

**Thèse de doctorat**  
Spécialité Physique théorique

---

**De la frustration et du désordre  
dans les chaînes et les échelles  
de spins quantiques**

---

Arthur LAVARELO

*soutenue le 19 juillet 2013*

*Composition du Jury :*

Rapporteurs	Andreas LÄUCHLI Tommaso ROSCILDE	Université d'Innsbrück ENS Lyon
Examineurs	Matthieu MAMBRINI Philippe MENDELS Cécile MONTHUS	Université Paul Sabatier Université Paris-Sud CEA Saclay
Directeur de thèse	Guillaume ROUX	Université Paris-Sud



*« L'avenir appartient à ceux qui se lèvent tôt. »*

## Résumé

Dans les systèmes de spins quantiques, la frustration et la basse dimensionnalité génèrent des fluctuations quantiques et donnent lieu à des phases exotiques. Cette thèse étudie un modèle d'échelle de spins avec des couplages frustrants le long des montants, motivé par les expériences sur le cuprate  $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$ . Dans un premier temps, on présente une méthode variationnelle originale pour décrire les excitations de basse énergie d'une seule chaîne frustrée. Le diagramme de phase de deux chaînes couplées est ensuite établi à l'aide de méthodes numériques. Le modèle exhibe une transition de phase quantique entre une phase dimérisée et une phase à liens de valence résonnants (RVB). La physique de la phase RVB et en particulier l'apparition de l'incommensurabilité sont étudiées numériquement et par un traitement en champ moyen.

On étudie ensuite les effets d'impuretés non-magnétiques sur la courbe d'aimantation et la loi de Curie à basse température. Ces propriétés magnétiques sont tout d'abord discutées à température nulle à partir d'arguments probabilistes. Puis un modèle effectif de basse énergie est dérivé dans la théorie de la réponse linéaire et permet de rendre compte des propriétés magnétiques à température finie.

Enfin, on étudie l'effet d'un désordre dans les liens, sur une seule chaîne frustrée. La méthode variationnelle, introduite dans le cas non-désordonné, donne une image à faible désordre de l'instabilité de la phase dimérisée, qui consiste en la formation de domaines d'Imry-Ma délimités par des spinons localisés. Ce résultat est finalement discuté à la lumière de la renormalisation dans l'espace réel à fort désordre.

**Mots-clés :** électrons fortement corrélés, magnétisme quantique, chaînes de spins, frustration, désordre.

---

## Abstract

In quantum spins systems, frustration and low-dimensionality generate quantum fluctuations and give rise to exotic quantum phases. This thesis studies a spin ladder model with frustrating couplings along the legs, motivated by experiments on cuprate  $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$ . First, we present an original variational method to describe the low-energy excitations of a single frustrated chain. Then, the phase diagram of two coupled chains is computed with numerical methods. The model exhibits a quantum phase transition between a dimerized phase and resonating valence bound (RVB) phase. The physics of the RVB phase and in particular the onset of incommensurability are studied numerically and by a mean-field treatment.

Afterwards, we study the effects of non-magnetic impurities on the magnetization curve and the Curie law at low temperature. These magnetic properties are first discussed at zero temperature with probability arguments. Then a low-energy effective model is derived within the linear response theory and is used to explain the magnetic properties at finite temperature.

Eventually, we study the effect of bonds disorder, on a single frustrated chain. The variational method introduced in the non-disordered case gives a low disorder picture of the dimerized phase instability, which consists in the formation of Imry-Ma domains delimited by localized spinons. This result is finally discussed in the light of the strong disorder real space renormalization.

**Keywords :** strongly correlated electrons, quantum magnetism, spin chains, frustration, disorder.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>9</b>
<b>1 Magnétisme quantique à une dimension</b>	<b>11</b>
1.1 Chaîne XXZ . . . . .	12
1.1.1 Transformation de Jordan-Wigner . . . . .	13
1.1.2 Liquide de Luttinger . . . . .	14
1.1.3 Ansatz de Bethe . . . . .	15
1.2 Échelle à deux montants . . . . .	15
1.2.1 Approche perturbative . . . . .	16
1.2.2 Phase liquide de spin . . . . .	19
1.3 Chaîne frustrée . . . . .	19
1.3.1 Modèle classique . . . . .	20
1.3.2 Modèle quantique . . . . .	20
1.3.3 Chaîne de Majumdar-Ghosh . . . . .	21
1.4 Contexte expérimental . . . . .	22
1.4.1 Observations sur quelques composés . . . . .	22
1.4.2 Le composé $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$ . . . . .	24
<b>2 Excitations élémentaires dans la chaîne de Majumdar-Ghosh</b>	<b>27</b>
2.1 Approche variationnelle . . . . .	27
2.2 Dynamique d'un seul spinon . . . . .	29
2.2.1 Relation de dispersion au point Majumdar-Ghosh . . . . .	29
2.2.2 Incommensurabilité . . . . .	30
2.2.3 Évolution de la relation de dispersion . . . . .	31
2.3 États à deux spinons . . . . .	33
2.3.1 Méthode variationnelle . . . . .	33
2.3.2 Évolution du spectre . . . . .	36
2.4 Effet d'un terme de dimérisation explicite . . . . .	37
2.4.1 Confinement au voisinage d'une impureté . . . . .	37
2.4.2 États à deux spinons . . . . .	38
<b>3 Effet de la frustration dans les échelles</b>	<b>41</b>
3.1 Diagramme de phase . . . . .	41
3.2 Nature de la transition . . . . .	42
3.2.1 Paramètre d'ordre . . . . .	43
3.2.2 Entropie d'intrication . . . . .	44

3.2.3	Spectres d'excitations . . . . .	45
3.3	Dispersion des magnons et incommensurabilité dans la phase RVB . . . . .	47
3.3.1	Calcul perturbatif de la relation de dispersion . . . . .	48
3.3.2	Approximation de champ moyen . . . . .	48
3.3.3	Fonctions de corrélation et facteur de structure . . . . .	50
3.3.4	Gap de spin et longueurs de corrélation . . . . .	56
3.4	Thermodynamique . . . . .	59
<b>4</b>	<b>Impuretés non-magnétiques dans les échelles</b>	<b>63</b>
4.1	Résultats exacts sur un réseau bipartite à température nulle . . . . .	63
4.1.1	Distribution du spin total . . . . .	63
4.1.2	Loi de Curie . . . . .	65
4.1.3	Effets des coupures . . . . .	66
4.2	Modèle effectif de basse énergie . . . . .	69
4.2.1	Hamiltonien effectif . . . . .	69
4.2.2	Calcul de la susceptibilité dans l'approximation de champ moyen .	70
4.2.3	Aimantation induite par une impureté . . . . .	71
4.2.4	Interaction effective entre impuretés . . . . .	73
4.3	Modèle de dimères aléatoires . . . . .	76
4.3.1	Courbe d'aimantation . . . . .	76
4.3.2	Distribution des couplages . . . . .	77
4.4	Constante de Curie . . . . .	80
4.4.1	Modèle de dimères aléatoires . . . . .	80
4.4.2	Diagonalisation exacte . . . . .	81
4.4.3	Comportement universel à basse température . . . . .	81
4.5	Courbe d'aimantation à bas champ . . . . .	83
4.5.1	Température nulle . . . . .	83
4.5.2	Température finie . . . . .	84
<b>5</b>	<b>Désordre dans la chaîne de Majumdar-Ghosh</b>	<b>87</b>
5.1	Condition de Majumdar-Ghosh généralisée . . . . .	88
5.2	Localisation d'un spinon . . . . .	88
5.2.1	Modèle effectif et localisation . . . . .	89
5.2.2	Méthode de Dyson-Schmidt . . . . .	90
5.2.3	Développement de faible désordre . . . . .	91
5.2.4	Argument de Lifshitz pour la densité d'état . . . . .	93
5.3	Transition vers une phase paramagnétique . . . . .	95
5.4	Dimérisation aléatoire . . . . .	96
5.4.1	Confinement d'un spinon . . . . .	97
5.4.2	Argument d'Imry-Ma et formation de domaines . . . . .	98
5.4.3	Statistique des domaines . . . . .	100
5.5	Lien avec la renormalisation à fort désordre . . . . .	101
	<b>Conclusion</b>	<b>105</b>

<b>A</b>	<b>Méthodes numériques</b>	<b>107</b>
A.1	Utilisation des symétries . . . . .	107
A.2	Algorithme de Lanczos . . . . .	108
A.3	Groupe de renormalisation de la matrice densité . . . . .	109
A.3.1	Algorithme . . . . .	109
A.3.2	Entropie d'intrication . . . . .	111
<b>B</b>	<b>Bases d'états à liens de valence</b>	<b>113</b>
<b>C</b>	<b>Renormalisation dans l'espace réel à fort désordre</b>	<b>117</b>
C.1	Règles de décimation . . . . .	117
C.2	Chaîne antiferromagnétique aléatoire . . . . .	119
C.3	Chaîne ferromagnétique et antiferromagnétique aléatoire . . . . .	120



# Introduction

Un solide est constitué d'atomes, espacés régulièrement, qui interagissent par le biais des électrons de leur couche externe. La théorie des bandes décrit la délocalisation de la fonction d'onde d'un électron sur le réseau atomique et permet de bien expliquer les propriétés physiques de nombreux matériaux métalliques, isolants ou semi-conducteurs. Mais cette théorie néglige les interactions entre électrons, dont les effets parfois prépondérants, peuvent donner lieu à des propriétés physiques exceptionnelles, comme par exemple le magnétisme des isolants de Mott, la supraconductivité à haute température, ou encore l'effet Hall quantique fractionnaire. L'étude de ces propriétés constitue le domaine de la physique des électrons fortement corrélés.

Un des modèles les plus simples qui prend en compte les interactions entre électrons, est le modèle de Hubbard, dans lequel les électrons peuvent se déplacer sur un réseau atomique et n'interagissent que lorsqu'ils se trouvent sur le même site. Cette interaction est une façon approchée de décrire l'interaction Coulombienne, écrantée par les autres électrons de valence. Le hamiltonien du modèle de Hubbard s'écrit :

$$\mathcal{H} = -t \sum_{(i,j)} \sum_{\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (1)$$

où  $(i, j)$  indique que la somme est restreinte aux sites  $i$  et  $j$  connectés,  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  représente le spin d'un électron,  $t$  est l'intégrale de saut d'un site à l'autre,  $U > 0$  mesure la répulsion sur site,  $c^{\dagger}$  et  $c$  sont les opérateurs de création et d'annihilation d'un électron. Ce modèle a été largement étudié et présente un diagramme des phases très riche. En particulier, lorsque le nombre d'électrons est égal au nombre de sites et que l'interaction est suffisante ( $U \gg t$ ), chaque électron est localisé sur un site et le système est dans une phase isolante, dite isolant de Mott. Cependant, si deux électrons voisins ont des spins antiparallèles, ils peuvent momentanément passer sur le même site. Ce gain d'énergie cinétique pour des spins antiparallèles se traduit par une interaction antiferromagnétique, dite interaction d'échange. Plus précisément, le traitement au deuxième ordre en  $t/U$  de la théorie des perturbations de la partie cinétique du hamiltonien, conduit à un hamiltonien effectif, qui ne fait plus apparaître que le spin des électrons :

$$\mathcal{H} = \frac{4t^2}{U} \sum_{(i,j)} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2)$$

où  $\mathbf{S}_i$  est le spin de l'électron localisé sur le site  $i$ . C'est le hamiltonien de Heisenberg ! Les isolants de Mott sont en général des oxydes de métaux de transition. La présence d'un anion tel que  $O^{2-}$ , entre deux sites, donne lieu à un mécanisme similaire à l'échange cinétique, où les électrons de valence peuvent effectuer des sauts virtuels sur les orbitales

de l'anion. L'interaction résultante, dite de superéchange, peut être aussi bien antiferromagnétique que ferromagnétique.

Malgré son apparente simplicité, le hamiltonien de Heisenberg possède une physique extrêmement riche. La nature du fondamental est très sensible à la dimension et à la géométrie du réseau. Sur un réseau bipartite, des moments magnétiques classiques s'organisent selon un ordre antiferromagnétique (ordre de Néel). Pour des spins  $1/2$ , c'est aussi le cas à deux et trois dimensions, mais à une dimension, les fluctuations quantiques détruisent l'ordre à longue portée et le fondamental change de nature (c'est un liquide de Luttinger). Par ailleurs, si l'on considère des interactions aux seconds voisins ou si la géométrie du réseau fait apparaître des boucles impaires, le fondamental classique n'est plus antiferromagnétique. On parle alors de frustration. Les grandes fluctuations quantiques dues à la frustration donnent généralement lieu à des transitions de phases quantiques vers de nouveaux états de la matière tels que des liquides de spins (RVB : *resonating valence bond state*) ou des cristaux de dimères (VBS : *valence bond solid state*).

Enfin, les solides ne sont généralement pas parfaits, ils contiennent souvent des défauts cristallins ou des impuretés. S'il est parfois anodin, le désordre peut aussi complètement changer les propriétés des matériaux. Par exemple, dans certains matériaux, les impuretés s'organisent à basse température. Elles peuvent même générer de nouveaux états magnétiques qui présentent notamment une dynamique extrêmement lente, les verres de spins. Expérimentalement, les impuretés servent aussi de sonde : l'introduction d'impuretés dans les systèmes fortement corrélés permet justement de mettre en évidence ces corrélations et d'en observer les caractéristiques.

Cette thèse met en évidence plusieurs effets de la frustration et du désordre dans des systèmes de spins unidimensionnels, notamment les échelles de spins. Le chapitre 1 présente quelques théorèmes généraux sur le magnétisme localisé ainsi que les principaux modèles à une dimension. La thèse s'articule autour du modèle de l'échelle à deux montants avec des couplages aux seconds voisins le long des montants. Le diagramme de phase de ce système frustré est étudié au chapitre 3 et présente deux phases :

- une phase dimérisée (VBS) dont les excitations élémentaires correspondent essentiellement à celles d'une seule chaîne et sont étudiées dans le chapitre 2,
- une phase RVB dont les excitations élémentaires sont étudiées dans le chapitre 3.

Le chapitre 4 est consacré à l'étude d'impuretés non-magnétiques dans la phase RVB, dont la physique de basse énergie est décrite par un hamiltonien désordonné avec des couplages frustrants au-delà des premiers voisins. Un cas particulier de ce type de hamiltonien est étudié au chapitre 5. Les méthodes numériques utilisées tout au long de cette thèse sont détaillées dans l'annexe A.

# Chapitre 1

## Magnétisme quantique à une dimension

Le modèle de Heisenberg rend compte des interactions d'échange et de superéchange dans les isolants de Mott. De manière générale, le hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H} = \sum_{(i,j)} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j . \quad (1.1)$$

Les couplages  $J_{ij}$  dépendent du réseau et de la forme des orbitales atomiques. Ils peuvent être ferromagnétiques ( $J < 0$ ) ou antiferromagnétiques ( $J > 0$ ), mais dans la suite on considèrera essentiellement des couplages antiferromagnétiques qui donnent lieu à une physique plus riche à cause de la frustration qui augmente les fluctuations quantiques. Les opérateurs de spin  $\mathbf{S}_i$  vérifient les relations de commutations<sup>1</sup>

$$[S_i^\alpha, S_j^\beta] = i\delta_{ij}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_i^\gamma , \quad (1.2)$$

où  $\alpha, \beta, \gamma$  représentent les composantes  $x, y, z$ ,  $\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecker et  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  le tenseur de Levi-Civita. Le hamiltonien se réécrit à l'aide des opérateurs  $S_j^\pm = S_j^x \pm iS_j^y$  :

$$\mathcal{H} = \sum_{(i,j)} J_{ij} \left[ \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right] . \quad (1.3)$$

Pour des moments magnétiques classiques, le fondamental s'ordonne de façon à satisfaire les couplages les plus importants. La théorie des ondes de spin, qui consiste à partir du fondamental classique et à considérer des excitations quantiques autour de ce fondamental, est généralement une bonne approximation à deux et trois dimensions ou pour des spins grands. Ici, nous allons étudier des systèmes unidimensionnels de spins 1/2. Les fluctuations quantiques sont alors prépondérantes et la théorie des ondes de spin s'écroule. D'après le théorème de Mermin-Wagner [60], il ne peut alors y avoir d'ordre magnétique à longue portée. De plus, la frustration générée par la compétition entre les différents termes du hamiltonien donne lieu à des phases exotiques.

---

1. Dans toute cette thèse, on prend  $\hbar = 1$  et  $k_B = 1$ .

### Théorème de Mermin-Wagner

- Il n’y a pas de brisure spontanée de symétrie continue à température finie, dans les systèmes de dimension inférieure ou égale à 2, avec des interactions à courte portée<sup>2</sup>.
- À température nulle, il n’y a pas de brisure spontanée de symétrie continue dans les systèmes à une dimension.

Le hamiltonien commute avec le spin total  $\mathbf{S}_{\text{tot}}$ , et les opérateurs  $\mathcal{H}$ ,  $\mathbf{S}_{\text{tot}}^2$  et  $S_{\text{tot}}^z$  forment un ensemble d’observables qui commutent. On peut donc diagonaliser  $\mathcal{H}$  dans les différents secteurs définis par les nombres quantiques  $S_{\text{tot}}$  et  $S_{\text{tot}}^z$ . Le théorème de Marshall [56, 49, 5] précise dans quel secteur chercher le fondamental.

**Théorème de Marshall** Pour un hamiltonien antiferromagnétique ( $\forall(i, j), J_{ij} \geq 0$ ) sur un réseau bipartite, de sous-réseaux  $A$  et  $B$  :

- l’état de plus basse énergie du secteur  $S_{\text{tot}}^z$  a un spin total  $S_{\text{tot}} = S_{\text{tot}}^z$  ;
- le fondamental se trouve dans le secteur de spin total  $S_{\text{tot}} = |N_A - N_B|/2$ , où  $N_A$  et  $N_B$  sont les nombres de sites appartenant respectivement aux sous-réseaux  $A$  et  $B$ .

Enfin, Lieb, Schultz, Mattis et Affleck ont relié la possibilité d’avoir une dégénérescence dans le niveau fondamental à la structure du spectre de basse énergie, selon que l’on considère une chaîne de spins entiers ou demi-entiers [50, 2, 25].

**Théorème de Lieb-Schultz-Mattis** Une chaîne de spins demi-entiers invariante par translation, avec des interactions isotropes à courte portée, ne peut exhiber que deux types de comportement à la limite thermodynamique :

- soit le spectre d’excitation est non-gappé,
- soit le spectre d’excitation est gappé ; dans ce cas, le fondamental est dégénéré et brise une symétrie discrète.

