr[H^n g_2]$ si g_1 et g_2 sont conjugués, la somme de l'Eq. (D.13) peut être restreinte à une somme sur les classes de conjugaison, au lieu d'une somme sur tous les éléments de \mathcal{G} . D'autre part, on choisit de ne prendre pour \mathcal{G} que le groupe des symétries spatiales et de calculer les traces séparément dans chaque secteur de spin.

Les hamiltoniens qui nous intéressent sont des sommes de permutations de sites du réseau, et $H^n g$ est aussi une somme de permutations. Nous sommes donc ramené au calcul de la trace d'une permutation g' dans un espace de spin donné. On commence par décomposer g' en produit de k cycles disjoints. Les longueurs des cycles sont n_1, n_2, \dots, n_k , où $\sum_{i=1}^k n_i = N$ est nombre total de sites du réseau. Une configuration $|\Psi\rangle$ dans la base d'Ising est diagonale pour g' si et seulement si tous les spins d'un même cycle sont dans le même sens (haut ou bas). D'une manière identique à celle décrite en annexe A, le comptage de ces configurations pour une aimantation S^z donnée s'obtient par le coefficient de degré S^z du polynôme $P_{g'}$ associé à la décomposition de g' en cycles (voir Eq. (A.5)).

Nous terminons cette section par une remarque sur le temps de calcul de ces traces. Le nombre de classes de conjugaison croît à peu près comme le cardinal du groupe \mathcal{G} , c'est-à-dire comme le nombre de sites N . Le nombre de termes dans H^n est $(3N)^n$ pour le modèle d'Heisenberg sur le réseau triangulaire et il vaut $(23N)^n$ si on ajoute les échanges à 4,5 et 6 corps ⁶. Le réseau triangulaire à $N = 24$ sites utilisé pour le calcul de chaleur spécifique possède 18 classes de conjugaison dans son groupe d'espace, et le nombre de termes dans Eq. (D.13) est pour chaque représentation spatiale de $1.64 \cdot 10^{12}$ pour $n = 4$. Il y a 18 représentations irréductibles et le calcul ne demande qu'une dizaine de jours sur une station de travail (pentium II à 300Mhz). Par contre, le calcul des traces d'une puissance de H supplémentaire ($n = 5$) demanderait près de 600 fois plus longtemps.

⁶Sur le réseau triangulaire, il y a 3 liens, 3 losanges, 6 motifs compacts à 5 sites et 1 hexagone par site. En tenant compte des termes P_n et P_n^{-1} pour $n = 4, 5$ et 6 , on trouve 23 termes par site.

Bibliographie

- [1] F. F. ABRAHAM, J. Q. BROUGHTON, P. W. LEUNG, et V. ELSER. Second-layer solidification of ^3He on graphite : a numerical study. *Europhys. Lett.*, **12**, 107–112, 1990.
- [2] I. AFFLECK. Large-n limit of $\text{SU}(n)$ quantum “spin” chains. *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 966–969, 1985.
- [3] I. AFFLECK. Spin gap and symmetry breaking in CuO_2 layers and other antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, **37**, 5186–5192, 1988.
- [4] I. AFFLECK, T. KENNEDY, E. H. LIEB, et H. TASAKI. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 799–802, 1987.
- [5] I. AFFLECK, T. KENNEDY, E. H. LIEB, et H. TASAKI. Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets. *Commun. Math. Phys.*, **115**(3), 477–528, 1988.
- [6] I. AFFLECK et J. B. MARSTON. Large-N limit of the Heisenberg-Hubbard model ; implications for high T_c superconductors. *Phys. Rev. B*, **37**, 3774–3777, 1988.
- [7] P. W. ANDERSON. *Phys. Rev.*, **86**, 694, 1952.
- [8] P. W. ANDERSON. The $S = \frac{1}{2}$ antiferromagnetic ground state : Néel antiferromagnet or quantum liquid. *Mater. Res. Bull.*, **8**, 153–160, 1973.
- [9] P. W. ANDERSON. The resonating-valence-bond state in La_2CuO_4 and superconductivity. *Science*, **235**, 1196–1198, 1987.
- [10] D. P. AROVAS et A. AUERBACH. Functional integral theories of low dimensional quantum Heisenberg models. *Phys. Rev. B*, **38**, 316–332, 1988.
- [11] P. AZARIA, B. DELAMOTTE, et D. MOUHANNA. Spontaneous symmetry breaking in quantum frustrated antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 2483–2486, 1993.
- [12] G. BASKARAN, Z. ZOU, et P. W. ANDERSON. The resonating valence bond state and high- T_c superconductivity - a mean field theory. *Solid State Commun.*, **61**, 973–976, 1987.

- [13] C. BÄUERLE. *L³He adsorbé sur du graphite : Un système modèle pour la physique des Fermions en interaction à deux dimensions*. Thèse de doctorat, Université Joseph Fourier, 1996.
- [14] C. BÄUERLE, A.-S. CHEN, YU. M. BUNKOV, H. GODFRIN, et M. ROGER. Ultra-low temperature susceptibility of a highly frustrated two-dimensional solid ³He magnet. *J. Low Temp. Phys.*, **113**, 287–293, 1998. Proceedings of the 1997 Quantum Fluids and Solid Conference QSF'98, Amherst USA.
- [15] C. BÄUERLE, A.-S. CHEN, S. TRIQUENEAUX, YU. M. BUNKOV, H. GODFRIN, et M. ROGER. Structure and magnetism of second-layer solid ³He films in the intermediate regime. *J. Low Temp. Phys.*, **113**(3/4), 259–264, 1998.
- [16] B. BERNU et D. M. CEPERLEY. Calculations of exchange frequencies with path integral Monte Carlo : solid ³He on graphite. Dans M.P. NIGHTINGALE et C. J. UMRIGAR, éditeurs, *Quantum Monte Carlo Methods in Physics and Chemistry*, pages 161–182, Netherlands, 1999. Kluwer Academic Publishers.
- [17] B. BERNU, D. M. CEPERLEY, et C. LHUILLIER. Specific heat and Curie temperature evaluation on triangular lattice : exchange frequencies for ³He adsorbed on grafoil, evaluated by path integral techniques. *J. Low Temp. Phys.*, **89**, 589–592, 1992.
- [18] B. BERNU, P. LECHEMINANT, C. LHUILLIER, et L. PIERRE. Exact spectra, spin susceptibilities and order parameter of the quantum Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice. *Phys. Rev. B*, **50**, 10048–10062, 1994.
- [19] B. BERNU, C. LHUILLIER, et L. PIERRE. Broken symmetries and thermodynamic limit in quantum antiferromagnets. *J. Low Temp. Phys.*, **89**(3/4), 523–526, 1992.
- [20] B. BERNU, C. LHUILLIER, et L. PIERRE. Signature of Néel order in exact spectra of quantum antiferromagnets on finite lattices. *Phys. Rev. Lett.*, **69**, 2590–2593, 1992.
- [21] H. BETHE. Zur Theorie des Metalle. I. Eigenwert un Eigenfunktionendes linearen Atomkette. *Z. Phys.*, **71**, 205–226, 1931.
- [22] B. BRAMI, F. JOLY, et C. LHUILLIER. Is there a liquid phase in a (sub)monolayer of ³He adsorbed on graphite? *J. Low Temp. Phys.*, **94**(1), 63, 1994.
- [23] S. BREHMER, H.-J. MIKESKA, M. MÜLLER, N. NAGAOSA, et S. UCHIDA. Effects of biquadratic exchange on the spectrum of elementary excitations in spin ladders. *Phys. Rev. B*, **60**, 329–334, 1999.
- [24] D. C. CABRA, A. HONECKER, et P. PUJOL. Magnetization curves of antiferromagnetic Heisenberg spin- $\frac{1}{2}$ ladders. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 5126–5129, 1997.
- [25] D. C. CABRA, A. HONECKER, et P. PUJOL. Magnetization plateaux in N-leg spin ladders. *Phys. Rev. B*, **58**, 6241–6257, 1998.