## 1.1 Chaîne XXZ

Considérons d’abord le cas strictement 1D de la chaîne antiferromagnétique, avec une éventuelle anisotropie dans la direction  $z$ . Le hamiltonien de ce système s’écrit

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{J_{xy}}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + J_z S_i^z S_{i+1}^z . \quad (1.4)$$

Dans la limite  $J_{xy} = 0$ , il s’agit du modèle d’Ising et dans la limite  $J_z = 0$ , du modèle XY.

---

2. Par interactions à courte portée, on entend des interactions qui décroissent exponentiellement ou plus rapidement avec la distance (comme des interactions aux seconds voisins, par exemple).

### 1.1.1 Transformation de Jordan-Wigner

On peut transformer les opérateurs de spins 1/2 en opérateurs fermioniques. Pour cela, on introduit des opérateurs  $c_j^\dagger$  et  $c_j$ , tels que :

$$\begin{aligned} S_j^+ &= c_j^\dagger e^{i\pi\phi_j} , \\ S_j^- &= e^{-i\pi\phi_j} c_j , \\ S_j^z &= c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} , \end{aligned} \tag{1.5}$$

où

$$\phi_j = \sum_{l < j} c_l^\dagger c_l .$$

On vérifie alors que  $c_j^\dagger$  et  $c_j$  satisfont les relations d'anticommutation fermioniques

$$\begin{aligned} \{c_i, c_j\} &= \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0 , \\ \{c_i, c_j^\dagger\} &= \delta_{ij} , \end{aligned} \tag{1.6}$$

si et seulement si les spins  $\mathbf{S}_i$  vérifient les relations de commutation canoniques (1.2). De plus, on fait la transformation  $c_i \rightarrow (-1)^i c_i$  si bien que le hamiltonien s'écrit alors en terme des opérateurs  $c_i^\dagger$  et  $c_i$

$$\mathcal{H} = \sum_i -\frac{J_{xy}}{2} (c_{i+1}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+1}) + J_z \left( c_i^\dagger c_i - \frac{1}{2} \right) \left( c_{i+1}^\dagger c_{i+1} - \frac{1}{2} \right) . \tag{1.7}$$

On a ainsi mappé la chaîne de spins 1/2 sur des fermions sans spin en interaction. Le secteur de spin  $S_{\text{tot}}^z$  et le nombre de fermions  $N$  sont reliés par

$$S_{\text{tot}}^z = N - \frac{L}{2} , \tag{1.8}$$

où  $L$  est la taille de la chaîne. Ainsi le secteur du fondamental  $S_{\text{tot}}^z = 0$  correspond au demi-remplissage.

La relation de dispersion à une particule est :

$$\omega_k = -J_{xy} \cos k . \tag{1.9}$$

En l'absence d'interactions ( $J_z = 0$ ), le fondamental du hamiltonien (1.7) est une mer de Fermi. Au demi-remplissage, le vecteur d'onde de Fermi est  $k_F = \pi/2$ . Les excitations élémentaires, représentées figure 1.1(a), sont la combinaison d'une particule d'impulsion  $k_1 \in [\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}]$  et d'un trou d'impulsion  $k_2 \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ . Par conséquent, la relation de dispersion d'une excitation particule-trou en fonction de l'impulsion totale  $K = k_1 - k_2$ , représentée figure 1.1(b) est un continuum

$$\varepsilon_{K,q} = \omega_{k_1} - \omega_{k_2} = 2J_{xy} \sin(K/2) \sin(q/2) , \tag{1.10}$$

où  $q = k_1 + k_2$  est restreint à l'intervalle  $[\pi - K, \pi + K]$ . Pour  $q = \pi \pm K$ , on obtient la branche inférieure  $\varepsilon_K = J_{xy} \sin(K)$  et pour  $q = \pi$ , la branche supérieure  $\varepsilon_K = 2J_{xy} \sin(K/2)$  qui se trouve dans un continuum à plusieurs excitations particule-trou.

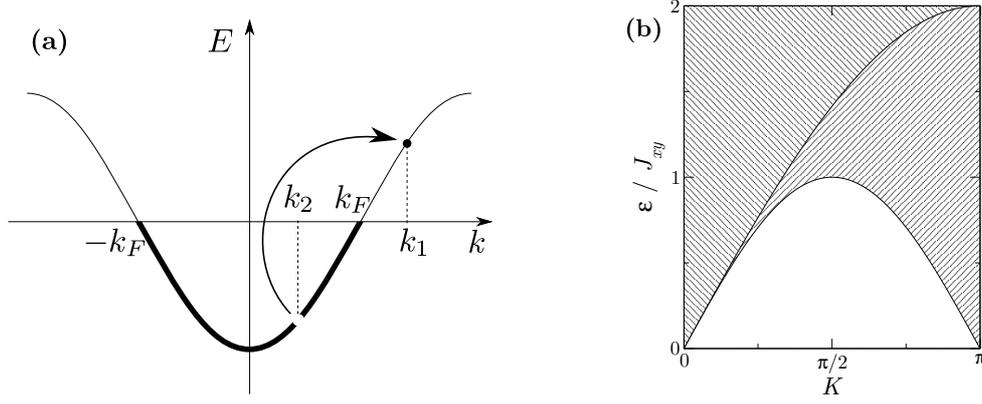


FIGURE 1.1 – (a) Excitation particule-trou dans la mer de Fermi. (b) Spectre de basse énergie de la chaîne XY au demi-remplissage.

### 1.1.2 Liquide de Luttinger

La physique de basse énergie du modèle (1.7) peut être étudiée par la technique de bosonisation, qui consiste à linéariser le spectre à une particule (1.9) autour du niveau de Fermi. Pour une description plus complète, on pourra se référer à [29] ou [62].

Pour  $J_z < J_{xy}$ , la théorie des champs décrivant les excitations de basse énergie du modèle (1.4) est la théorie du liquide de Luttinger :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\pi} \int dx \left[ uK (\pi\Pi(x))^2 + \frac{u}{K} (\nabla\Phi(x))^2 \right], \quad (1.11)$$

où les champs  $\Phi$  et  $\Pi$  vérifient les relations de commutation canoniques

$$[\Phi(x), \Pi(y)] = i\delta(x - y). \quad (1.12)$$

Dans la limite continue, les spins s'expriment en fonction des champs  $\Phi$  et  $\Pi$  :

$$\begin{aligned} S^+(x = ja) &= \frac{S_j^+}{\sqrt{a}} = \frac{e^{-i\theta(x)}}{\sqrt{2\pi a}} \left( (-1)^{\frac{x}{a}} + \cos 2\Phi(x) \right), \\ S^z(x = ja) &= \frac{S_j^z}{a} = -\frac{\nabla\Phi(x)}{\pi} + \frac{(-1)^{\frac{x}{a}}}{\pi a} \cos 2\Phi(x), \end{aligned} \quad (1.13)$$

où  $a$  est le pas de réseau et où le champ  $\theta$  est relié au champ  $\Pi$  par  $\pi\nabla\theta = \Pi$ . On peut utiliser ces expressions pour calculer les fonctions de corrélation à température nulle, ce qui donne :

$$\begin{aligned} \langle S_i^+ S_{i+r}^- \rangle &\sim \frac{(-1)^r}{r^{\frac{1}{2K}}}, \\ \langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle &\sim \frac{(-1)^r}{r^{2K}}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Les fonctions de corrélation décroissent en loi de puissance et il n'y a pas de gap ; on parle de quasi-ordre à longue portée.

Lorsque  $J_z > J_{xy}$ , la description par le liquide de Luttinger n'est plus valable. Le système est dans une phase gappée avec un ordre antiferromagnétique selon  $z$  : c'est la

phase d'Ising antiferromagnétique. Au point critique  $J_z = J_{xy}$ , la correction au modèle de Luttinger est marginale irrelevante et génère seulement des corrections logarithmiques. L'invariance par rotation impose que le paramètre de Luttinger  $K$  vaut  $1/2$  et les fonctions de corrélation s'écrivent :

$$\langle S_i^\alpha S_{i+r}^\alpha \rangle \sim \frac{(-1)^r}{r} \sqrt{\ln r}. \quad (1.15)$$

### 1.1.3 Ansatz de Bethe

La chaîne XXZ est exactement soluble par l'ansatz de Bethe. Cette méthode consiste à étudier les déviations de spin par rapport à l'état totalement aligné  $|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle$ . Dans un secteur  $S_{\text{tot}}^z$  donné, il faut considérer  $L/2 - S_{\text{tot}}^z$  déviations. Le calcul dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 0$  permet d'obtenir le fondamental et son énergie. Le calcul dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = \pm 1$  donne les excitations élémentaires et la relation de dispersion [94]. Pour la chaîne de Heisenberg ( $J_z = J_{xy} = J$ ) la relation de dispersion s'écrit

$$\varepsilon_Q = -\frac{\pi}{2} J (\cos k_1 + \cos k_2), \quad (1.16)$$

où  $k_{1,2} \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]^3$  et  $Q = \pi - k_1 - k_2$  est l'impulsion totale. Remarquablement, ce spectre (représenté sur figure 1.2) est à un facteur  $\pi/2$  près, celui obtenu au point XY ( $J_z = 0$ ) pour une excitation particule-trou, c'est-à-dire un continuum à deux particules libres. En effet, les excitations élémentaires de la chaîne de Heisenberg se décomposent en deux excitations fractionnaires de spin  $1/2$ , appelées spinons. Ces spinons ne sont pas des particules libres, mais ceci reste caché dans la densité d'états et la relation de dispersion est celle de particules libres [89, 29].

Les états propres obtenus par l'ansatz de Bethe sont difficiles à manipuler et ne permettent pas de calculer directement les fonctions de corrélation. Cependant, comme la forme asymptotique des fonctions de corrélation est donnée par les équations (1.13), l'ansatz de Bethe peut simplement être utilisé pour calculer des grandeurs thermodynamiques et en extraire les paramètres  $u$  et  $K$  du liquide de Luttinger. Pour la chaîne XXZ, l'ansatz de Bethe donne l'expression analytique du paramètre de Luttinger :

$$K = \frac{\pi/2}{\pi - \arccos(J_z/J_{xy})}. \quad (1.17)$$

Dans la suite, on ne considère que des couplages isotropes, c'est-à-dire  $J_z = J_{xy}$ .

## 1.2 Échelle à deux montants

À deux dimensions, le modèle de Heisenberg possède un ordre antiferromagnétique à longue portée à température nulle. À une dimension, il n'y a pas de brisure spontanée de la symétrie continue  $SU(2)$  (théorème de Mermin-Wagner) et l'ordre devient un quasi-ordre avec une décroissance algébrique des fonctions de corrélation. Que se passe-t-il alors lorsque l'on couple plusieurs chaînes? C'est le problème des échelles de spins. Pour un nombre pair de montants, le quasi-ordre à longue portée est détruit quel que soit le

---

3. Par rapport à la partie 1.1.1, on a fait le changement de variable  $k_1 \rightarrow \pi - k_1$  de sorte que  $k_1$  et  $k_2$  jouent le même rôle.

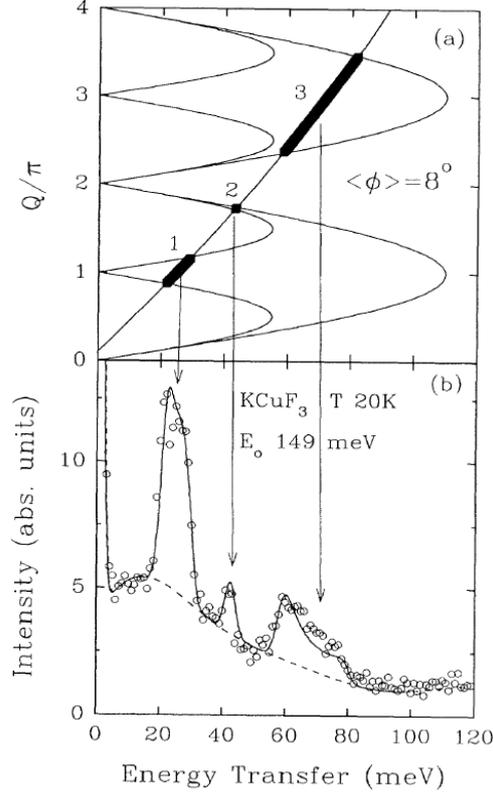


FIGURE 1.2 – (a) Spectre d’excitation de la chaîne de Heisenberg (b) Intensité de neutrons diffractée dans la direction  $\phi = 8^\circ$ , qui montre des pics de diffraction inélastique correspondants au spectre. (Figure issue de la référence [79].)

couplage transverse, alors que pour un nombre impair de montants, le système est à peu près équivalent à une chaîne simple de spins demi-entiers et reste critique [34].

On considère ici une échelle à deux montants, c’est-à-dire deux chaînes de Heisenberg couplées par un couplage transverse  $J_\perp$ , de longueur  $L$ , avec des conditions aux limites périodiques. Le hamiltonien de ce système s’écrit :

$$\mathcal{H} = J \sum_{j=1,2} \sum_i \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i+1,j} + J_\perp \sum_i \mathbf{S}_{i,1} \cdot \mathbf{S}_{i,2} . \quad (1.18)$$

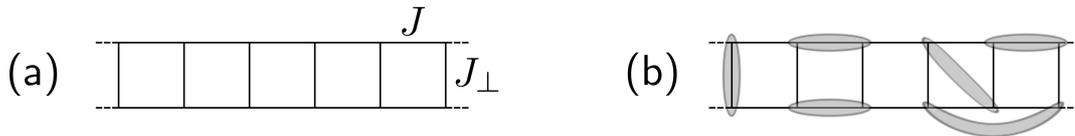


FIGURE 1.3 – (a) Modèle de l’échelle à deux montants. (b) Image qualitative du fondamental RVB.

### 1.2.1 Approche perturbative

Pour comprendre la nature de la phase de ce système, on peut considérer la limite  $J_\perp \gg J$ . Dans cette limite, le système se réduit simplement à des barreaux découplés. On

peut diagonaliser le hamiltonien sur chaque barreau : le fondamental est l'état singulet d'énergie  $-3J_{\perp}/4$ ,

$$|s\rangle = s^{\dagger}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) , \quad (1.19)$$

et les états excités sont les états triplets d'énergie  $J_{\perp}/4$ ,

$$|t_x\rangle = t_x^{\dagger}|0\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle) , \quad (1.20)$$

$$|t_y\rangle = t_y^{\dagger}|0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) , \quad (1.21)$$

$$|t_z\rangle = t_z^{\dagger}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) . \quad (1.22)$$

On a introduit les opérateurs de lien  $s^{\dagger}$  et  $t_{\alpha}^{\dagger}$  qui créent respectivement un singulet ou un triplet sur un barreau [73]. Dans la limite  $J_{\perp} \gg J$ , le fondamental  $|\psi_0\rangle$  est donc un produit de singulets

$$|\psi_0\rangle = |ss\dots s\rangle , \quad (1.23)$$

d'énergie

$$E_0^{(0)} = -\frac{3}{4}LJ_{\perp} . \quad (1.24)$$

Les premiers états excités  $|i, \alpha\rangle$  consistent à créer un triplet sur un barreau  $i$  :

$$|i, \alpha\rangle = t_{i,\alpha}^{\dagger}s_i|\psi_0\rangle = |ss\dots st_{\alpha}^{(i)}s\dots s\rangle \quad (1.25)$$

et leur énergie est

$$E_1^{(0)} = -\frac{3}{4}LJ_{\perp} + J_{\perp} . \quad (1.26)$$

Le premier niveau est donc  $3L$  fois dégénéré. Les niveaux supérieurs sont obtenus en créant des triplets supplémentaires, chacun coûtant une énergie  $J_{\perp}$ .

Partant de cette limite, le couplage  $J$  peut être traité perturbativement [9]. Pour cela, il est pratique de se placer dans la base singulet-triplets sur chaque barreau. Les opérateurs de spins s'expriment en seconde quantification dans cette base :

$$\begin{aligned} S_1^{\alpha} &= \frac{1}{2} \left( s^{\dagger}t_{\alpha} + t_{\alpha}^{\dagger}s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_{\beta}^{\dagger}t_{\gamma} \right) , \\ S_2^{\alpha} &= \frac{1}{2} \left( -s^{\dagger}t_{\alpha} - t_{\alpha}^{\dagger}s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}t_{\beta}^{\dagger}t_{\gamma} \right) . \end{aligned} \quad (1.27)$$

On impose que les opérateurs de lien vérifient les relations de commutation bosoniques :

$$\begin{aligned} [s, s^{\dagger}] &= 1 \\ [t_{\alpha}, t_{\beta}^{\dagger}] &= \delta_{\alpha\beta} \\ [s, t_{\alpha}^{\dagger}] &= 0 . \end{aligned} \quad (1.28)$$

Comme il y a exactement un singulet ou triplet sur chaque barreau, il faut de plus imposer la contrainte :

$$s^{\dagger}s + t_{\alpha}^{\dagger}t_{\alpha} = 1 , \quad (1.29)$$

avec une somme sur l'indice répété  $\alpha$ . On vérifie alors que les opérateurs de spin satisfont les relations de commutation canoniques (1.2). Le hamiltonien se réécrit à l'aide des opérateurs de lien :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 , \quad (1.30)$$

avec

$$\mathcal{H}_0 = J_\perp \sum_i \left( -\frac{3}{4} s_i^\dagger s_i + \frac{1}{4} t_{i\alpha}^\dagger t_{i\alpha} \right) , \quad (1.31)$$

$$\mathcal{H}_1 = \frac{J}{2} \sum_i \left( t_{i\alpha}^\dagger t_{i+1\alpha} s_{i+1}^\dagger s_i + t_{i\alpha}^\dagger t_{i+1\alpha}^\dagger s_{i+1} s_i + \text{h.c.} \right) , \quad (1.32)$$

$$\mathcal{H}_2 = \frac{J}{2} \sum_i (\delta_{\alpha\beta} - 1) \left( t_{i\alpha}^\dagger t_{i+1\alpha}^\dagger t_{i+1\beta} t_{i\beta} - t_{i\alpha}^\dagger t_{i+1\beta}^\dagger t_{i+1\alpha} t_{i\beta} \right) . \quad (1.33)$$

Bien sûr,  $\mathcal{H}$  commute avec la contrainte (1.29) et donc conserve le nombre d'excitations (singulet ou triplets) sur chaque barreau.