-
- [26] A. CASEY, H. PATEL, J. NYÉKI, B. P. COWAN, et J. SAUNDERS. Nuclear magnetism of two dimensional solid ^3He adsorbed on plated graphite. *J. Low Temp. Phys.*, **113**(3/4), 265–270, 1998.
- [27] A. CASEY, H. PATEL, J. NYÉKI, B. P. COWAN, et J. SAUNDERS. Strongly correlated two dimensional fluid ^3He . *J. Low Temp. Phys.*, **113**(3/4), 293, 1998.
- [28] H. A. CECCATTO, C. J. GAZZA, et A. E. TRUMPER. Non classical disordered phase in the strong quantum limit of frustrated antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, **47**, 12329–12332, 1993.
- [29] D. M. CEPERLEY et G. JACUCCI. Calculation of exchange frequencies in bcc ^3He with the path-integral Monte Carlo method. *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 1648–1651, 1987. Voir aussi Réf. [30].
- [30] D. M. CEPERLEY et G. JACUCCI. Erratum : Calculation of exchange frequencies in bcc ^3He with the path-integral Monte Carlo Method. *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 380, 1987.
- [31] G. CHABOUSSANT, P. A. CROWELL, L. P. LÉVY, O. PIOVESANA, A. MADOURI, et D. MAILLY. Experimental phase diagram of $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$: A quasi-one-dimensional antiferromagnetic spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg ladder. *Phys. Rev. B*, **55**, 3046–3049, 1997.
- [32] P. CHANDRA et B. DOUÇOT. Possible spin-liquid state at large S for the frustrated square Heisenberg lattice. *Phys. Rev. B*, **38**, 9335–9338, 1988.
- [33] J. T. CHAYES, L. CHAYES, et S. A. KIVELSON. Valence bond ground state in a frustrated two-dimensional spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnet. *Commun. Math. Physic.*, **123**, 53–83, 1989.
- [34] A. V. CHUBUKOV, E. GAGLIANO, et C. BALSEIRO. Phase diagram of the frustrated spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnet with cyclic-exchange interaction. *Phys. Rev. B*, **45**, 7889–7898, 1992.
- [35] A. V. CHUBUKOV et D. I. GOLOSOV. Quantum theory of an antiferromagnet on a triangular lattice in a magnetic field. *J. Phys. : Cond. Matt.*, **3**, 69–82, 1991.
- [36] M. C. CROSS et D. S. FISHER. Magnetism in solid ^3He . *Rev. Mod. Phys.*, **57**, 881–920, 1985.
- [37] E. DAGOTTO et A. MOREO. Phase diagram of the frustrated spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnet in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **63**, 2148–2151, 1989.
- [38] P. A. M. DIRAC. *Proc. Roy. Soc.*, **112A**, 661, 1926.
- [39] P. A. M. DIRAC. *The Principles of Quantum Mechanics*. Clarendon, Oxford, 1947.
- [40] T. EINARSSON et H. J. SCHULZ. Direct calculation of the spin stiffness in the $J_1 - J_2$ Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, **51**, 6151–6154, 1995.

- [41] V. ELSER. Nuclear antiferromagnetism in a registered ^3He solid. *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 2405–2408, 1989.
- [42] N. ELSTNER, R. R. P. SINGH, et A. P. YOUNG. Finite temperature properties of the spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice. *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 1629–1632, 1993.
- [43] P. FAZEKAS et P. W. ANDERSON. On the ground state properties of the anisotropic triangular antiferromagnet. *Philos. Mag.*, **30**, 423–440, 1974.
- [44] D. S. FISHER. Universality, low-temperature properties, and finite-size scaling in quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, **39**, 11783–11792, 1989.
- [45] H. FRANCO, H. GODFRIN, H. J. LAUTER, et D. THOULOZE. Nuclear magnetism of a monolayer of ^3He /Grafoil at millikelvin temperatures. Dans U. EKERN, A. SHMID, W. WEBER, et H. WÜHL, éditeurs, *Proc. 17th Int. Conf. on Low Temperature Physics*, pages 723–724. Elsevier North-Holland, 1984.
- [46] H. FRANCO, R. E. RAPP, et H. GODFRIN. Nuclear ferromagnetism of two-dimensional ^3He . *Phys. Rev. Lett.*, **57**, 1161–1164, 1986.
- [47] M. P. GELFAND. Series investigations of magnetically disordered ground states in two-dimensional frustrated quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, **42**, 8206–8213, 1990.
- [48] M. P. GELFAND, R. R. P. SINGH, et D. A. HUSE. Groundstates of low dimensional quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, **40**, 10801, 1984.
- [49] H. GODFRIN et D. D. OSHEROFF. Multiple-spin-exchange calculation of the $T=0$ properties of solid ^3He . *Phys. Rev. B*, **38**(7), 4492–4503, 1988.
- [50] H. GODFRIN et R. E. RAPP. Two-dimensional nuclear magnets. *Adv. in Phys.*, **44**(2), 113–186, 1995.
- [51] D. GREYWALL. Heat capacity of multilayers of ^3He adsorbed on graphite at low millikelvin temperatures. *Phys. Rev. B*, **41**, 1842–1862, 1990.
- [52] D. S. GREYWALL et P. A. BUSCH. Heat capacity of ^3He adsorbed on graphite at millikelvin temperatures and near third-layer promotion. *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 1868–1871, 1989.
- [53] F. D. M. HALDANE. Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet : identification with the $O(3)$ nonlinear sigma model. *Phys. Lett*, **93A**, 464–468, 1983.
- [54] F. D. M. HALDANE. Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets : semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state. *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 1153–1156, 1983.
- [55] F. D. M. HALDANE. “Theta physics” and quantum spin chains. *J. Appl. Phys.*, **57**, 3359, 1985.

-
- [56] F. D. M. HALDANE. $O(3)$ Nonlinear sigma model and the topological distinction between integer and half integer spin antiferromagnets in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 1029–1032, 1988.
- [57] C. A. HAYWARD, D. POILBLANC, et L. P. LEVY. Magnetization of $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$: A Heisenberg spin-ladder system. *Phys. Rev. B*, **54**, R12649–R12652, 1996.
- [58] W. HEISENBERG. *Z. Phys.*, **38**, 441, 1926.
- [59] K. HIDA. Magnetic properties of the spin- $\frac{1}{2}$ ferromagnetic-ferromagnetic-antiferromagnetic trimerized Heisenberg chain. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **63**, 2359–2364, 1994.
- [60] J. E. HIRSCH et SANYEE TANG. Comment on a mean-field theory of quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, **39**, 2850–2851, 1989.
- [61] A. HONECKER. A comparative study of the magnetization process of two-dimensional antiferromagnets. cond-mat/9902163, 1999.
- [62] A. HONECKER. Strong-coupling approach to the magnetization process of polymerized quantum spin chains. *Phys. Rev. B*, **59**, 6790–6794, 1999.
- [63] D. A. HUSE et V. ELSER. Simple variational wave functions for two-dimensional Heisenberg spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, **60**, 2531–2534, 1988.
- [64] H. IKEGAMI, K. OBARA, D. ITO, et H. ISHIMOTO. Competition of multiple spin exchanges in submonolayer solid ^3He . *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 2478–2481, 1998.
- [65] K. ISHIDA, M. MORISHITA, K. YAWATA, et H. FUKUYAMA. Low temperature heat-capacity anomalies in two-dimensional Solid ^3He . *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 3451–3454, 1997.
- [66] T. JOLICŒUR et C. LE GUILLOU. Spin-wave results for the triangular Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, **40**, 2727–2729, 1989.
- [67] F. JOLY, C. LHUILLIER, et B. BRAMI. The helium-graphite interaction. *Surface Science*, **264**, 419–422, 1992.
- [68] H. KAGEYAMA, K. YOSHIMURA, R. STERN, N. V. MUSHNIKOV, K. ONIZUKA, M. KATO, K. KOSUGE, C. P. SLICHTER, T. GOTO, et Y. UEDA. Exact dimer ground state and quantized magnetization plateaus in the two-dimensional spin system $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 3168–3171, 1999.
- [69] V. KALMEYER et R. B. LAUGHLIN. Equivalence of the resonating-valence-bond and fractional quantum Hall states. *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 2095–2098, 1987.
- [70] V. KALMEYER et R. B. LAUGHLIN. Theory of the spin liquid state of the Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, **39**, 11879–11899, 1989.

-
- [71] S. A. KIVELSON. Statistics of holons in the quantum hard-core dimer gas. *Phys. Rev. Lett.*, **39**, 259–264, 1989.
- [72] D. J. KLEIN. Extension of the Dirac identity. *J. Phys. A.*, **13**, 3141–3146, 1980.
- [73] D. J. KLEIN. Exact ground states for a class of antiferromagnetic Heisenberg models with short-range interactions. *J. Phys. A.*, **15**, 661–671, 1982.
- [74] M. KOHMOTO et Y. SHAPIR. Antiferromagnetic correlations of the resonating-valence-bond state. *Phys. Rev. B*, **37**, 9439–9442, 1988.
- [75] A. K. KOLEZHUK. Magnetization plateaus in weakly coupled dimer spin system. *Phys. Rev. B*, **59**, 4181–4188, 1999.
- [76] V. N. KOTOV, J. OITMAA, O. P. SUSHKOV, et Z. WEIHONG. Low-energy singlet and triplet excitations in the spin-liquid phase of the two-dimensional $J_1 - J_2$ model. cond-mat/9903154, 1999.
- [77] K. KUBO et T. MOMOI. Ground state of a Spin System with Two- and Four-spin Exchange Interactions on the triangular lattice. *Z. Phys. B.*, **103**, 485–489, 1997.
- [78] R. B. LAUGHLIN. Anomalous quantum Hall effect : an incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 1395–1398, 1983.
- [79] P. LECHEMINANT. *Les antiferromagnétiques quantiques frustrés à deux dimensions*. Thèse de doctorat, Université P. et M. Curie, 1995.
- [80] P. LECHEMINANT, B. BERNU, C. LHUILLIER, et L. PIERRE. $J_1 - J_2$ quantum Heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice : A group-symmetry analysis of order by disorder. *Phys. Rev. B*, **52**, 6647–6652, 1995.
- [81] P. LECHEMINANT, B. BERNU, C. LHUILLIER, L. PIERRE, et P. SINDZINGRE. Order versus disorder in the quantum Heisenberg antiferromagnet on the Kagome lattice using exact spectra analysis. *Phys. Rev. B*, **56**, 2521–2529, 1997.
- [82] S. LIANG, B. DOUÇOT, et P. W. ANDERSON. Some new variational resonating-valence-bond-type wave functions for the spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnetic Heisenberg model on a square lattice. *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 365–368, 1988.
- [83] E. H. LIEB, T. D. SHULTZ, et D. C. MATTIS. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Ann. Phys. (N.Y.)*, **16**, 407–466, 1961.
- [84] A. H. MACDONALD, S. M. GIRVIN, et D. YOSHIOKA. Reply to “Comment on ‘t/U expansion for the Hubbard model’ ”. *Phys. Rev. B*, **41**, 1990.
- [85] C. K. MAJUMDAR et D. K. GHOSH. On next-nearest-neighbor interactions in linear chains. *J. of Math. Phys.*, **10**, 1388–1402, 1969.
- [86] L. O. MANUEL, A. E. TRUMPER, et H. A. CECCATTO. Rotational invariance and order-parameter stiffness in frustrated quantum spin systems. *Phys. Rev. B*, **57**, 8348–8353, 1998.