Appliquons maintenant la théorie des perturbations au niveau fondamental et aux premiers niveaux excités.  $\mathcal{H}_0$  est le hamiltonien non-perturbé et  $\mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2$  est la perturbation. Calculons d'abord la correction à l'énergie  $E_0$  du fondamental  $|\psi_0\rangle$ .  $\mathcal{H}_2$  appliqué à  $|\psi_0\rangle$  donne 0 et  $\mathcal{H}_1$  crée deux triplets sur deux barreaux voisins. On obtient finalement au deuxième ordre :

$$E_0^{(2)} = -\frac{3}{4} L J_\perp - \frac{3}{8} \frac{J_\perp^2}{J_\perp} L . \quad (1.34)$$

Calculons maintenant la correction sur l'énergie des premiers états excités, c'est-à-dire les états contenant un seul triplet, en appliquant la théorie des perturbations pour un niveau dégénéré. Là encore,  $\mathcal{H}_2$  appliqué aux états à un triplet donne 0, mais  $\mathcal{H}_1$  va partiellement lever la dégénérescence entre premiers états excités. Il faut donc diagonaliser la restriction de  $\mathcal{H}_1$  au sous-espace généré par les états  $|i, \alpha\rangle$ . Il suffit pour cela de passer en transformée de Fourier :

$$|k, \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{ikj} |j, \alpha\rangle , \quad (1.35)$$

et alors

$$\mathcal{H}_1 |k, \alpha\rangle = J \cos(k) |k, \alpha\rangle , \quad (1.36)$$

d'où la correction au premier ordre

$$E_1^{(1)}(k) = -\frac{3}{4} L J_\perp + J_\perp + J \cos k . \quad (1.37)$$

Cette énergie est encore 6 fois dégénérée ( $|\pm k, \alpha\rangle$  avec  $\alpha = x, y, z$ ). A priori, la correction du deuxième ordre s'obtient en diagonalisant la restriction au sous-espace dégénéré de l'opérateur

$$U_k = \mathcal{H}_1 \left( \sum_{|\psi_n\rangle \neq |\pm k, \alpha\rangle} \frac{|\psi_n\rangle \langle \psi_n|}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}} \right) \mathcal{H}_1 , \quad (1.38)$$

où les  $|\psi_n\rangle$  désignent les états propres de  $\mathcal{H}_0$  et les  $E_n^{(0)}$ , leurs énergies respectives. Cependant cet opérateur ne lève pas la dégénérescence :

$$U_k |\pm k, \alpha\rangle = -\frac{3J^2}{8J_\perp} (L - 2) |\pm k, \alpha\rangle , \quad (1.39)$$

d'où la correction au deuxième ordre :

$$E_1^{(2)}(k) = -\frac{3}{4}LJ_\perp + J_\perp + J \cos k - \frac{3J^2}{8J_\perp}(L-2). \quad (1.40)$$

On en déduit la relation de dispersion des magnons :

$$\omega_k \simeq J_\perp + \frac{3J^2}{4J_\perp} + J \cos k. \quad (1.41)$$

Les états d'énergie supérieure sont des excitations à plusieurs magnons, qui peuvent former des états liés. La forme du continuum à plusieurs magnons dans les échelles est étudiée dans la référence [8].

## 1.2.2 Phase liquide de spin

L'image de la phase à fort  $J_\perp$  est donc un produit de singulets où les excitations de basse énergie peuvent être vues comme des triplets qui sautent d'un barreau à l'autre (magnons). En fait, le système reste dans cette phase gappée dite *rung-singlet*, quel que soit  $J_\perp > 0$ . L'image du fondamental à  $J_\perp \lesssim J$ , schématisée figure 1.3(b), est une superposition de pavages de singulets à petite distance, qui donne lieu à des corrélations à courte portée [87]. Ce type d'état liquide de spin est appelé état *resonating valence bond* (RVB). À petit  $J_\perp/J$ , les études numériques ont montré que le gap s'ouvre linéairement  $\Delta \sim 0.4J_\perp/J$ , avec des corrections logarithmiques [32, 45].

## 1.3 Chaîne frustrée

Une autre façon de coupler deux chaînes est de faire une chaîne zigzag, c'est-à-dire une chaîne avec des interactions aux seconds voisins. Le hamiltonien de ce système s'écrit :

$$\mathcal{H} = \sum_i J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}. \quad (1.42)$$

La particularité de ce modèle est qu'il présente de la frustration. On note  $L$ , la longueur de la chaîne.



FIGURE 1.4 – (a) Représentations de la chaîne frustrée. (b) Allure du fondamental classique.

### 1.3.1 Modèle classique

Pour commencer, considérons des spins classiques ( $S \gg 1$ ). On peut réécrire l'énergie du système classique dans l'espace de Fourier :

$$E = \sum_k J_k \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_{-k} , \quad (1.43)$$

où

$$J_k = 2J_1 \cos k + 2J_2 \cos 2k , \quad (1.44)$$

$$\mathbf{S}_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{ikj} \mathbf{S}_j . \quad (1.45)$$

Il faut minimiser l'énergie  $E$  avec la contrainte  $\mathbf{S}_i^2 = 1$  pour tout  $i$ . Étant donnée l'invariance par translation, on peut étudier le problème sous la contrainte plus faible :

$$\sum_i \mathbf{S}_i^2 = \sum_k \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_{-k} = L . \quad (1.46)$$

Il s'agit donc de minimiser  $J_k$ . Il faut distinguer deux cas :

- si  $J_2 \leq J_1/4$ , alors  $J_k$  est minimum en  $q = \pm\pi$  et le fondamental est antiferromagnétique ;
- si  $J_2 > J_1/4$ , alors  $J_k$  est minimum en

$$q = \pm \arccos \left( -\frac{J_1}{4J_2} \right) , \quad (1.47)$$

et le fondamental est une hélice avec un vecteur d'onde incommensurable  $q$ , schématisée figure 1.4(b).

Bien sûr, ce résultat n'est pas du tout valable pour des spins 1/2, mais il permet tout de même de mettre en évidence l'incommensurabilité engendrée par la frustration. De plus, on verra que le vecteur incommensurable de l'hélice classique apparaît dans la limite de fort couplage de l'échelle frustrée.

### 1.3.2 Modèle quantique

Dans le cas de spins 1/2, le système a été largement étudié par la théorie des champs [33, 88] et par des méthodes numériques (diagonalisation exacte [24] et DMRG [67, 17, 88]). Le système admet une transition de phase quantique en  $J_2^c \simeq 0.241J_1$ . La phase à  $J_2 < J_2^c$  est le quasi-ordre antiferromagnétique critique de la chaîne de Heisenberg. La phase à  $J_2 > J_2^c$  est une phase dimérisée et gappée qui brise la symétrie de translation  $\mathbb{Z}_2$ . Ce système est une très bonne illustration du théorème de Lieb-Schultz-Mattis, car il montre les deux cas possibles pour une chaîne de spins 1/2 : un fondamental non-dégénéré non-gappé ou un fondamental dégénéré gappé qui brise une symétrie discrète. Le paramètre d'ordre est la dimérisation le long de la chaîne :

$$D_{\text{chain}} = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle - \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i-1} \rangle . \quad (1.48)$$

Le gap  $\Delta$  et le paramètre d'ordre  $D_{\text{chain}}$  s'ouvrent exponentiellement à la transition

$$\Delta \propto D_{\text{chain}} \propto e^{-A \frac{J_1}{J_2 - J_2^c}}, \quad (1.49)$$

et décroissent exponentiellement quand  $J_2/J_1 \rightarrow +\infty$

$$\Delta \propto D_{\text{chain}} \propto e^{-B \frac{J_2}{J_1}}, \quad (1.50)$$

où  $A$  et  $B$  sont des constantes.

À cause du gap, les fonctions de corrélation décroissent exponentiellement dans la phase dimérisée. Le vecteur d'onde  $q$  des fonctions de corrélation devient incommensurable et la longueur de corrélation est minimale au point de Majumdar-Ghosh (MG)  $J_2 = J_1/2$ . Le comportement du gap et de  $q$  sont relativement en accord avec les prédictions de la théorie des champs à fort  $J_2$  [88]. Dans la limite  $J_2/J_1 \rightarrow +\infty$ , le système correspond à deux chaînes de Heisenberg de maille double faiblement couplées et  $q$  tend naturellement vers  $\pi/2$ . Enfin, à cause de la longueur de corrélation finie, l'incommensurabilité n'apparaît dans le facteur de structure qu'au point de Lifshitz  $J_2^L \simeq 0.52J_1$  (la même remarque peut être faite pour la chaîne de spins 1 [75, 30]). Pour une chaîne impaire, le point de Lifshitz est sensiblement différent :  $J_2^L \simeq 0.53J_1$ , comme on le démontre dans la partie 2.2.2.

### 1.3.3 Chaîne de Majumdar-Ghosh

Au point Majumdar-Ghosh (MG)  $J_2 = J_1/2 = J$ , le fondamental quantique prend une forme simple et peut être étudié exactement [54, 55]. En ce point, le hamiltonien peut se mettre sous la forme d'une somme de projecteurs :

$$\mathcal{H}_{\text{MG}} = J \sum_i (2\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2}) = \frac{3}{2} J \sum_i \left( P_i - \frac{1}{2} \right), \quad (1.51)$$

où

$$P_i = \frac{1}{3} (\mathbf{S}_{i-1} + \mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1})^2 - \frac{1}{4} \quad (1.52)$$

est le projecteur sur le sous-espace  $S_{\text{tot}} = 3/2$  de trois spins voisins  $i-1$ ,  $i$  et  $i+1$ . Par conséquent, le fondamental est obtenu en construisant un état où trois spins consécutifs sont toujours dans le secteur  $S_{\text{tot}} = 1/2$ . Un tel état  $|\text{MG}\rangle$  est un produit de singulets sur deux sites consécutifs :

$$|\text{MG}\rangle = |\cdots \bullet \bullet \bullet \bullet \bullet \bullet \cdots\rangle, \quad \text{où } |\bullet \bullet\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (1.53)$$

Bien sûr, il y a deux états de MG selon le sous-réseau sur lequel commencent les dimères. Ces deux états sont dégénérés pour des conditions aux limites périodiques. Remarquons qu'à taille finie, ils ne sont pas tout à fait orthogonaux : leur recouvrement vaut

$$\langle \text{MG} | \text{MG}' \rangle = - \left( -\frac{1}{2} \right)^{\frac{L}{2}-1}. \quad (1.54)$$

L'énergie de  $|\text{MG}\rangle$  ne dépend pas des conditions aux limites et vaut :

$$E_{\text{MG}} = -\frac{3}{4}LJ. \quad (1.55)$$

Un terme de dimérisation explicite  $\delta$  dans le hamiltonien permet de lever la dégénérescence :

$$\mathcal{H} = \sum_i J_1 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J_2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2} + (-1)^i \delta \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}. \quad (1.56)$$

Cette stabilisation de la dimérisation rend compte d'interactions entre chaînes (ou d'effets magnéto-élastiques). Ce hamiltonien a été étudié numériquement [17, 72] et par une approche variationnelle [76, 83] équivalente à celle présentée dans le chapitre 2. L'état de MG avec les dimères sur le sous-réseau correspondant à la dimérisation  $+\delta$  reste état propre le long de la ligne Shastry-Sutherland définie par  $\delta + 2J_2 = J_1$ . On le vérifiera plus tard, à l'aide de l'équation (5.3). De plus, au-delà de cette ligne, un vecteur d'onde incommensurable apparaît dans les fonctions de corrélation.

## 1.4 Contexte expérimental

En 1987, le prix Nobel de physique a récompensé la découverte des cuprates supraconducteurs. Ces matériaux possèdent des températures critiques jusqu'à  $T_c \sim 100K$ , très supérieures à celles des supraconducteurs métalliques. Les mécanismes à l'origine de la supraconduction dans ces matériaux ne sont toujours pas clairs et restent l'une des grandes questions de la physique actuelle. Les cuprates supraconducteurs sont des composés quasi-2D : les électrons supraconducteurs se déplacent dans des plans ( $\text{CuO}_2$ ), où le cuivre est dans son degré d'oxydation  $+II$ . Les ions  $\text{Cu}^{2+}$  ont une structure électronique en  $3d^9$  et possèdent donc un trou sur les orbitales  $d$  qui se comporte comme un spin  $1/2$ . En l'absence de dopage, le fort recouvrement des orbitales  $d_{x^2-y^2}$  avec les oxygènes fait de ces matériaux des isolants de Mott, antiferromagnétiques.

Il est possible de synthétiser des oxydes (de cuivre ou d'autres métaux de transition) qui possèdent plutôt une structure unidimensionnelle. Bien sûr, aucun matériau n'est rigoureusement 1D et ces composés possèdent généralement une mise en ordre 3D antiferromagnétique à basse température. Mais lorsque les couplages sont beaucoup plus grands dans une direction que dans les autres, le composé est alors bien modélisé par des chaînes ou des échelles de spins, sur une large gamme de températures. Ces matériaux possèdent des propriétés magnétiques peu communes et leur étude, expérimentale comme théorique, constitue un premier pas vers la compréhension des supraconducteurs haute  $T_c$ .

### 1.4.1 Observations sur quelques composés

Le composé  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$  (tout comme  $\text{Ca}_2\text{CuO}_3$ ) constitue une excellente réalisation de chaînes  $\text{CuO}$  découplées. Les mesures de susceptibilité magnétique sur ce composé et son dérivé  $\text{SrCuO}_2$  [63] sont conformes aux prédictions pour la chaîne antiferromagnétique [23]. Ces mesures prédisent une constante de couplage  $J \sim 2000K$  et une température de

mise en ordre Néel (3D) très inférieure, de l'ordre de  $5K$ . Le continuum d'excitations à deux spinons de la chaîne antiferromagnétique a été observé par diffraction de neutrons dans  $KCuF_3$  [79] (figure 1.2) et dans  $SrCuO_2$  [92].

La structure de  $SrCuO_2$  est en réalité plus proche d'une chaîne  $J_1$ - $J_2$  avec  $J_2 \gg J_1$  [57], mais ce modèle reste équivalent à celui d'une chaîne simple pour des températures intermédiaires  $J_1 < T < J_2$ . La transition spin-Peierls vers une phase dimérisée a été observée dans un autre composé,  $CuGeO_3$ , à partir de mesures de susceptibilité [35]. La température critique est estimée à  $14K$ . Des calculs numériques ont montré que ce composé est bien modélisé par une chaîne frustrée  $J_1$ - $J_2$  avec  $J_1 \simeq 160K$  et  $J_2 \simeq 0.36J_1 > J_2^c$  [70].

De nombreuses expériences ont également été réalisées sur les échelles de spins [18]. Des échelles à  $(n + 1)/2$  montants sont notamment bien réalisées par la famille des composés  $Sr_{n-1}Cu_{n+1}O_{2n}$ . Les mesures de susceptibilité confirment respectivement l'existence et l'absence d'un gap dans les échelles à deux et trois montants  $SrCu_2O_3$  et  $SrCu_3O_5$  [7]. La courbe de susceptibilité de  $SrCu_2O_3$  est bien reproduite pour un gap de l'ordre de  $420K$ , ce qui reste à peu près cohérent avec l'étude par résonance magnétique nucléaire (RMN) sur les noyaux de  $^{63}Cu$ , qui prédit un gap d'environ  $680K$  [40]. Enfin, les mesures par  $\mu$ -SR (*muon spin relaxation/rotation*) confirme l'absence d'ordre à longue portée dans  $SrCu_2O_3$ , alors que  $SrCu_3O_5$  exhibe un ordre magnétique en dessous de  $50K$  environ [43].

L'échelle à deux montants  $SrCu_2O_3$  peut être dopée avec du zinc ( $3d^{10} 4s^2$ ) :  $Cu^{2+} \rightarrow Zn^{2+}$  (non-magnétique). L'étude de la susceptibilité montre le gap est rapidement supprimé lorsqu'on augmente la concentration en impuretés (Zn) et on observe une transition vers état antiferromagnétique au alentours de  $8K$  [6, 18].

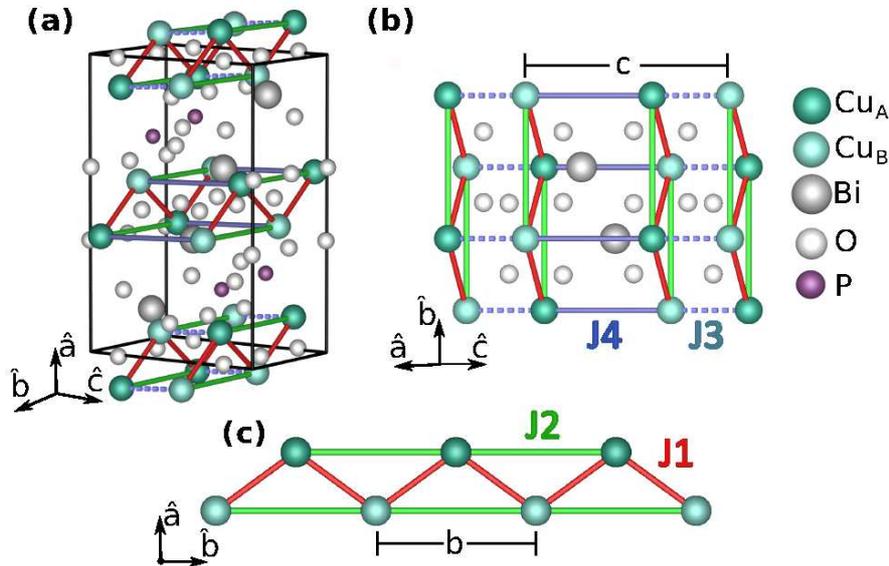


FIGURE 1.5 – Représentation de la structure cristalline de  $BiCu_2PO_6$ , extraite de [68] : (a) schéma de la maille élémentaire orthorhombique, (b) vue en perspective d'une échelle dans le plan  $\hat{b}$ - $\hat{c}$  (c) vue d'une chaîne zigzag d'ion  $Cu^{2+}$  dans le plan  $\hat{a}$ - $\hat{b}$ .

## 1.4.2 Le composé $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$

Le modèle d'échelle frustrée étudié dans cette thèse est particulièrement pertinent pour un composé particulier :  $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$ . En effet, la structure de ce composé, présentée figure 1.5, révèle la présence d'échelles zigzag à deux montants avec des couplages aux seconds voisins [1, 59]. Par ailleurs des calculs de structure de bandes ont mis en évidence que les couplages aux seconds voisins sont en fait alternés [82]. Les mesures de susceptibilité (présentées figure 1.6) et de chaleur spécifique, ainsi que la courbe d'aimantation montrent l'existence d'un gap de l'ordre de  $30\text{K}$  [44, 82]. De plus, la courbe d'aimantation exhibe un comportement linéaire en dessous du gap, qui est attribué à une anisotropie de type Dzyaloshinsky-Moriya [82]. L'extraction des différentes constantes de couplage est délicate et les différentes études ne sont pas d'accord. Néanmoins, il semble clair que les échelles sont à peu près isotropes ( $J_1 \sim J_4 \sim 100\text{K}$ ) et que la frustration ( $J_2$ ), tout comme le caractère 2D ( $J_3$ ) ne peuvent être négligés.

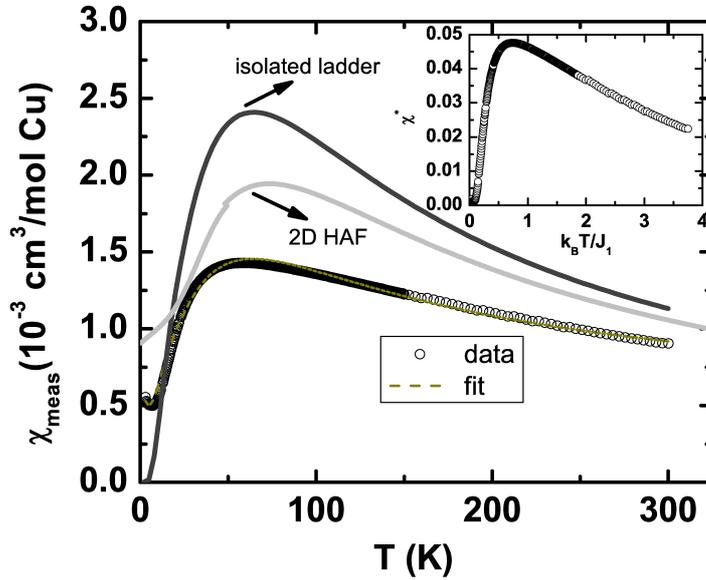


FIGURE 1.6 – Susceptibilité de  $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$  en fonction de la température (figure extraite de [44]). Sont également représentés les résultats de simulations pour une échelle isolée et pour un réseau carré avec  $J_1 = 80\text{K}$ . La réduction du maximum ne peut s'expliquer que par la prise en compte de couplages aux seconds voisins et de couplages entre échelles. L'encadré représente la susceptibilité normalisée à laquelle on a retranché la contribution des impuretés.

Une autre signature importante de la frustration est la présence d'incommensurabilité dans les fonctions de corrélation de spin. Cette incommensurabilité a pu être mise en évidence expérimentalement par des mesures de diffraction de neutrons [58, 68]. La figure 1.7 montre la présence d'un vecteur incommensurable dans la direction  $\hat{b}$  des échelles. Les oscillations de la moyenne de  $\omega$  dans la direction transverse  $\hat{c}$  mettent en évidence l'importance du couplage entre échelles  $J_3$ .

L'effet d'impuretés non-magnétiques a été étudié en dopant  $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$  avec du zinc [10, 3, 16]. Les mesures de RMN et  $\mu$ -SR montrent que chaque impureté induit autour d'elle un petit nuage polarisé antiferromagnétique, de volume  $V_\xi$ . A basse température ( $T \lesssim 5K$ ), ces petits moments magnétiques s'organisent et la nature de la phase change. Le comportement de la température critique avec la concentration  $x$  en impuretés est donné par le couplage effectif moyen entre impuretés, proportionnel à  $\frac{xV_\xi}{1+xV_\xi}$ .

Enfin,  $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$  possède une physique sous champ particulièrement riche, qui a fait l'objet d'études récentes [42, 15].

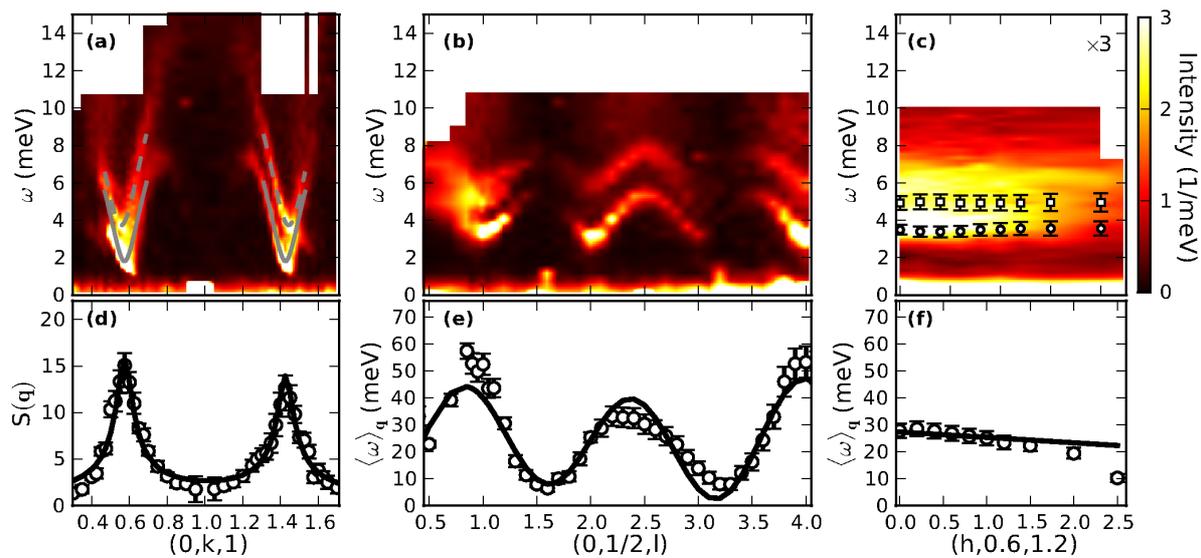


FIGURE 1.7 – Figure extraite de [68]. (a) - (c) Intensité obtenue dans les directions  $\hat{b}$ ,  $\hat{c}$  et  $\hat{a}$  définies figure 1.5, par diffraction inélastique de neutrons à  $6K$ . Le vecteur d'onde est paramétré par  $(h\pi, k\pi, l\pi)$ . (d) Facteur de structure dans la direction  $\hat{b}$  obtenu par intégration sur  $\omega$ . (e),(f) Moyenne de  $\omega$  dans les directions  $\hat{c}$  et  $\hat{a}$ .



# Chapitre 2

## Excitations élémentaires dans la chaîne de Majumdar-Ghosh

Dans ce chapitre, on étudie les excitations de la chaîne  $J_1$ - $J_2$  dans la phase dimérisée, au voisinage du point MG (partie 1.3.3). Comme dans la chaîne antiferromagnétique (partie 1.1), les excitations élémentaires de la phase dimérisée sont la combinaison de deux spinons (excitations fractionnaires de spin  $S_{\text{tot}} = 1/2$ ), mais dans le cas de la chaîne dimérisée les spinons sont gappés et peuvent être décrites par une méthode variationnelle [76, 12, 83].

La plupart des résultats présentés dans ce chapitre ont été démontrés numériquement dans la littérature. On montre ici que dans certains cas, on peut obtenir des expressions analytiques de la relation de dispersion. Il suffit pour cela d'écrire explicitement la projection du hamiltonien sur le sous-espace variationnel, plutôt que de résoudre numériquement un problème aux valeurs propres généralisé (ce qui est généralement fait dans la littérature). Cette démarche permet notamment d'obtenir une expression analytique pour la relation de dispersion d'un spinon, qui prédit l'apparition de l'incommensurabilité. On étudie ensuite les excitations à deux spinons en dérivant la condition de contact dans les secteurs singulet et triplet. La condition de contact dans le secteur triplet permet d'obtenir analytiquement la relation de dispersion de l'état lié qui avait été observé numériquement [76]. Enfin, on étudie l'effet d'une dimérisation explicite : on commence par reprendre les calculs des références [83, 12] pour les états à un spinon, puis on détermine, à l'aide de la condition de contact, le spectre à deux spinons dans les secteurs singulet et triplet.

### 2.1 Approche variationnelle

Pour étudier la dynamique d'un seul spinon, il suffit de travailler sur une chaîne de taille  $L$  impaire. On suppose des conditions aux limites ouvertes, si bien que le spinon ne se déplace que sur un seul sous-réseau. Des conditions aux limites périodiques permettent au spinon de changer de sous-réseau en bout de chaîne et sont donc équivalentes à un doublement de la taille du système. Nous allons travailler dans le sous-espace généré par les états  $|2i\rangle = |\dots \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \bullet \dots\rangle$  avec un spinon à la position  $2i$  ( $i \in [0, \frac{L-1}{2}]$ ). Il s'agit d'une approche variationnelle, dans le sens où ces états forment une famille libre, mais



## Profil d'aimantation

Le profil d'aimantation, défini par

$$m_i = \frac{\langle \psi | S_i^z | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (2.8)$$

peut être facilement calculé dans la base des états  $|2i\rangle$  [83]. Pour une fonction d'onde variationnelle (2.3), on a

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \sum_{j,k} \psi_k^* \psi_j \langle 2k | 2j \rangle, \\ \langle \psi | S_{2i}^z | \psi \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{k \leq i \leq j} \psi_k^* \psi_j \langle 2k | 2j \rangle + \text{c.c.}, \\ \langle \psi | S_{2i+1}^z | \psi \rangle &= -\frac{1}{2} \sum_{k \leq i < j} \psi_k^* \psi_j \langle 2k | 2j \rangle + \text{c.c.}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

Si  $|\psi_i|$  varie lentement par rapport à  $(1/2)^i$ , les sommes (2.9) peuvent être approximées par

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &\simeq 3 \sum_i |\psi_i|^2, \\ \langle \psi | S_{2i}^z | \psi \rangle &\simeq \frac{7}{2} |\psi_i|^2, \\ \langle \psi | S_{2i+1}^z | \psi \rangle &\simeq -(|\psi_i|^2 + |\psi_{i+1}|^2). \end{aligned} \quad (2.10)$$

## 2.2 Dynamique d'un seul spinon

### 2.2.1 Relation de dispersion au point Majumdar-Ghosh

Regardons l'effet des différents termes du hamiltonien de MG (1.51) sur un état  $|2j\rangle = |\dots \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \bullet \dots\rangle$  :

$$\mathbf{S}_{2j} \cdot \mathbf{S}_{2j+1} |\dots \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \bullet \dots\rangle = \frac{1}{4} |\dots \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \bullet \dots\rangle + \frac{1}{2} |\dots \bullet \bullet \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \dots\rangle, \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{2j} \cdot \mathbf{S}_{2j+2} |\dots \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \bullet \dots\rangle &= \frac{1}{4} |\dots \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \bullet \dots\rangle - \frac{1}{2} |\dots \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \bullet \dots\rangle \\ &= -\frac{1}{4} |\dots \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \bullet \dots\rangle - \frac{1}{2} |\dots \bullet \bullet \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \dots\rangle, \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\mathbf{S}_{2j-1} \cdot \mathbf{S}_{2j+1} |\dots \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \bullet \dots\rangle = \frac{1}{4} |\dots \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \bullet \dots\rangle + \frac{1}{2} |\dots \bullet \bullet \bullet \uparrow \bullet \bullet \bullet \dots\rangle. \quad (2.13)$$

On peut remarquer que ce dernier état (2.13) est orthogonal au sous-espace variationnel généré par les états  $|2j\rangle$ . On en déduit la restriction de  $\tilde{\mathcal{H}}_{\text{MG}}$  au sous-espace variationnel :

$$\left( \tilde{\mathcal{H}}_{\text{MG}} - E_{\text{MG}} \right) |2j\rangle = \frac{J}{2} \left( |2j-2\rangle + \frac{5}{2} |2j\rangle + |2j+2\rangle \right), \quad (2.14)$$

où  $E_{\text{MG}}$  (1.55) est extrapolée aux tailles impaires. On s'est ainsi ramené à un hamiltonien à une particule que l'on peut diagonaliser à l'aide de la transformée de Fourier :

$$|k\rangle = \sum_j e^{ik2j} |2j\rangle, \quad (2.15)$$

où  $k \in [\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$  car le spinon saute de deux en deux (repliement de la première zone de Brillouin). On en déduit la relation de dispersion d'un spinon :

$$\omega(k) = J \left( \frac{5}{4} + \cos 2k \right). \quad (2.16)$$

## 2.2.2 Incommensurabilité

Que devient cette relation de dispersion lorsqu'on s'écarte un peu du point MG ? Le hamiltonien (1.42) de la chaîne  $J_1$ - $J_2$  se met sous la forme

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{MG}} + \eta \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (2.17)$$

où on a posé  $J_2 = J$  et  $\eta = J_1 - 2J$ . La correction en  $\eta$  appliquée à un état  $|2j\rangle$  génère, en plus des termes diagonaux, des états de la forme

$$\mathbf{S}_{2i-1} \cdot \mathbf{S}_{2i} |2j\rangle = \frac{1}{4} |2j\rangle + \frac{1}{2} |[2i-2, 2i+1], 2j\rangle \quad (i < j), \quad (2.18)$$

$$\mathbf{S}_{2i} \cdot \mathbf{S}_{2i+1} |2j\rangle = \frac{1}{4} |2j\rangle + \frac{1}{2} |2j, [2i-1, 2i+2]\rangle \quad (i > j), \quad (2.19)$$

où

$$|[2i-2, 2i+1], 2j\rangle = |\dots \overbrace{\bullet \bullet \bullet}^{\curvearrowright} \dots \uparrow \dots\rangle \quad (2.20)$$

désigne l'état avec un spinon sur le site  $2j$  et un singulet entre les sites  $2i-2$  et  $2i+1$ . Le recouvrement de ces états avec les états  $|2j\rangle$  sont :

$$\langle 2j | [2n-2, 2n+1], 2i \rangle = -\frac{1}{2} \langle 2j | 2i \rangle (1 + 3\Theta(n-j-1)), \quad (2.21)$$

$$\langle 2j | 2i, [2n-1, 2n+2] \rangle = -\frac{1}{2} \langle 2j | 2i \rangle (1 + 3\Theta(j-n-1)), \quad (2.22)$$

où  $\Theta$  désigne la fonction de Heaviside avec le choix  $\Theta(0) = 1$ . On en déduit leur projection sur le sous-espace variationnel :

$$P|[2n-2, 2n+1], 2i\rangle = -\frac{1}{2} |2i\rangle - \left(-\frac{1}{2}\right)^{i-n+1} |2n\rangle + \left(-\frac{1}{2}\right)^{i-n} |2n-2\rangle, \quad (2.23)$$

$$P|2i, [2n-1, 2n+2]\rangle = -\frac{1}{2} |2i\rangle - \left(-\frac{1}{2}\right)^{n-i+1} |2n\rangle + \left(-\frac{1}{2}\right)^{n-i} |2n+2\rangle. \quad (2.24)$$

Ainsi, la correction au hamiltonien de MG génère des sauts à toute portée, dont l'amplitude décroît exponentiellement avec la distance. Finalement, la restriction du hamiltonien

au sous-espace variationnel s'écrit :

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathcal{H}} - E_0) |2j\rangle = & \left( \frac{5}{4}J + \frac{7}{8}\eta \right) |2j\rangle + \frac{1}{2}(J + \eta) (|2j - 2\rangle + |2j + 2\rangle) \\ & + \eta \sum_{n < j} \left( -\frac{1}{2} \right)^{j-n} \left( \frac{1}{4}|2n\rangle + \frac{1}{2}|2n - 2\rangle \right) \\ & + \eta \sum_{n > j} \left( -\frac{1}{2} \right)^{n-j} \left( \frac{1}{4}|2n\rangle + \frac{1}{2}|2n + 2\rangle \right), \end{aligned} \quad (2.25)$$

où

$$E_0 = E_{\text{MG}} - \frac{3}{8}\eta L \quad (2.26)$$

est prise comme nouvelle origine des énergies. La relation de dispersion est obtenue en prenant la transformée de Fourier :

$$\begin{aligned} \omega(k) = & \frac{5}{4}J + \frac{7}{8}\eta + (J + \eta) \cos(2k) \\ & + \frac{\eta}{2} \sum_{n > 0} \left( -\frac{1}{2} \right)^n (\cos(2kn) + 2 \cos[2k(n + 1)]) . \end{aligned} \quad (2.27)$$

La somme se calcule en faisant apparaître la série géométrique de raison  $-e^{2ik}/2$ . La relation de dispersion s'écrit alors

$$\omega(k) = \frac{7}{8}J_1 - \frac{1}{2}J_2 + (J_1 - J_2) \cos 2k + 4(J_1 - 2J_2) \frac{\sin^2 2k}{5 + 4 \cos 2k} . \quad (2.28)$$

La même expression avec un terme de gap différent a été obtenue par une autre méthode dans la référence [11].

L'incommensurabilité apparaît en  $J_2/J_1 = 9/17 \simeq 0.53$ , résultat conforme à une étude numérique récente [20]. Dans le régime incommensurable, la position  $q^*$  du minimum de la relation de dispersion est donnée par

$$q^* = \frac{1}{2} \arccos \left( -\frac{5}{4} + \frac{3}{4} \sqrt{2 - \frac{J_1}{J_2}} \right) . \quad (2.29)$$

Le développement de arccos au voisinage de  $-1$  fait apparaître l'exposant  $1/2$ , d'où le départ de  $q^*$  au voisinage de  $J_2/J_1 = 9/17$  :

$$\frac{\pi}{2} - q^* \propto \left( \frac{J_2}{J_1} - \frac{9}{17} \right)^{1/2} . \quad (2.30)$$

### 2.2.3 Évolution de la relation de dispersion

La figure 2.1 montre l'évolution du spectre de basse énergie dans la chaîne  $J_1$ - $J_2$  impaire, calculé en diagonalisation exacte. La relation de dispersion d'un spinon est séparée d'un continuum d'excitations à plusieurs spinons. Cette relation de dispersion est très