-
- [87] D. C. MATTIS. *The theory of magnetism I*. Springer-Verlag, 1981.
- [88] L. R. MEAD et N. PAPANICOLAOU. Maximum entropy in the problem of moments. *J. of Math. Phys.*, **25**, 2404–2417, 1984.
- [89] N. D. MERMIN et H. WAGNER. Absence of ferromagnetism and antiferromagnetism in one- or two- dimensional isotropic Heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, **17**, 1133–1136, 1966.
- [90] G. MISGUICH, B. BERNU, et C. LHUILLIER. Schwinger bosons study of the multi spin exchange model. *J. Low Temp. Phys.*, **110**, 327–331, 1998.
- [91] G. MISGUICH, B. BERNU, C. LHUILLIER, et C. WALDTMANN. Spin liquid in the multiple-spin exchange model on the triangular lattice : ^3He on graphite. *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 1098–1101, 1998.
- [92] G. MISGUICH, C. LHUILLIER, B. BERNU, et C. WALDTMANN. Spin-liquid phase of the multiple-spin exchange hamiltonian on the triangular lattice. *Phys. Rev. B*, **60**, 1064–1074, 1999.
- [93] T. MOMOI, K. KUBO, et K. NIKI. Possible chiral phase transition in two dimensional solid ^3He . *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 2081–2084, 1997.
- [94] T. MOMOI, H. SAKAMOTO, et K. KUBO. Magnetization plateau in a two-dimensional multiple-spin exchange model. *Phys. Rev. B*, **59**, 9491–9499, 1999.
- [95] A. A. NERSESYAN et A. M. TSVELIK. Erratum : One-dimensional spin-liquid without magnon excitations. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 1171, 1997.
- [96] A. A. NERSESYAN et A. M. TSVELIK. One-dimensional spin-liquid without magnon excitations. *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 3939–3942, 1997. Voir aussi Réf. [95].
- [97] H. NEUBERGER et T. ZIMAN. Finite-size effects in Heisenberg antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, **39**, 2608–2618, 1989.
- [98] H. NISHIMORI et S. MIYASHITA. Magnetization process of the spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnetic Ising-like Heisenberg model on the triangular lattice. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **55**, 1986.
- [99] T. OKAMOTO et S. KAWAJI. Magnetism in a Wigner solid and the Aharonov-Bohm effect : Experiment and theory. *Phys. Rev. B*, **57**, 9097–9107, 1998.
- [100] M. OSHIKAWA, M. YAMANAKA, et I. AFFLECK. Magnetization plateaus in spin chains : “Haldane gap” for half-integer spins. *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 1984–1987, 1997.
- [101] N. READ et B. CHAKRABORTY. Statistics of the excitations of the resonating-valence-bond state. *Phys. Rev. B*, **40**, 7133–7140, 1989.
- [102] N. READ et S. SACHDEV. Some features of the phase diagram of the square lattice $\text{SU}(N)$ antiferromagnet. *Nucl. Phys. B*, **B316**, 609–640, 1989.

-
- [103] N. READ et S. SACHDEV. Spin-Peierls, valence-bond solid, and Néel ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, **42**(7), 4568–4589, 1990.
- [104] N. READ et S. SACHDEV. Large-N expansion for frustrated quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, **66**, 1773–1776, 1991.
- [105] M. ROGER. Multiple exchange in ^3He and in the Wigner solid. *Phys. Rev. B*, **30**, 6432–6457, 1984.
- [106] M. ROGER. Frustration due to competing cyclic ring exchanges in two-dimensional solid ^3He . *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 297–300, 1990.
- [107] M. ROGER. High-temperature series expansions with cyclic exchanges on a triangular lattice : Application to two-dimensional solid ^3He . *Phys. Rev. B*, **56**, 2928–2931, 1997.
- [108] M. ROGER. Differential approximants : An accurate interpolation from high-temperature series expansions to low-temperature behavior in two-dimensional ferromagnets. *Phys. Rev. B*, **58**, 11115–11118, 1998.
- [109] M. ROGER, C. BÄUERLE, YU. M. BUNKOV, A.-S. CHEN, et H. GODFRIN. Multiple-spin-exchange on a triangular lattice : a quantitative interpretation of thermodynamic properties of two-dimensional solid ^3He . *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 3451–3454, 1998.
- [110] M. ROGER, C. BÄUERLE, H. GODFRIN, L. PRICOUPENKO, et J. TREINER. Some structural properties of solid ^3He films : Consequences on ^3He film ferromagnetism. *J. Low Temp. Phys.*, **112**, 449, 1998.
- [111] M. ROGER et J. M. DELRIEU. Cyclic four-spin exchange on a two-dimensional square lattice : Possible applications in high- T_c superconductors. *Phys. Rev. B*, **39**, 2299–2303, 1989.
- [112] M. ROGER et J. H. HETHERINGTON. Coupled-cluster approximation for spin lattices : application to solid ^3He . *Phys. Rev. B*, **41**, 200–219, 1990.
- [113] M. ROGER, J. H. HETHERINGTON, et J. M. DELRIEU. Magnetism in solid ^3He . *Rev. Mod. Phys.*, **55**, 1–63, 1983.
- [114] D. S. ROKHSAR. Quadratic quantum antiferromagnets in the fermionic large-N limit. *Phys. Rev. B*, **42**, 2526–2531, 1990.
- [115] D. S. ROKHSAR et S. A. KIVELSON. Superconductivity and the quantum hard-core dimer gas. *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 2376–2379, 1988.
- [116] S. SACHDEV. Kagome- and triangular-lattice antiferromagnets : Ordering from quantum fluctuations and quantum-disordered ground states with unconfined bosonic spins. *Phys. Rev. B*, **45**, 12377–12396, 1992.
- [117] S. SACHDEV et R. N. BHATT. Bond-operator representation of quantum spins : Mean-field theory of frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, **41**, 9323–9329, 1990.

-
- [118] S. SACHDEV, T. SENTHIL, et R. SHANKAR. Finite temperature properties of quantum antiferromagnets in a uniform magnetic field in one and two dimensions. *Phys. Rev. B*, **50**, 258–272, 1994.
- [119] T. SAKAI et Y. HASEGAWA. Magnetization plateau in the spin ladder with the four-spin exchange. *Phys. Rev. B*, 1999. À paraître (et cond-mat/9809291).
- [120] P. SCHIFFER, M. T. O’KEEFE, D. D. OSHEROFF, et H. FUKUYAMA. Magnetization of ^3He on Grafoil in the low-temperature limit. *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 1403–1406, 1993.
- [121] H. SCHULTZ et T. ZIMAN. Finite-size scaling for the two-dimensional frustrated quantum Heisenberg Antiferromagnet. *Europhys. Lett.*, **18**(4), 355–360, 1992.
- [122] B. S. SHASTRY et B. SUTHERLAND. Exact ground state of a quantum mechanical antiferromagnet. *Physica A*, **108B**, 1069–1070, 1981.
- [123] W. SHIRAMURA, K. I. TAKATSU, B. KURNIAWAN, H. TANAKA, H. UEKUSA, Y. OHASHI, K. TAKIZAWA, H. MITAMURA, et T. GOTO. Magnetization plateaus in NH_4CuCl_3 . *J. Phys. Soc. Jpn.*, **67**, 1548–1551, 1998.
- [124] R. N. SILVER et H. RÖDER. Densities of states of mega-dimensional Hamiltonian matrices. *Int. J. Mod. Phys. C*, **5**, 735–753, 1994.
- [125] R. N. SILVER et H. RÖDER. Calculation of densities of states and spectral functions by Chebyshev recursion and maximum entropy. *Phys. Rev. E*, **56**, 4822–4829, 1997.
- [126] R. N. SILVER, H. RÖDER, A. F. VOTER, et J. D. KRESS. Kernel polynomial approximations for densities of states and spectral functions. *J. Comp. Phys.*, **124**, 115–130, 1996.
- [127] P. SINDZINGRE, G. MISGUICH, C. LHUILLIER, B. BERNU, L. PIERRE, C. WALDTMANN, et H. U. EVERTS. Thermodynamic of the spin- $\frac{1}{2}$ Kagome antiferromagnet. unpublished, 1999.
- [128] R. R. P. SINGH, Z. WEIHONG, C. J. HAMER, et J. OITMAA. Dimer order with striped correlations in the $J_1 - J_2$ Heisenberg model. cond-mat/9904064, 1999.
- [129] M. SIQUEIRA, J. NYÉKI, B. P. COWAN, et J. SAUNDERS. Frustration by multiple spin exchange in 2D solid ^3He films. *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 2600–2603, 1997.
- [130] S. SUGAI, M. SATO, T. KOBAYASHI, J. AKIMITSU, ITO, H. TAKAGI, S. UCHIDA, S. HOSOYA, T. KAJITANI, et T. FUKUDA. High-energy spin excitations in the insulating phases of high- T_c superconducting cuprates and La_2NiO_4 . *Phys. Rev. B*, **42**, 1045–1047, 1990.
- [131] B. SUTHERLAND. Monte Carlo investigation of the resonating-valence-bond ground state and a lattice statistical model. *Phys. Rev. B*, **38**, 6855–6862, 1988.
- [132] B. SUTHERLAND. Systems with resonating-valence bond ground states : Correlations and excitations. *Phys. Rev. B*, **37**, 3786–3789, 1988.