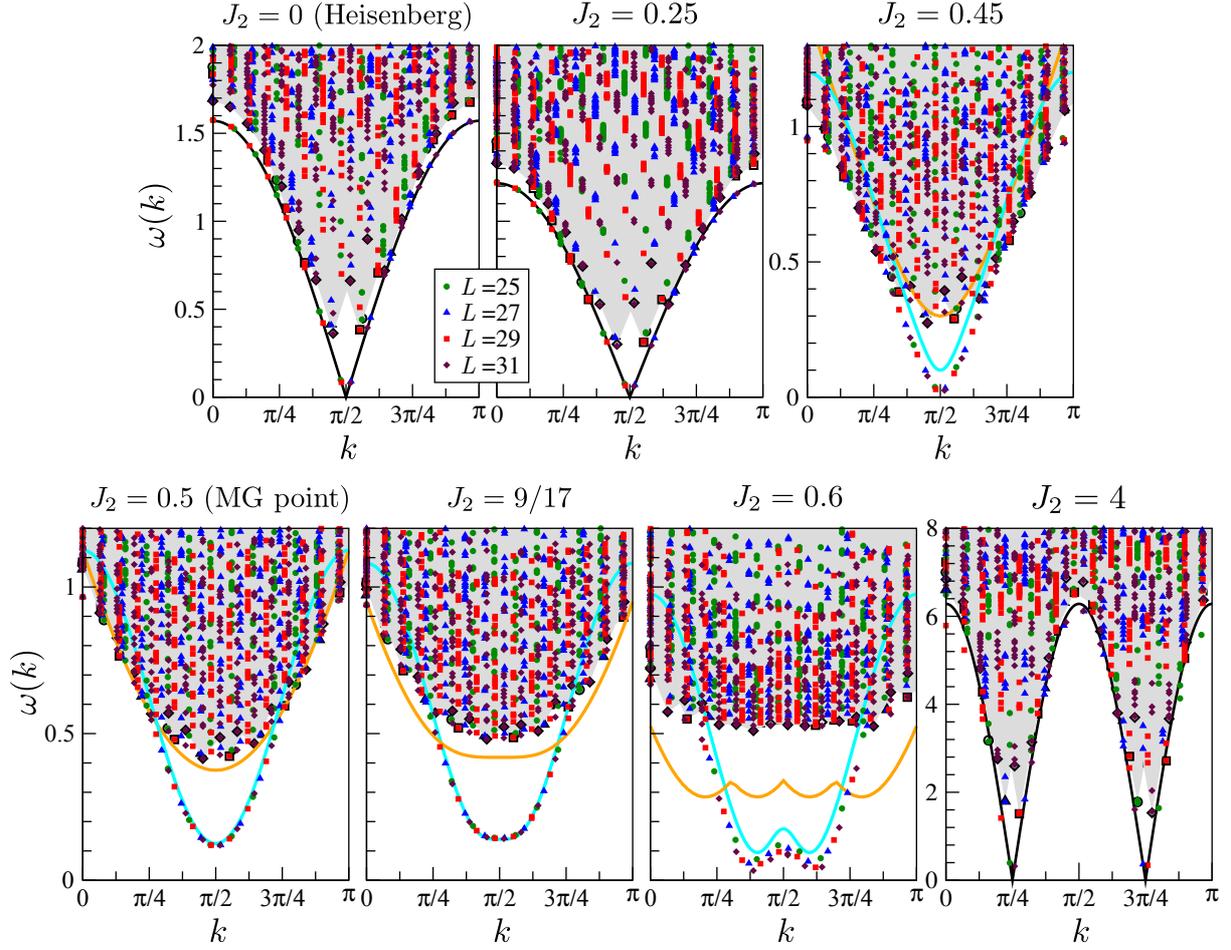


FIGURE 2.1 – Évolution de la relation de dispersion dans la chaîne  $J_1$ - $J_2$  impaire avec le rapport  $J_2/J_1$ . La courbe cyan représente la relation de dispersion d'un spinon (2.28) obtenue par la méthode variationnelle. La courbe orange indique le bas du continuum obtenu pour trois spinons indépendants. Les symboles correspondent aux résultats de diagonalisation exacte, la zone grisée indique les états dans  $S_{\text{tot}}^z = 3/2$ .

bien captée par l'approche variationnelle au voisinage du point MG et de l'apparition de l'incommensurabilité ( $J_1/2 \lesssim J_2 \lesssim 9J_1/17$ ). Le bas du continuum à plusieurs spinons peut être approximativement prédit en considérant trois spinons indépendants avec la relation de dispersion (2.28). Lorsqu'on s'écarte du point MG en diminuant  $J_2/J_1$ , le gap diminue. La méthode variationnelle prévoit la fermeture du gap pour  $J_2 = J_1/4$ . Cette valeur est à comparer avec la position exacte du point critique  $J_2^c \simeq 0.241J_1$ , obtenue numériquement. Dans la phase liquide de Luttinger ( $J_2 < J_2^c$ ), on retrouve l'allure de la relation de dispersion d'un spinon dans la chaîne de Heisenberg,  $\omega_k \propto |\cos k|$ , qui peut être obtenue par l'ansatz de Bethe (voir patrie 1.1). Dans la limite  $J_2 \gg J_1$ , le système est équivalent à deux chaînes pratiquement découplées et la relation de dispersion est celle d'une chaîne de Heisenberg de maille double,  $\omega_k \propto |\cos 2k|$ .

## 2.3 États à deux spinons

### 2.3.1 Méthode variationnelle

On étudie maintenant les excitations élémentaires d'une chaîne paire (au point MG), c'est-à-dire des excitations à deux spinons. On reprend l'approche variationnelle précédente mais on travaille maintenant sur le sous-espace généré par les états à deux spinons  $|x_1, x_2\rangle = | \dots \bullet \uparrow \bullet \dots \dots \bullet \uparrow \bullet \dots \rangle$  ( $x_1 < x_2$ ), dans chaque secteur de spin : singulet ou triplet<sup>2</sup>. Comme discuté dans l'annexe B, ces états forment des familles libres, mais pas des bases des secteurs singulet et triplets. On suppose la chaîne infinie (des deux côtés)<sup>3</sup>, avec des conditions aux limites ouvertes. Les spinons ne peuvent donc pas changer de sous-réseau :  $x_1$  est pair et  $x_2$  impair.

### Équation de Schrödinger

Tant que les spinons ne sont pas sur des sites voisins ( $x_1 + 3 \leq x_2$ ), le hamiltonien effectif agit séparément sur chacun des spinons selon (2.14) et indépendamment du secteur de spin :

$$\begin{aligned} \left( \tilde{\mathcal{H}}_{\text{MG}} - E_{\text{MG}} \right) |x_1, x_2\rangle &= \frac{5}{2} J |x_1, x_2\rangle \\ &+ \frac{J}{2} (|x_1 - 2, x_2\rangle + |x_1 + 2, x_2\rangle + |x_1, x_2 - 2\rangle + |x_1, x_2 + 2\rangle) . \end{aligned} \quad (2.31)$$

On se place dans le référentiel du centre de masse pour exploiter l'invariance par translation :

$$X = \frac{x_1 + x_2}{2}, \quad x = x_2 - x_1 ; \quad (2.32)$$

$x$  prend des valeurs impaires positives et  $X$  des valeurs demi-entières. Pour une valeur de  $x$ , toutes les valeurs de  $X$  ne sont possibles et réciproquement :

$$x = 4i \pm 1 \Leftrightarrow X = 2j \pm \frac{1}{2} . \quad (2.33)$$

On effectue une transformée de Fourier sur la coordonnée  $X$  du centre de masse :

$$|K, x = 4i \pm 1\rangle = \sum_{X=2j \pm \frac{1}{2}} e^{iKX} |X, x\rangle , \quad (2.34)$$

où la première zone de Brillouin est  $K \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ , car pour  $x$  fixé, le centre de masse saute de deux en deux. Le hamiltonien effectif s'écrit dans cette base :

$$\left( \tilde{\mathcal{H}}_{\text{MG}} - E_{\text{MG}} \right) |K, x\rangle = \frac{5}{2} J |K, x\rangle + J \cos K (|K, x - 2\rangle + |K, x + 2\rangle) , \quad (2.35)$$

où  $x \geq 3$ . Si on cherche une fonction d'onde variationnelle

$$|\psi\rangle = \sum_{i \in \mathbb{N}} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dK}{\pi} \psi_i(K) |K, x = 2i + 1\rangle , \quad (2.36)$$

2. L'invariance par rotation dans l'espace des spins permet de se contenter de l'étude d'un seul triplet, ici  $|\uparrow\uparrow\rangle$ .

3. Chuck Norris a compté jusqu'à l'infini, deux fois...

on obtient l'équation de Schrödinger discrète :

$$(E - E_{\text{MG}}) \psi_i(K) = \frac{5}{2} J \psi_i(K) + J \cos K [\psi_{i-1}(K) + \psi_{i+1}(K)] , \quad (2.37)$$

où  $i > 1$ .

### Conditions limites

Lorsque les spinons sont sur des sites voisins ( $x = 1$ ), il faut distinguer les secteurs singulet et triplet. Dans le secteur singulet, l'état  $|X, x = 1\rangle$  ( $\forall X$ ) n'est rien d'autre que l'état  $|\text{MG}\rangle$ , état propre avec l'énergie  $E_{\text{MG}}$ . On en déduit les conditions limites dans le secteur singulet :

$$(E - E_{\text{MG}}) \psi_1(K) = \frac{5}{2} J \psi_1(K) + J \cos(K) \psi_2(K) , \quad (2.38)$$

$$(E - E_{\text{MG}}) \psi_0(K) = J \cos(K) \psi_1(K) . \quad (2.39)$$

Il faut distinguer deux cas :

- si  $\psi_0(K) \neq 0$ , alors  $E = E_{\text{MG}}$  et on retrouve le fondamental  $|\text{MG}\rangle$ ,
- si  $\psi_0(K) = 0$ , alors l'équation (2.38) est équivalente à l'équation de Schrödinger (2.37) pour  $i = 1$  et on n'a plus qu'une condition limite

$$\psi_0(K) = 0 . \quad (2.40)$$

On résout (2.37) avec la condition (2.40) : les seules solutions possibles pour le mouvement relatif des deux spinons sont des ondes stationnaires de vecteur d'onde  $q$ . On obtient un continuum de diffusion, représenté figure 2.2 :

$$\omega(K, q) = \frac{5}{2} J + 2J \cos(K) \cos(2q) , \quad (2.41)$$

où  $K \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$  et  $q \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ .

Dans le secteur triplet, l'action du hamiltonien effectif  $\tilde{\mathcal{H}}_{\text{MG}}$  sur un état  $|x, x + 1\rangle$ , où les deux spinons sont en contact est :

$$\begin{aligned} \left( \tilde{\mathcal{H}}_{\text{MG}} - E_{\text{MG}} \right) |x, x + 1\rangle &= 3J|x, x + 1\rangle \\ &+ \frac{J}{2}|x - 2, x - 1\rangle + \frac{J}{2}|x + 2, x + 3\rangle + J|x - 2, x + 1\rangle + J|x, x + 3\rangle , \end{aligned} \quad (2.42)$$

soit en transformée de Fourier dans le référentiel du centre de masse

$$\left( \tilde{\mathcal{H}}_{\text{MG}} - E_{\text{MG}} \right) |K, 1\rangle = J(3 + \cos 2K)|K, 1\rangle + 2J \cos K |K, 3\rangle . \quad (2.43)$$

On en déduit les conditions limites dans le secteur triplet :

$$(E - E_{\text{MG}}) \psi_1(K) = \frac{5}{2} J \psi_1(K) + J \cos(K) \psi_2(K) + 2J \cos(K) \psi_0(K) , \quad (2.44)$$

$$(E - E_{\text{MG}}) \psi_0(K) = J(3 + \cos 2K) \psi_0(K) + J \cos(K) \psi_1(K) . \quad (2.45)$$

En faisant le changement de variable  $\psi_0(K) \rightarrow \psi_0(K)/2$ , l'équation (2.44) redonne l'équation de Schrödinger (2.37) et la condition (2.45) devient

$$(E - E_{\text{MG}}) \psi_0(K) = J(3 + \cos 2K) \psi_0(K) + 2J \cos(K) \psi_1(K) . \quad (2.46)$$

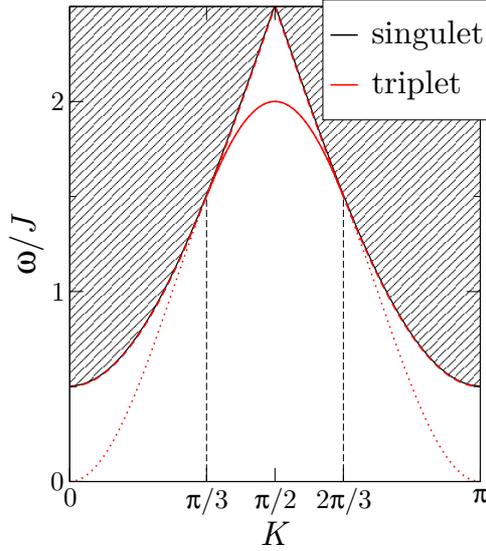


FIGURE 2.2 – Spectre de basse énergie de la chaîne MG, calculé par la méthode variationnelle. Les pointillés représentent le prolongement de la relation de dispersion (2.48), pour lequel il n’y a pas d’états.

### État lié

La condition limite (2.46) est toujours compatible avec des solutions en onde stationnaire, et le continuum de diffusion (2.41) est quatre fois dégénéré. Cependant, la condition limite (2.46) autorise maintenant à considérer le cas où le discriminant de l’équation caractéristique de l’équation de Schrödinger (2.37) est positif. On obtient alors un état triplet lié, trois fois dégénéré, de la forme :

$$\psi_i(K) = \phi(K)e^{-2i/\xi(K)}, \quad (2.47)$$

où  $\xi(K)$  est la distance caractéristique entre les spinons. La condition limite (2.46) permet de déterminer la relation de dispersion de l’état lié :

$$\omega(K) = \frac{5}{2}J - J\sqrt{4\cos^2 K + \left(\frac{1}{2} + \cos 2K\right)^2}, \quad (2.48)$$

où  $K \in [\frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}]$ , si bien que l’état lié n’existe qu’en dehors du continuum (figure 2.2). En  $K = \pi/2$ , l’état lié est simplement l’état  $|K = \frac{\pi}{2}, x = 1\rangle$ , c’est-à-dire un triplet sur deux sites voisins. On peut directement voir dans l’équation (2.14) que cet état est bien état propre du hamiltonien effectif. La taille caractéristique  $\xi_K$  de l’état lié pour  $K \neq \pi/2$  est déterminée par :

$$e^{-2/\xi(K)} = \frac{\sqrt{4\cos^2 K + \left(\frac{1}{2} + \cos 2K\right)^2} - \frac{1}{2} - \cos 2K}{2\cos K}, \quad (2.49)$$

en particulier  $\xi(K) \rightarrow +\infty$  quand  $K \rightarrow \frac{\pi}{3}^+$ .

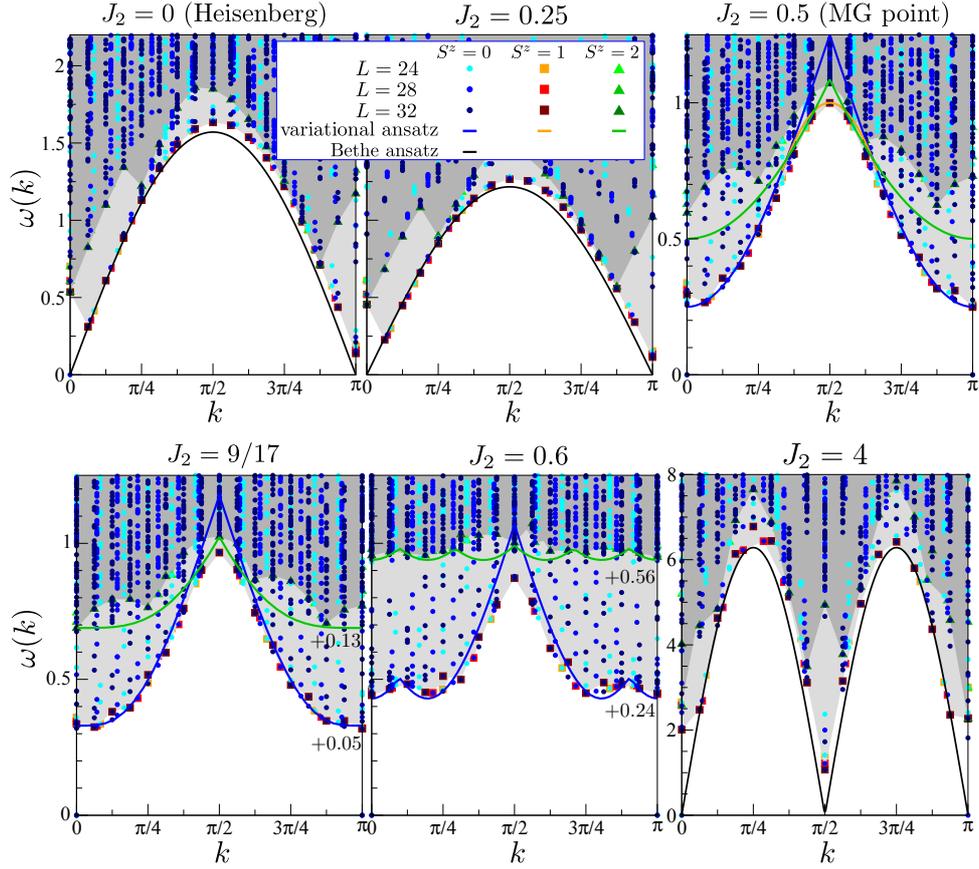


FIGURE 2.3 – Évolution du spectre de basse énergie de la chaîne  $J_1$ - $J_2$  (paire), avec le rapport  $J_2/J_1$ . La zone gris clair indique le continuum d'états à deux spinons. La zone gris foncé indique le continuum d'états à quatre spinons.

### 2.3.2 Évolution du spectre

La méthode variationnelle est comparée aux résultats numériques obtenus en diagonalisation exacte sur la figure 2.3. Dans la phase liquide de Luttinger, on retrouve la relation de dispersion (1.16) obtenue par l'ansatz de Bethe. Le bas du continuum à deux spinons est très bien capté par la méthode variationnelle au point MG. On vérifie également que la relation de dispersion de l'état lié (2.48) correspond à l'état triplet qui sort du continuum autour de  $k = \pi/2$ .

Pour  $J_2 > J_1/2$ , la forme du bas du continuum peut être reproduite en considérant les états de diffusion à deux spinons avec la relation de dispersion (2.28) ; sur la figure 2.3, la courbe correspondante est légèrement décalée en énergie pour ajuster le gap. On peut de même obtenir le bas du continuum à quatre spinons en considérant quatre spinons indépendants. Remarquons qu'autour de  $k = \pi/2$  le continuum à quatre spinons descend en dessous du continuum à deux spinons, ce qui explique la présence d'états dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 0$  sous le continuum à deux spinons.

## 2.4 Effet d'un terme de dimérisation explicite

On étudie maintenant l'effet d'une petite dimérisation explicite  $\delta$  dans le hamiltonien. On se place sur la ligne de Shastry-Sutherland  $\delta + 2J_2 = J_1$  [76], sur laquelle le hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H} = \sum_i (2J + \delta) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+2} + (-1)^i \delta \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} . \quad (2.50)$$

Le fondamental exact de ce hamiltonien est l'état de MG avec les dimères sur les liens forts  $(2i, 2i + 1)$ , d'énergie par site

$$\frac{E_{\text{MG}}}{L} = -\frac{3}{4} (J + \delta) . \quad (2.51)$$

L'autre état de MG n'est plus état propre. Au premier ordre en  $\delta$ , son énergie par site est  $-\frac{3}{4}J$ .

### 2.4.1 Confinement au voisinage d'une impureté

On considère une chaîne impaire ou, autrement dit, une chaîne paire avec une impureté non-magnétique au site 0, de sorte que la chaîne commence par un lien faible  $-\delta$ . La levée de dégénérescence entre les deux états de MG génère un potentiel attractif entre le spinon et l'impureté, proportionnel à la distance. L'effet d'un tel potentiel confinant a été étudié analytiquement dans la limite continue [83, 12] et en DMRG [72]. Le terme de dimérisation explicite modifie également la partie cinétique du hamiltonien effectif et génère notamment des termes de saut au delà du premier voisin, qui donnent lieu à l'incommensurabilité au dessus de la ligne de Shastry-Sutherland ( $\delta > J_1 - 2J_2$ ). En supposant que  $\delta \ll J$ , on peut négliger la correction cinétique, mais le terme potentiel ne peut être négligé à grande distance. Dans cette approximation, l'équation de Schrödinger pour une fonction d'onde variationnelle<sup>4</sup>

$$|\psi\rangle = \sum_i (-1)^i \psi_i |2i + 1\rangle , \quad (2.52)$$

s'écrit

$$(E - E_{\text{MG}}) \psi_i = \left( \frac{5}{4}J + \frac{3}{2}\delta i \right) \psi_i - \frac{J}{2} (\psi_{i-1} + \psi_{i+1}) , \quad (2.53)$$

avec la condition limite  $\psi_{-1} = 0$ . Cette équation peut être résolue en passant à la limite continue [83, 12]. On suppose que  $\psi_i$  varie lentement avec  $i$ . À la limite continue, l'équation de Schrödinger devient

$$-2J\psi''(x) + \frac{3\delta}{4}(x - \varepsilon)\psi(x) = 0 , \quad (2.54)$$

où  $\psi(x = 2i + 1) = \psi_i$  et  $\varepsilon = \frac{4}{3\delta} (E - E_{\text{MG}}) - \frac{J}{3\delta}$ , soit

$$\psi''(y) - y\psi(y) = 0 , \quad (2.55)$$

---

4. Le minimum de la relation (2.41) étant à  $k = \pi/2$ , il est judicieux de choisir une fonction d'onde qui oscille déjà à cette fréquence pour pouvoir considérer la limite continue.

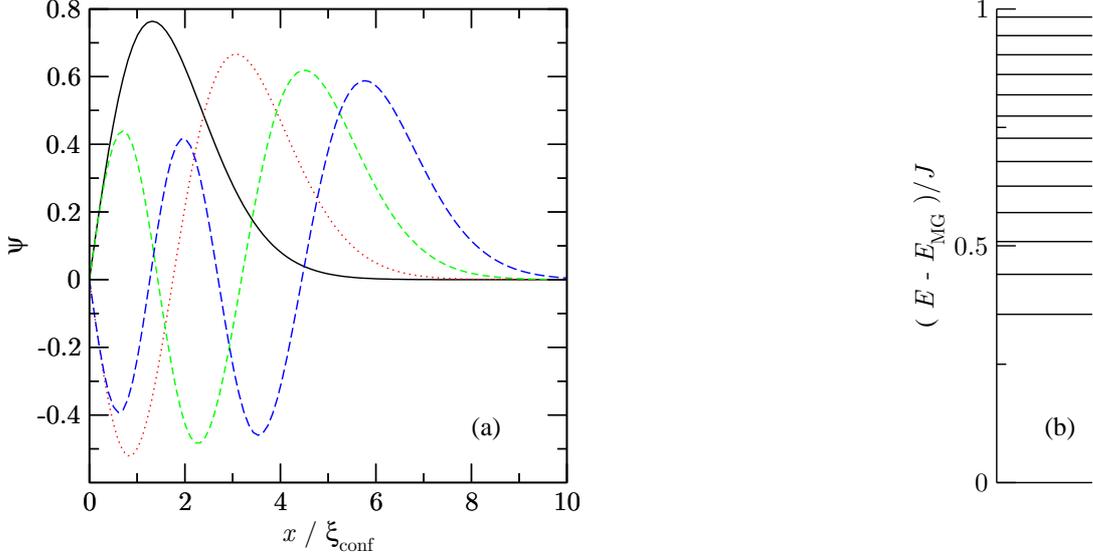


FIGURE 2.4 – (a) Fonctions d’ondes (dans la limite continue) des premiers états confinés au voisinage d’une impureté en  $x = 0$ . (b) Niveaux d’énergie pour  $\delta = 0.01J$ .

après le changement de variable

$$y = \frac{1}{\xi_{\text{conf}}} (x - \varepsilon) , \quad \text{avec} \quad \xi_{\text{conf}} = \left( \frac{8J}{3\delta} \right)^{1/3} . \quad (2.56)$$

Dans la limite  $\delta \ll J$ , on a  $\xi_{\text{conf}} \gg 1$ , ce qui justifie la limite continue. Une base des solutions de l’équation différentielle (2.55) sont les fonctions d’Airy Ai et Bi qui oscillent pour  $x < 0$  et dont le comportement à l’infini est :

$$\text{Ai}(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} 0 , \quad \text{Bi}(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} +\infty . \quad (2.57)$$

Les conditions limites  $\psi(x = -1) = 0$  et  $\psi(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} 0$  donnent les énergies possibles, soit

$$E_n = E_{\text{MG}} + \frac{J}{4} - \frac{3\delta}{4} (1 + a_n \xi_{\text{conf}}) , \quad (2.58)$$

où les  $a_n < 0$  sont les zéros de la fonction Ai. Les fonctions d’ondes associées s’écrivent

$$\psi_n(x) \propto \text{Ai} \left( \frac{x + 1}{\xi_{\text{conf}}} + a_n \right) , \quad (2.59)$$

et sont représentées figure 2.4. Les profils d’aimantation correspondants ont été comparés au calcul en DMRG dans les références [83] et [21]. Ainsi, le spinon reste confiné au voisinage de l’impureté sur une longueur caractéristique  $\xi_{\text{conf}}$ .

## 2.4.2 États à deux spinons

Dans le cas d’une chaîne paire (et infinie des deux côtés) avec deux spinons, la dimérisation explicite génère un potentiel attractif entre les spinons. L’équation de Schrödinger (2.37) dans le référentiel du centre de masse devient à la limite continue :

$$-4J \cos(K) \partial_x^2 \psi(K, x) + \frac{3\delta}{4} [x - \varepsilon(K)] \psi(K, x) = 0 , \quad (2.60)$$

où

$$\varepsilon(K) = \frac{4\delta}{3} (E - E_{\text{MG}}) - \frac{2J}{3\delta} (5 - 4 \cos K) . \quad (2.61)$$

On peut se ramener à l'équation (2.55) à l'aide du changement de variable

$$y = \frac{x - \varepsilon(K)}{\xi_{\text{conf}}(K)} , \quad \text{avec} \quad \xi_{\text{conf}}(K) = \left( \frac{16J}{3\delta} \cos K \right)^{1/3} . \quad (2.62)$$

Lorsque  $K \rightarrow \pi/2$ ,  $\xi_{\text{conf}} \rightarrow 0$  et la limite continue n'est plus valable. En  $K = \pi/2$ , l'équation de Schrödinger s'écrit simplement

$$(E - E_{\text{MG}}) \psi_i = \left( \frac{5}{2}J + \frac{3}{2}\delta i \right) \psi_i . \quad (2.63)$$

Les états propres correspondent donc à des positions relatives entre spinons  $x_i = 2i + 1$  constantes. Leurs énergies sont données par

$$\omega_i(\pi/2) = \frac{5}{2}J + \frac{3}{2}\delta i , \quad (i > 0) . \quad (2.64)$$

Dans le secteur triplet il y a toujours l'état lié à  $i = 0$  dont l'énergie  $\omega_0(\pi/2) \simeq 2J$  est donnée par la condition limite (2.46).

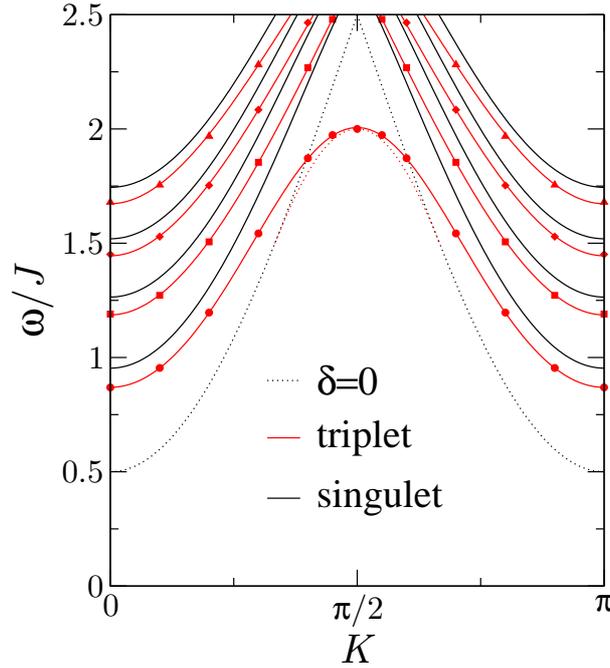


FIGURE 2.5 – Spectre de basse énergie de la chaîne de MG avec une dimérisation explicite  $\delta = 0.05J$ , calculé par la méthode variationnelle dans la limite continue. Dans le secteur triplet, les symboles correspondent à la résolution numérique de la condition limite (2.67) et les lignes sont extrapolées.

Pour  $K < \pi/2$ , les états propres sont des fonctions d'Airy shiftées

$$\psi(K, x) \propto \text{Ai} \left( \frac{x - \varepsilon(K)}{\xi_{\text{conf}}(K)} \right) , \quad (2.65)$$

c'est-à-dire des états liés avec une taille caractéristique  $\xi_{\text{conf}}(K)$ . Les énergies sont obtenues à partir des conditions limites, (2.40) dans le secteur singulet et (2.46) dans le secteur triplet. La condition limite du secteur singulet donne directement la relation de dispersion en fonction des zéros  $a_n$  de la fonction d'Airy Ai :

$$\omega_n(K) = J \left( \frac{5}{2} - 2 \cos K \right) + \frac{3\delta}{4} [1 - a_n \xi_{\text{conf}}(K)] . \quad (2.66)$$

Dans le secteur triplet, l'équation limite se réécrit

$$-2J \cos(K) \text{Ai} \left( \frac{3 - \varepsilon(K)}{\xi_{\text{conf}}(K)} \right) = \left( \frac{3}{4} \delta \varepsilon(K) - \frac{1}{2} J - 2J \cos K - J \cos 2K \right) \text{Ai} \left( \frac{1 - \varepsilon(K)}{\xi_{\text{conf}}(K)} \right) , \quad (2.67)$$

et peut être résolue numériquement. Les relations de dispersion des premiers états singulets et triplets sont représentées figure 2.5. La dimérisation explicite  $\delta$  discrétise le continuum (2.41) et sépare les états triplet et singulet. Cette formation d'états liés peut également être étudiée en partant de la limite de dimères faiblement couplés ( $J_1 - \delta \ll J_1$ ) par des développements en séries à des ordres élevés [93].

# Chapitre 3

## Effet de la frustration dans les échelles

Plusieurs composés en échelle possèdent une structure en zigzag qui donne lieu à des couplages aux seconds voisins le long des montants. Le meilleur exemple est le  $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$  (partie 1.4.2). Nous allons étudier le modèle général d'échelle frustrée, défini par le hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1,2} \sum_i (J_1 \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i+1,j} + J_2 \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i+2,j}) + J_{\perp} \sum_i \mathbf{S}_{i,1} \cdot \mathbf{S}_{i,2}. \quad (3.1)$$

Ce modèle peut être vu alternativement comme deux chaînes frustrées  $J_1$ - $J_2$  couplées, ou comme deux échelles  $J_2$ - $J_{\perp}$  couplées en zigzag. L'étude présentée dans ce chapitre a donné lieu à la publication [47].

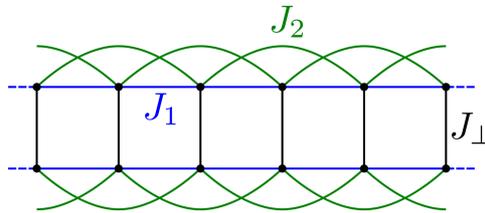


FIGURE 3.1 – Modèle de l'échelle frustrée.

On commence par étudier le diagramme de phase du modèle qui fait apparaître une transition entre une phase dimérisée et une phase RVB. La nature de cette transition est déterminée en étudiant le scaling du paramètre d'ordre et de l'entropie d'intrication au point critique. On discute ensuite la physique de la phase RVB à fort  $J_{\perp}$ , notamment par un traitement en champ moyen. En particulier, l'apparition de l'incommensurabilité dans la relation de dispersion, le facteur de structure et les fonctions de corrélation est étudiée en détail.

### 3.1 Diagramme de phase

Différents cas limites, selon les valeurs des couplages  $J_1$ ,  $J_2$  et  $J_{\perp}$ , ont été étudiés au chapitre 1.

- À  $J_{\perp} = 0$ , le modèle correspond à deux chaînes  $J_1$ - $J_2$  découplées qui présentent une transition vers une phase dimérisée en  $J_2^c \simeq 0.241J_1$  (partie 1.3.2).
- À  $J_2 = 0$ , le modèle est une échelle simple dont la phase est un état RVB dit *rung-singlet* (partie 1.2).
- À  $J_1 = 0$ , le modèle correspond à deux échelles  $J_2$ - $J_{\perp}$  de maille double découplées, également dans la phase *rung-singlet*.

Partant de la limite  $J_{\perp} = 0$ , on couple progressivement deux chaînes frustrées. Pour  $J_2 < J_2^c$ , les fluctuations RVB détruisent le quasi-ordre antiferromagnétique quel que soit  $J_{\perp}$ . Pour  $J_2 > J_2^c$ , le gap protège la phase dimérisée à petit  $J_{\perp}$ . Pour avoir une image de cette phase, on peut faire un calcul perturbatif en  $J_{\perp}$  au point MG où on connaît exactement le fondamental non-perturbé [12]. Pour deux chaînes de MG, il y a quatre fondamentaux dégénérés : deux avec les dimères alignés (figure 3.2(a)) et deux avec les dimères alternés (figure 3.2(b)). On peut montrer que le couplage transverse  $J_{\perp}$  lève la dégénérescence entre ces deux configurations au deuxième ordre. Le fondamental est la configuration alignée, dite phase colonnaire (*columnar-dimer*) [12, 84]. La phase alternée peut être stabilisée par des couplages entre chaînes croisés [84] ou par un échange à quatre spins [64].

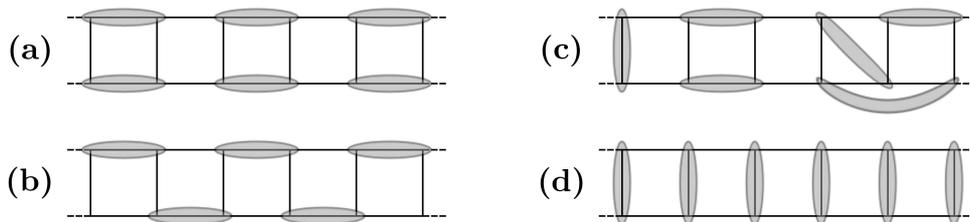


FIGURE 3.2 – (a) Phase dimérisée colonnaire (*columnar-dimer*). (b) Phase dimérisée alternée. (c) Phase RVB *rung-singlet*. (d) Phase *rung-singlet* dans la limite de fort  $J_{\perp}$ .

Le diagramme de phase obtenu numériquement est présenté figure 3.3. La ligne de transition a un comportement non-monotone que l'on peut déduire du comportement du paramètre d'ordre (ou du gap) dans la chaîne  $J_1$ - $J_2$  : plus la dimérisation  $D_{\text{chain}}$  le long des montants de l'échelle est grande, plus il faut un couplage transverse  $J_{\perp}$  important pour détruire le cristal de dimères. Au voisinage de la transition, la dimérisation a un comportement critique en  $(J_{\perp}^c - J_{\perp})^{1/8}$ , étudié dans la partie 3.2.1. On en déduit qu'à petit couplage critique  $J_{\perp}^c$ , la ligne de transition doit suivre la courbe :

$$J_{\perp}^c(J_2/J_1) \propto [D_{\text{chain}}(J_2/J_1)]^8 . \quad (3.2)$$

En particulier, l'existence d'un maximum de dimérisation dans la chaîne  $J_1$ - $J_2$  se traduit par une réentrance non-triviale de la phase RVB. De plus, la courbe  $J_{\perp}^c(J_2/J_1)$  a un comportement exponentiel quand  $J_2$  tend vers  $J_2^c$  et  $+\infty$ , donné par les équations (1.49) et (1.50). Ce comportement est par ailleurs difficile à mettre en évidence numériquement.

## 3.2 Nature de la transition

Dans cette partie, on montre numériquement que la transition entre les phases *columnar-dimer* et *rung-singlet* appartient à la classe d'universalité d'Ising (2D).

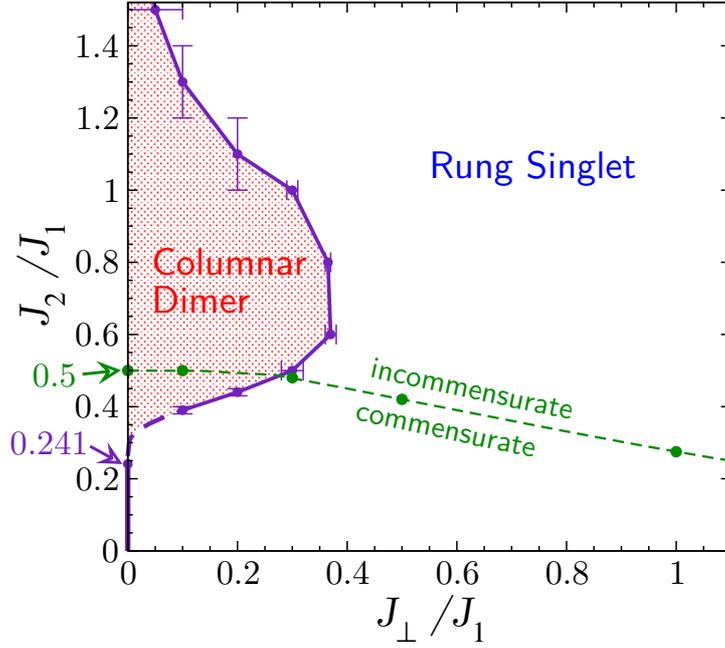


FIGURE 3.3 – Diagramme de phase de l’échelle frustrée  $J_1$ - $J_2$ . La transition entre les phases *columnar-dimer* et *rung-singlet*, représentée par la ligne violette, appartient à la classe d’universalité d’Ising (pour  $J_\perp \neq 0$ ). La ligne violette en pointillés conjecture le comportement de la ligne de transition au voisinage de  $J_2 \simeq 0,241J_1$ . La ligne verte indique l’apparition de l’incommensurabilité dans les fonctions de corrélation dans l’espace réel.