- [133] N. SUZUKI et F. MATSUBARA. Phase diagrams of the $S = \frac{1}{2}$ quantum antiferromagnetic XY model on the triangular lattice in magnetic fields. *Phys. Rev. B*, **55**, 12331–12337, 1997.
- [134] H. TASAKI. Order and disorder in the resonating-valence-bond state. *Phys. Rev. B*, **40**, 9183–9191, 1989.
- [135] D. J. THOULESS. Exchange in solid ^3He and the Heisenberg hamiltonian. *Proc. Phys. Soc. London*, **86**, 893–904, 1965.
- [136] K. TOTSUKA. Magnetization plateau in the $S = \frac{1}{2}$ Heisenberg spin chain with next-nearest-neighbor and alternating nearest-neighbor interactions. *Phys. Rev. B*, **57**, 3454–3465, 1998.
- [137] A. E. TRUMPER, L. O. MANUEL, C. J. GAZZA, et H.A. CECCATTO. Schwinger-Boson Approach to Quantum Spin Systems : Gaussian Fluctuations in the "Natural" Gauge. *Phys. Rev. Lett.*, **78**, 2216–2219, 1997.
- [138] J. VILLAIN, R. BIDAUX, J. P. CARTON, et R. CONTE. Order as an effect of disorder. *J. Phys. Fr.*, **41**, 1263–1272, 1980.
- [139] C. WALDTMANN. *Numerische untersuchungen des Heisenberg-antiferromagneten auf dem Kagomé-gitter und einer Kagomé-ähnlichen leiter*. Thèse de doctorat, Universität Hannover, Allemagne, 1999.
- [140] C. WALDTMANN, H. U. EVERTS, B. BERNU, C. LHUILLIER, P. SINDZINGRE, P. LECHEMINANT, et L. PIERRE. First excitations of the antiferromagnetic Heisenberg antiferromagnet on the Kagome lattice. *Eur. Phys. J. B*, **2**, 501–507, 1998.
- [141] X. G. WEN. Vacuum degeneracy of chiral spin states in compactified space. *Phys. Rev. B*, **40**, 7387–7390, 1989.
- [142] X. G. WEN. Mean-field theory of spin-liquid states with finite energy gap and topological orders. *Phys. Rev. B*, **44**, 2664–2672, 1991.
- [143] X. G. WEN et Q. NIU. Ground-state degeneracy of the fractional quantum Hall states in the presence of a random potential and on high-genus Riemann surfaces. *Phys. Rev. B*, **41**, 9377–9396, 1990.
- [144] X. G. WEN, F. WILCZEK, et A. ZEE. Chiral spin states and superconductivity. *Phys. Rev. B*, **39**, 11413–11423, 1989.
- [145] S. R. WHITE. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. B*, **48**, 10345–10356, 1993.
- [146] M. E. ZHITOMIRSKY et K. UEDA. Valence-bond crystal phase of a frustrated spin- $\frac{1}{2}$ square-lattice antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, **54**, 9007–9010, 1996.

Publications

Multi-Spin exchange in solid ^3He on graphite : from ferromagnetism to spin liquid.