### 3.2.1 Paramètre d’ordre

Le meilleur moyen de distinguer les deux phases est de calculer le paramètre d’ordre de la phase dimérisée, c’est-à-dire la dimérisation le long des montants :

$$D_i = \langle \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i+1,j} \rangle - \langle \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i-1,j} \rangle . \quad (3.3)$$

Ce paramètre d’ordre local est calculé en DMRG avec des conditions aux limites ouvertes. On a vérifié que la dimérisation est la même le long des deux montants ( $D_i$  ne dépend pas de  $j$ ) et que par conséquent, la phase dimérisée est bien la phase colonnaire. La dimérisation présente des oscillations de Friedel près des bords qui décroissent exponentiellement dans les deux phases. Ces oscillations ont lieu à un vecteur incommensurable dans le régime incommensurable. Le comportement de l’enveloppe des oscillations de Friedel est, d’après la théorie des champs [48],

$$D_x \simeq D_\infty + \frac{A}{x^\alpha} e^{-x/\xi_{\text{dimer}}} , \quad (3.4)$$

où  $x$  est la distance au bord,  $D_\infty$  la valeur du paramètre d’ordre dans le *bulk* à la limite thermodynamique,  $A$  une constante et  $\xi_{\text{dimer}}$  la longueur de corrélation associée aux fluctuations des dimères. L’exposant  $\alpha$  rend compte de corrections en loi de puissance, notamment au voisinage de la transition. Comme on le verra dans la partie 3.3.4, la longueur  $\xi_{\text{dimer}}$  associée à l’ordre des dimères est différente de la longueur caractéristique  $\xi_{\text{spin}}$  extraite des fonctions de corrélation de spin et diverge à la transition.

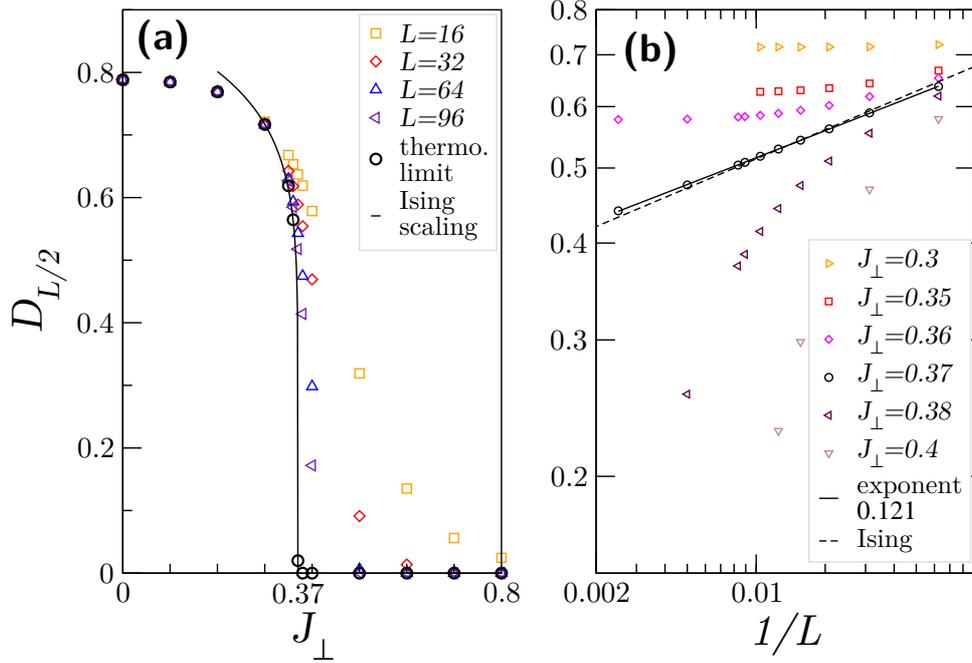


FIGURE 3.4 – (a) Évolution du paramètre d’ordre à travers la transition à  $J_2 = 0.6J_1$  fixé. La limite thermodynamique  $D_\infty$  est extrapolée par un fit polynomial dans la phase ordonnée et par un fit selon l’équation (3.6) proche du point critique. (b) *Scaling* du paramètre d’ordre au voisinage du point critique. Le *scaling* au point critique fait apparaître une loi de puissance avec l’exposant critique de la classe d’universalité d’Ising.

La figure 3.4(a) montre le comportement du paramètre d’ordre au milieu de l’échelle  $D_{L/2}$  en fonction de  $J_\perp/J_1$  à  $J_2 = 0.6J_1$  fixé. Au voisinage de la transition, le paramètre d’ordre extrapolé à la limite thermodynamique exhibe un comportement critique

$$D_\infty(J_\perp) \propto (J_\perp^c - J_\perp)^\alpha, \quad (3.5)$$

en accord avec la classe d’universalité d’Ising pour laquelle  $\alpha = 1/8$ . L’exposant critique  $\alpha$  et la position du point critique  $J_\perp^c$  peuvent être extraits précisément en utilisant le *scaling* à taille finie :

$$D_{L/2} - D_\infty \propto \frac{e^{-L/2\xi_{\text{dimer}}}}{L^\alpha}, \quad (3.6)$$

où  $\xi_{\text{dimer}} \rightarrow +\infty$  à la transition. L’exposant obtenu numériquement  $\alpha = 0.121 \pm 0.05$  est en très bon accord avec l’exposant d’Ising  $1/8$  (figure 3.4(b)).

### 3.2.2 Entropie d’intrication

La description par la théorie des champs des excitations de basse énergie de deux chaînes couplées, fait apparaître quatre fermions de Majorana, un dans le secteur singulet et trois dans le secteur triplet [64, 77]. La transition vers la phase alternée correspond à la fermeture du gap triplet. Par contre, la transition vers la phase colonnaire correspond à la fermeture du gap singulet et doit donc faire apparaître la charge centrale d’un seul fermion de Majorana  $c = 1/2$ , caractéristique de la classe d’universalité d’Ising.

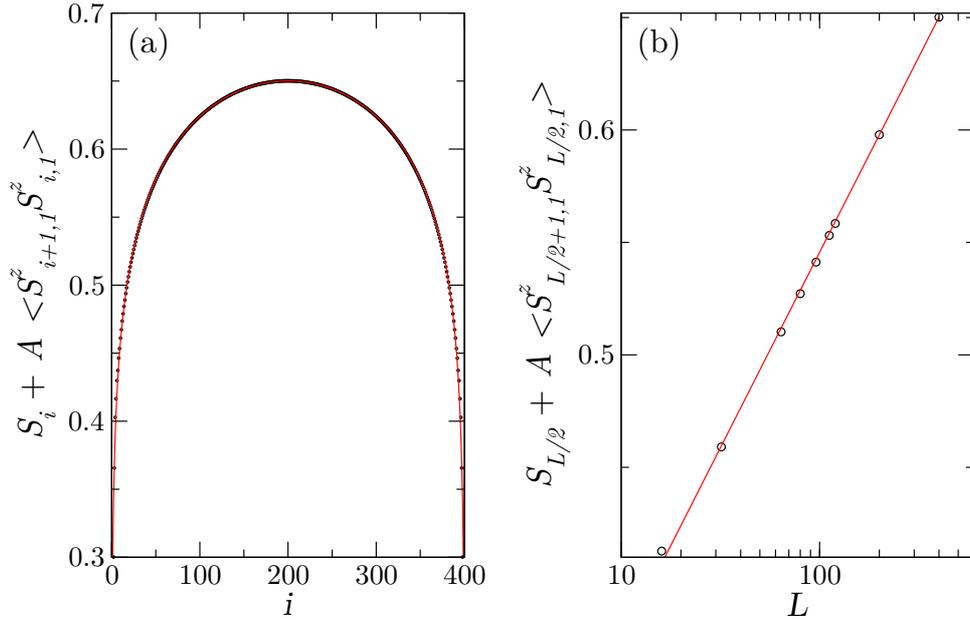


FIGURE 3.5 – (a) Entropie d'intrication d'un bloc de taille  $i$  en fonction de  $i$  au point critique de la figure 3.4 ( $J_2 = 0.6J_1$ ). Le fit par la formule (3.7) donne une charge centrale  $c \simeq 0.47$ , en accord avec la valeur  $c = 1/2$  de la classe d'universalité d'Ising. (b) Scaling de l'entropie d'intrication du demi-système avec la taille totale  $L$ . Un fit par  $\frac{c}{6} \ln(L) + \text{cste}$  permet d'extraire la charge centrale  $c \simeq 0.46$ .

La charge centrale peut être extraite en utilisant les résultats de la théorie conforme [13, 14] sur l'entropie d'intrication (définie dans l'annexe A.3.2) d'un bloc de taille  $x$  avec le reste du système. Pour des conditions aux limites ouvertes, le comportement de l'entropie d'intrication  $S_x$  est donné par :

$$S_x = \frac{c}{6} \ln \left[ \frac{L+1}{\pi} \sin \left( \frac{\pi x}{L+1} \right) \right] + a \langle \mathbf{S}_{x+1,1} \cdot \mathbf{S}_{x,1} \rangle + b, \quad (3.7)$$

où  $a$ ,  $b$  et  $c$  sont des paramètres de fit. L'entropie d'intrication est facilement calculée en DMRG. Le *scaling* (3.7) n'est observable que très proche du point critique et pour des tailles assez grandes. Comme le montre la figure 3.5, le fit directement par l'équation (3.7), ou le *scaling* de  $S_{L/2}$  avec la taille  $L$  du système, permettent d'extraire une charge centrale compatible avec la valeur théorique  $c = 1/2$ . Ce résultat est une autre confirmation de la classe d'universalité d'Ising de la transition.

### 3.2.3 Spectres d'excitations

On étudie maintenant la nature des excitations de basse énergie, comme signature des deux phases. Sur la figure 3.6, on a représenté les spectres de basse énergie en fonction du vecteur d'onde longitudinal  $k_x$ , obtenus par diagonalisation exacte dans les différents secteurs de parité ( $k_y = 0, \pi$ ) et de spin (singulet et triplet).<sup>1</sup>

1. Les secteurs singulets et triplets sont identifiés en utilisant la symétrie d'inversion de spin dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 0$ .

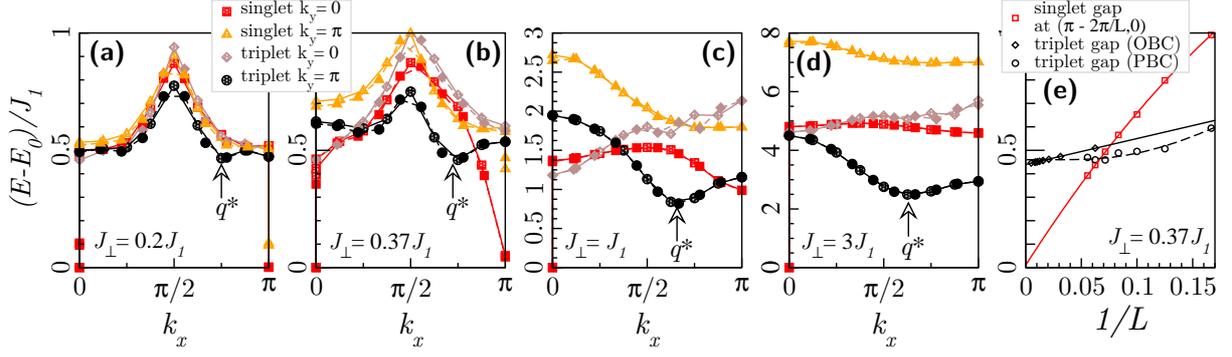


FIGURE 3.6 – (a)-(d) Spectres des excitations de basse énergie, calculés par diagonalisation exacte dans les différents secteurs de symétrie, pour différents rapports  $J_{\perp}/J_1$  le long de la ligne  $J_2 = 0.6J_1$ . Les symboles pleins et hachurés sont respectivement pour  $L = 18$  et  $L = 16$ . La flèche indique le vecteur d’onde incommensurable  $q^*$  du minimum de la relation de dispersion des magnons. (e) *Scaling* des gaps singlets et triplets au point critique. Les excitations dans le secteur triplet restent gappées, tandis qu’un mode non-gappé apparaît dans le secteur singlet autour de  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ , comme le montre la fermeture du gap singlet en  $\mathbf{k} = (\pi - \frac{2\pi}{L}, 0)$ .

Dans la phase dimérisée (figure 3.6(a)), le spectre a quatre états singulets de basse énergie, pratiquement dégénérés, qui correspondent aux différentes combinaisons de deux chaînes dimérisées. Le couplage transverse  $J_{\perp}$  lève la dégénérescence et stabilise les deux configurations colonnaires, alors que les deux configurations alternées ont un gap contrôlé par  $J_{\perp}$ . Au-dessus de ces états singulets, il y a des excitations gappées à deux spinons. La levée de dégénérescence entre les configurations colonnaires et alternées agit comme une dimérisation explicite  $\delta \propto J_{\perp}$ , qui induit un potentiel attractif entre les deux spinons. Les états de basse énergie correspondants sont des états liés, décrits dans la partie 2.4.2. La dimérisation  $\delta$  lève la dégénérescence singlet/triplet, comme on peut le voir sur la figure 2.5.

Au voisinage du point critique (figure 3.6(b)), les excitations du secteur triplet restent gappées. Par contre, un mode non-gappé apparaît dans le secteur singlet à  $\mathbf{k} = (\pi, 0)$ , le vecteur d’onde de la deuxième configuration colonnaire pratiquement dégénérée avec le fondamental. L’émergence de ce mode et le gap triplet montrent que la transition est bien générée par les fluctuations de l’ordre des dimères. L’image correspondante est la fusion du cristal de dimères.

Dans la phase *rung-singlet* (figure 3.6(c)-(d)), le fondamental n’est plus dégénéré et les différentes branches d’excitations se séparent. La branche de plus basse énergie correspond à des excitations à un magnon. À fort  $J_{\perp}$ , cette branche est bien séparée du continuum et peut être étudiée analytiquement. Lorsque la frustration  $J_2/J_1$  est suffisante, la position  $k_x = q^*$  du minimum de la relation de dispersion des magnons passe de  $q^* = \pi$  à un vecteur d’onde incommensurable  $\pi/2 < q^* < \pi$ .

### 3.3 Dispersion des magnons et incommensurabilité dans la phase RVB

Comme le montrent les résultats numériques sur la chaîne  $J_1$ - $J_2$  ou sur la chaîne de spins 1 [75, 30], l'apparition de l'incommensurabilité diffère selon qu'on s'intéresse au spectre, aux fonctions de corrélation ou au facteur de structure<sup>2</sup>. Dans le cas de l'échelle frustrée, la limite à fort  $J_\perp$  permet de calculer explicitement ces différentes grandeurs et de comparer le vecteur d'onde incommensurable qui y apparaît. On précise dès maintenant la notation des trois vecteurs d'onde longitudinaux dans lesquels apparaît l'incommensurabilité :

$q$  : vecteur d'onde d'oscillation des fonctions de corrélation de spin dans l'espace réel,

$\bar{q}$  : position du maximum du facteur de structure,

$q^*$  : position du minimum de la relation de dispersion.

On reprend la description en terme des opérateurs de lien introduits dans la partie 1.2.1, mais on se place dans la base des triplets  $t_\sigma^\dagger$  ( $\sigma = \pm 1, 0$ ) sur chaque barreau,<sup>3</sup> définie par

$$|t_+\rangle = t_+^\dagger |0\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad (3.9)$$

$$|t_-\rangle = t_-^\dagger |0\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \quad (3.10)$$

$$|t_0\rangle = t_0^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (3.11)$$

Les relations de changement de base sont :

$$t_x^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (t_-^\dagger - t_+^\dagger), \quad (3.12)$$

$$t_y^\dagger = \frac{i}{\sqrt{2}} (t_+^\dagger + t_-^\dagger), \quad (3.13)$$

$$t_z^\dagger = t_0^\dagger, \quad (3.14)$$

et la contrainte (1.29) reste inchangée :

$$s^\dagger s + t_\sigma^\dagger t_\sigma = 1. \quad (3.15)$$

En négligeant la partie d'interaction entre triplets<sup>4</sup>, le hamiltonien se réécrit dans cette base :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{J_\perp}{4} \left( -3s_i^\dagger s_i + t_{i\sigma}^\dagger t_{i\sigma} \right) + \frac{J_1}{2} \left( t_{i\sigma}^\dagger t_{i+1\sigma} s_{i+1}^\dagger s_i + t_{i\sigma}^\dagger t_{i+1\sigma}^\dagger s_{i+1} s_i + \text{h.c.} \right) \\ & + \frac{J_2}{2} \left( t_{i\sigma}^\dagger t_{i+2\sigma} s_{i+2}^\dagger s_i + t_{i\sigma}^\dagger t_{i+2\sigma}^\dagger s_{i+2} s_i + \text{h.c.} \right), \quad (3.16) \end{aligned}$$

où la somme sur les indices répétés est implicite.

---

2. Le facteur de structure statique est défini comme la transformée de Fourier de la fonction de corrélation

$$S(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \rangle. \quad (3.8)$$

3. Les propriétés d'aimantation sont plus faciles à calculer dans cette base.

4. On a vu dans la partie 1.2.1 que la partie interaction (1.33) du hamiltonien ne contribue pas aux premiers ordres de la théorie des perturbations.

### 3.3.1 Calcul perturbatif de la relation de dispersion

Le calcul au deuxième ordre en  $J_1/J_\perp$  et  $J_2/J_\perp$  de la relation de dispersion (voir partie 1.2.1), donne

$$\omega_k \simeq J_\perp + \frac{3J_1^2 + J_2^2}{4J_\perp} + J_1 \cos k + J_2 \cos 2k . \quad (3.17)$$

Par rapport à la relation de dispersion (1.41) de l'échelle standard, la frustration génère l'harmonique  $2k$  à l'origine de l'incommensurabilité. En effet, la position du minimum de la relation de dispersion (3.17) est

$$\begin{cases} q^* = \pi & \text{si } J_2 \leq \frac{J_1}{4} , \\ q^* = \pm \arccos\left(-\frac{J_1}{4J_2}\right) & \text{si } J_2 > \frac{J_1}{4} . \end{cases} \quad (3.18)$$

C'est précisément le résultat du calcul classique de la partie 1.3.1, sur la chaîne  $J_1$ - $J_2$ , mais ici le calcul est exact dans la limite à fort  $J_\perp$ .