G. MISGUICH, B. BERNU, C. LHUILLIER et C. WALDTMANN

Phys. Rev. Lett. **81**, 1098-1101, 1998

The multiple-spin exchange phase diagram on the triangular lattice : Schwinger-boson analysis.

G. MISGUICH, B. BERNU et C. LHUILLIER

Journal of Low Temperature Physics **110** (1/2), 327-331, 1998

Geometrically frustrated quantum antiferromagnets and spin liquids.

C. LHUILLIER, B. BERNU et G. MISGUICH

Recent progress in many-body theories, World Scientific, 1998

Éditeurs : D. NEILSON et R. F. BISHOP.

Spin-liquid phase of the multiple-spin exchange hamiltonian on the triangular lattice.

G. MISGUICH, C. LHUILLIER, B. BERNU et C. WALDTMANN

Phys. Rev. B, **60**, 1064-1074, (1999)

Thermodynamics of the Kagome antiferromagnet.

P. SINDZINGRE, G. MISGUICH, C. LHUILLIER, L. PIERRE, C. WALDTMANN et H. U. EVERTS

En préparation

Résumé

L'échange multiple décrit de manière effective les propriétés magnétiques d'un système de fermions quasiment localisés. Nous considérons ce modèle pour des spins $\frac{1}{2}$ sur le réseau triangulaire avec des processus à 2, 3, 4, 5 et 6 particules. Cet hamiltonien est aujourd'hui reconnu comme étant un bon candidat pour décrire le magnétisme nucléaire des films d' ^3He solide adsorbés sur du graphite. Nous l'étudions par diagonalisations exactes sur des échantillons jusqu'à 36 sites. Dans un large domaine de paramètres, l'analyse des effets de taille finie sur les énergies propres, la structure des spectres et les fonctions de corrélation amènent à conclure que les fluctuations quantiques détruisent l'ordre magnétique à température nulle. L'état fondamental est caractérisé par une longueur de corrélation finie, c'est un *liquide de spins* où les excitations magnétiques possèdent un gap. Nous calculons la chaleur spécifique et trouvons une entropie importante à basse température, en accord avec les mesures expérimentales. La réponse à un champ extérieur révèle un plateau d'aimantation à $M/M_{\text{sat}} = \frac{1}{2}$. Nous discutons les conditions d'apparition d'un tel plateau et les comparons avec les situations, mieux comprises, de la dimension un ainsi que celle de spins classiques. Pour le plus grand système étudié (36 sites), le fondamental possède une quasi-dégénérescence quatre. Cette dégénérescence ne s'explique pas par une brisure spontanée de symétrie mais elle conduit à une interprétation topologique. Nous suggérons une image de "resonating valence-bond" (RVB) à courte portée pour la fonction d'onde du fondamental et discutons du lien éventuel avec la phase de HALDANE et les états de type "valence-bond solid". Le modèle d'échange multiple sur le réseau triangulaire semble un des tous premiers exemples d'hamiltonien bidimensionnel de spins $\frac{1}{2}$ dont le fondamental ne brise aucune de symétrie à température nulle.

Abstract

The multiple-spin exchange model is an effective description of the magnetic properties of quasilocalized fermions. We study this model for spins $\frac{1}{2}$ on a triangular lattice and include exchanges involving 2, 3, 4, 5 and 6 particles. This hamiltonian is now recognized as relevant to the description of the nuclear magnetism of solid ^3He films adsorbed on graphite. Our analysis is based on exact diagonalizations of finite size systems up to 36 sites. In a large parameter range, finite size effects, structures of spectra and correlation functions lead to the conclusion that quantum fluctuations destroy magnetic long-range order at zero temperature. The ground state is characterized by a finite correlation length; it is a *spin-liquid* with gapped magnetic excitations. We compute the heat capacity and find that the low-temperature entropy is significant, in agreement with experimental data. We investigate the response to an external field, and find a magnetization plateau at $M/M_{\text{sat}} = \frac{1}{2}$. We discuss the conditions for such a plateau to appear and compare them to the better understood situations of one-dimensional systems and of classical spins. The largest sample we studied (36 sites) has a nearly fourfold degenerate ground state. This degeneracy turns out to be incompatible with a spontaneous symmetry breaking but leads us to a topological interpretation. We propose a short-ranged "resonating valence-bond" (RVB) picture of the ground state wave-function and discuss the possible relation to the HALDANE phase or "valence-bond solid" states. The multiple-spin exchange model on the triangular lattice seems to be one of the very first examples of two-dimensional spin $\frac{1}{2}$ model without any broken symmetry at zero temperature.