### 3.3.2 Approximation de champ moyen

On peut affiner le calcul de la relation de dispersion par une théorie de champ moyen [73, 31].<sup>5</sup> Cette méthode est non-perturbative mais suppose quand même  $J_\perp > J_{1,2}$ . L'approximation consiste à supposer qu'à cause du gap, les singulets vont condenser, c'est-à-dire que  $\langle s_i \rangle = \bar{s}$  ( $\bar{s}$  est choisi réel). De plus, on se place dans l'ensemble grand canonique : la contrainte (3.15) est imposée en moyenne sur chaque barreau  $i$  à l'aide d'un potentiel chimique  $\mu_i$ . L'invariance par translation implique  $\mu_i = \mu$ . On obtient alors un hamiltonien quadratique :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_m = L & \left( -\frac{3}{4}J_\perp \bar{s}^2 - \mu \bar{s}^2 + \mu \right) + \left( \frac{J_\perp}{4} - \mu \right) t_{i\sigma}^\dagger t_{i\sigma} \\ & + \frac{\bar{s}^2}{2} \left[ J_1 \left( t_{i\sigma}^\dagger t_{i+1\sigma} + t_{i\sigma}^\dagger t_{i+1\sigma}^\dagger \right) + J_2 \left( t_{i\sigma}^\dagger t_{i+2\sigma} + t_{i\sigma}^\dagger t_{i+2\sigma}^\dagger \right) + \text{h.c.} \right] . \end{aligned} \quad (3.19)$$

En transformée de Fourier, ce hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H}_m = L \left( -\frac{3}{4}J_\perp \bar{s}^2 - \mu \bar{s}^2 + \mu \right) + \sum_k \left[ A_k t_{k\sigma}^\dagger t_{k\sigma} + B_k \left( t_{k\sigma}^\dagger t_{-k\sigma}^\dagger + t_{k\sigma} t_{-k\sigma} \right) \right] , \quad (3.20)$$

où

$$A_k = \frac{J_\perp}{4} - \mu + 2B_k , \quad (3.21)$$

$$B_k = \frac{\bar{s}^2}{2} (J_1 \cos k + J_2 \cos 2k) . \quad (3.22)$$

---

5. Le terme d'interaction entre triplet qu'on a négligé dans le hamiltonien (3.16) peut également être traité par une approximation de champ moyen sur les opérateurs  $t^\dagger t$  et  $t t$ , mais le négliger ne modifie pratiquement pas les résultats pour  $J_\perp > J_{1,2}$ , c'est-à-dire dans le régime où l'approximation de champ moyen sur  $s$  est valide [31].

On peut diagonaliser ce hamiltonien à l'aide d'une transformation de Bogoliubov :

$$b_{k\sigma} = u_k t_{k\sigma} + v_k t_{-k\sigma}^\dagger, \quad (3.23)$$

où les  $u_k$  et  $v_k$  peuvent être choisis réels et pairs et doivent vérifier  $u_k^2 - v_k^2 = 1$ , de sorte que les  $b_{k\sigma}$  vérifient les relations de commutation bosoniques. On cherche les paramètres  $u_k, v_k$  tel que le hamiltonien soit diagonal dans la base des  $b_{k\sigma}$  :

$$\mathcal{H}_m = E_0 + \sum_k \omega_k b_{k\sigma}^\dagger b_{k\sigma}, \quad (3.24)$$

ce qui donne  $A_k = \omega_k(u_k^2 + v_k^2)$  et  $B_k = \omega_k u_k v_k$ . On en déduit :

$$\omega_k^2 = A_k^2 - 4B_k^2, \quad (3.25)$$

$$E_0 = L \left( -\frac{3}{4} J_\perp \bar{s}^2 - \mu \bar{s}^2 + \frac{3}{2} \mu - \frac{J_\perp}{8} \right) + \frac{1}{2} \sum_k \omega_k. \quad (3.26)$$

Les paramètres  $\mu$  et  $\bar{s}^2$  sont obtenus en minimisant  $E_0$ , ce qui donne le système d'équations

$$\begin{aligned} \mu &= -\frac{3}{4} J_\perp + \frac{1}{2L} \sum_k \frac{J_1 \cos(k) + J_2 \cos(2k)}{\sqrt{1 + d_1 \cos(k) + d_2 \cos(2k)}}, \\ \bar{s}^2 &= \frac{3}{2} - \frac{1}{4L} \sum_k \frac{2 + d_1 \cos(k) + d_2 \cos(2k)}{\sqrt{1 + d_1 \cos(k) + d_2 \cos(2k)}}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

où on a posé

$$d_1 = \frac{2\bar{s}^2 J_1}{\frac{1}{4} J_\perp - \mu} \quad \text{et} \quad d_2 = \frac{2\bar{s}^2 J_2}{\frac{1}{4} J_\perp - \mu}. \quad (3.28)$$

Ce système auto-cohérent peut être résolu numériquement.<sup>6</sup> On peut aussi développer  $\mu$  et  $\bar{s}$  en  $J_{1,2}/J_\perp$ , ce qui introduit une approximation supplémentaire mais permet de ne pas avoir recours au numérique. À l'ordre zéro, on obtient

$$\mu \simeq -\frac{3}{4} J_\perp \quad \text{et} \quad \bar{s} \simeq 1. \quad (3.29)$$

La relation de dispersion des magnons dans l'approximation de champ moyen s'écrit

$$\omega_k = \left( \frac{J_\perp}{4} - \mu \right) \sqrt{1 + d_1 \cos(k) + d_2 \cos(2k)}. \quad (3.30)$$

Comme  $d_2/d_1 = J_2/J_1$ , on retrouve la même condition d'apparition de l'incommensurabilité et le même vecteur d'onde  $q^*$  donnés par l'équation (3.18), qu'avec la théorie des perturbations. En développant les équations (3.27) et (3.28) au deuxième ordre en  $J_{1,2}/J_\perp$ , la relation de dispersion (3.30) devient

$$\omega_k \simeq J_\perp + J_1 \cos k + J_2 \cos 2k + \frac{J_1^2 + J_2^2}{4J_\perp} - \frac{1}{2J_\perp} (J_1 \cos k + J_2 \cos 2k)^2. \quad (3.31)$$

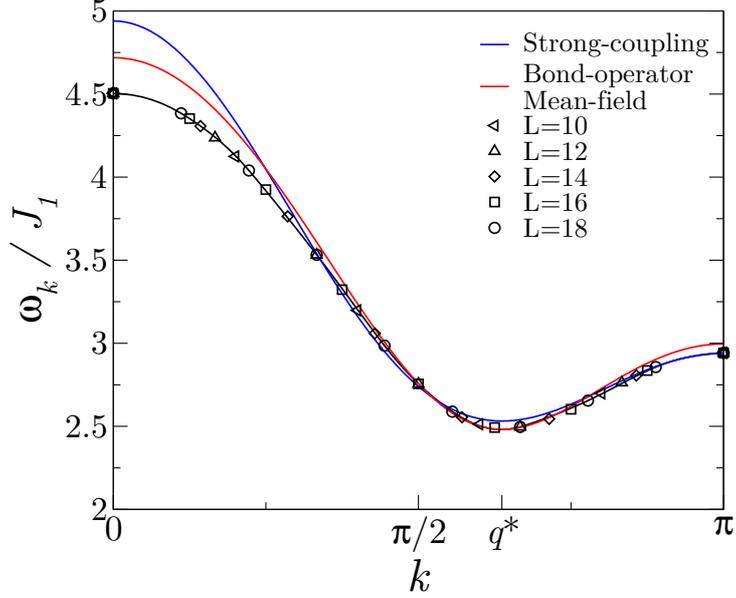


FIGURE 3.7 – Relation de dispersion des magnons dans l'échelle frustrée pour  $J_{\perp} = 3J_1$  et  $J_2 = 0.6J_1$ . Les calculs en théorie des perturbations (équation (3.17)) et champ moyen (équation (3.30)) sont comparés aux résultats numériques obtenus en diagonalisation exacte.

On retrouve la même correction au premier ordre que dans la relation de dispersion (3.17), obtenue par l'approche perturbative. Cependant, le deuxième ordre est différent ; le gap notamment est mal estimé.

On peut comparer les relations de dispersion (3.17) et (3.30) obtenues analytiquement au calcul numérique en diagonalisation exacte sur des échelles de taille  $L \leq 18$ . Comme prévu, la figure 3.7 montre un très bon accord dans le régime de fort couplage transverse. Le champ moyen prédit un peu mieux la forme de la relation de dispersion mais nécessite une correction de  $0.7(J_1^2 + J_2^2)/J_{\perp}$  pour reproduire correctement le gap [31]. Enfin, comme pour l'échelle non-frustrée, l'image du triplet qui saute de barre en barre à la limite de fort  $J_{\perp}$  reste qualitativement valable jusqu'à l'échelle isotrope  $J_1 \simeq J_{\perp}$  (comme on peut en juger sur la figure 3.6(c)).

### 3.3.3 Fonctions de corrélation et facteur de structure

Pour les systèmes antiferromagnétiques sans frustration, la tendance à s'ordonner selon Néel se traduit par le fait qu'en général  $q = q^* = \bar{q} = \pi$ . En présence de frustration, ces trois vecteurs d'onde sont a priori différents dans la mesure où les valeurs des couplages pour lesquels ils s'écartent de  $\pi$  sont différents. Pour un système gappé, la différence entre  $q$  et  $\bar{q}$  s'interprète à l'aide du critère de Rayleigh. En effet, les fonctions de corrélation oscillent à un vecteur d'onde  $q$ , sur une longueur caractéristique  $\xi_{\text{spin}}$ . La transformée de Fourier possède alors une structure avec deux pics correspondant à  $q$  et  $2\pi - q$ , dont la

6. La résolution numérique du système (3.27) de manière auto-cohérente converge de plus en plus difficilement, au fur à mesure que  $J_1$  et  $J_2$  se rapprochent de  $J_{\perp}$ . On ne peut espérer déterminer  $\mu$  et  $\bar{s}^2$  numériquement que pour  $J_{\perp} \gtrsim 2J_{1,2}$ .

largeur est contrôlée par  $1/\xi_{\text{spin}}$ . Par conséquent,  $\bar{q}$  est légèrement plus grand que  $q$  :

$$\bar{q} - q \propto \frac{1}{\xi_{\text{spin}}} . \quad (3.32)$$

De plus, lorsque  $q$  est trop proche de  $\pi$ , c'est-à-dire

$$\pi - q \lesssim \frac{1}{\xi_{\text{spin}}} , \quad (3.33)$$

l'incommensurabilité n'apparaît pas dans le facteur de structure, qui possède un seul pic aplati en  $\bar{q} = \pi$ . À partir de ce critère de Rayleigh, Nomura a proposé une interprétation phénoménologique de l'apparition de l'incommensurabilité dans les états VBS, comme la fusion puis la séparation de points de branchement dans le prolongement au plan complexe du facteur de structure [65]. Comme nous allons le voir, ce scénario se vérifie également dans la phase RVB. Dans cette phase, on peut calculer le facteur de structure dans l'approximation de champ moyen et la proposition de Nomura peut se vérifier analytiquement.

En l'absence de frustration dans la direction transverse  $y$ , la relation de dispersion à un magnon est dans le secteur  $k_y = \pi$ , et le facteur de structure est clairement maximal dans ce secteur. Le facteur de structure à  $\mathbf{k} = (k, \pi)$  est la transformée des fonctions de corrélation

$$S_k = \sum_{x=1}^L e^{ikx} \langle (\mathbf{S}_{x,1} - \mathbf{S}_{x,2}) \cdot (\mathbf{S}_{1,1} - \mathbf{S}_{1,2}) \rangle . \quad (3.34)$$

À l'aide de l'expression des opérateurs de spin (1.27), on obtient l'expression en fonction des opérateurs de lien :

$$S_k = \bar{s}^2 \left\langle \left( t_{k\sigma} + t_{-k\sigma}^\dagger \right) \left( t_{k\sigma}^\dagger + t_{-k\sigma} \right) \right\rangle . \quad (3.35)$$

En inversant la transformation de Bogoliubov (3.23), on obtient l'expression du facteur de structure à température nulle :

$$S_k = 3\bar{s}^2 (u_k - v_k)^2 = \frac{3\bar{s}^2}{\sqrt{1 + d_1 \cos k + d_2 \cos 2k}} , \quad (3.36)$$

où  $d_1$  et  $d_2$  sont définis par l'équation (3.28). Comme  $S_k \propto 1/\omega_k$ , le maximum du facteur de structure correspond au minimum de la relation de dispersion, c'est-à-dire

$$\bar{q} = q^* = \arccos \left( -\frac{J_1}{4J_2} \right) . \quad (3.37)$$

Cependant, cette égalité n'est vraie que dans le régime de fort  $J_\perp$  car la branche à un magnon est bien séparée du reste du spectre (figure 3.6). On a vérifié numériquement que pour  $J_\perp = J_1$  par exemple, la position  $\bar{q}$  du maximum du facteur de structure ne correspond plus à  $q^*$ , celle de la relation de dispersion.

Comme suggéré par la référence [65], l'incommensurabilité peut s'interpréter en étudiant les singularités du facteur de structure étendu au plan complexe. Pour cela, on introduit le polynôme

$$P(X) = 2d_2 X^2 + d_1 X + 1 - d_2 , \quad (3.38)$$

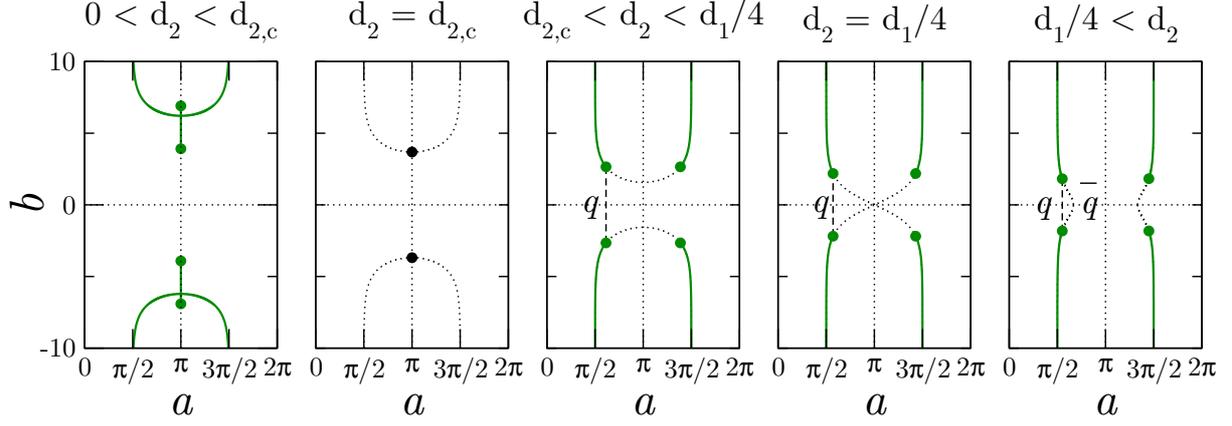


FIGURE 3.8 – Évolution dans le plan complexe  $(a, b)$  des singularités du facteur de structure calculé en champ moyen, lorsqu'on augmente la frustration. Les lignes vertes sont les lignes de coupures et les points vert, les points de branchement. Les points noirs sont des pôles. Les lignes en pointillés représentent les points tels que  $\text{Im}[P(\cos k)] = 0$ .

tel que le facteur de structure se réécrite

$$S_k = \frac{3\bar{s}^2}{\sqrt{P(\cos k)}}. \quad (3.39)$$

On pose  $k = a + ib$  où  $a \in [0, 2\pi]$  et  $b \in \mathbb{R}$ , ce qui donne

$$P(\cos k) = 1 + d_1 \cos(a) \text{ch}(b) + d_2 \cos(2a) \text{ch}(2b) - i \sin(a) \text{sh}(b) [4d_2 \cos(a) \text{ch}(b) + d_1]. \quad (3.40)$$

Sur la figure 3.8, on a représenté les lignes de coupures (où  $P(\cos k) < 0$ ) et les singularités (où  $P(\cos k) = 0$ ) du facteur de structure. Le discriminant de  $P$  change de signe en  $d_2 = d_{2,c}$  avec

$$d_{2,c} = \frac{1}{2} \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{d_1^2}{2}} \right) \simeq \frac{d_1^2}{8}. \quad (3.41)$$

- Pour  $d_2 < d_{2,c}$ ,  $P$  a deux racines réelles, inférieures à  $-1$ . Par conséquent,  $S_k$  a des lignes de coupures et quatre points de branchement sur l'axe  $\text{Re}[k] = \pi$ , de parties imaginaires  $\pm 1/\xi_{\text{spin}}^\pm$  ( $\xi_{\text{spin}}^+ > \xi_{\text{spin}}^-$ ), où

$$\xi_{\text{spin}}^\pm = \text{argch}^{-1} \left( \frac{d_1 \mp \sqrt{d_1^2 - 8d_2(1 - d_2)}}{4d_2} \right) \simeq \text{argch}^{-1} \left( \frac{J_1 \mp \sqrt{J_1^2 - 4J_2 J_\perp}}{4J_2} \right), \quad (3.42)$$

dans la limite de fort  $J_\perp$ .

- Pour  $d_2 = d_{2,c}$ ,  $P$  se factorise exactement et la racine carrée disparaît de  $S_k$ . Il n'y a plus de ligne de coupe. Les points de branchement fusionnent pour donner deux

pôles sur l'axe  $\text{Re}[k] = \pi$ , de partie imaginaire  $\pm 1/\xi_{\text{spin}}$ , où

$$\xi_{\text{spin}} = \text{argch}^{-1} \left( \frac{J_1}{4J_2} \right), \quad (3.43)$$

- Pour  $d_2 > d_{2,c}$ , les racines de  $P$  ont une partie imaginaire non-nulle. Par conséquent, les points de branchement quittent l'axe  $\text{Re}[k] = \pi$ . Leurs affixes s'écrivent  $\pm q \pm i\xi_{\text{spin}}^{-1}$  où  $q$  et  $\xi_{\text{spin}}$  vérifient le système d'équations suivant :

$$\cos(q) \text{ch}(\xi_{\text{spin}}^{-1}) = -\frac{d_1}{4d_2}, \quad (3.44)$$

$$\sin(q) \text{sh}(\xi_{\text{spin}}^{-1}) = \frac{\sqrt{8d_2(1-d_2) - d_1^2}}{4d_2}. \quad (3.45)$$

Dans la limite de fort  $J_{\perp}$ , on obtient :

$$q \simeq \arccos \left( -\frac{J_1}{2\sqrt{J_2 J_{\perp}}} \right), \quad (3.46)$$

$$\xi_{\text{spin}} \simeq \text{argch}^{-1} \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{J_{\perp}}{J_2}} \right). \quad (3.47)$$

Le départ de  $q$  par rapport à  $\pi$

$$\pi - q \sim \left( \frac{J_2}{J_1} - \frac{J_1}{4J_{\perp}} \right)^{1/2}, \quad (3.48)$$

fait apparaître le même exposant que le départ de  $q^*$  et  $\bar{q}$

$$\pi - q^* \sim \left( \frac{J_2}{J_1} - \frac{1}{4} \right)^{1/2}. \quad (3.49)$$

Cet exposant est aussi celui de l'expression (2.30) du vecteur d'onde incommensurable dans la chaîne  $J_1$ - $J_2$  impaire (partie 2.2.2). De plus, ce résultat est en accord avec les résultats numériques de la référence [75], sur la chaîne de spins 1.

La fonction de corrélation dans l'espace réel est obtenue en prenant la transformée de Fourier inverse du facteur de structure, soit à la limite thermodynamique :

$$\langle (\mathbf{S}_{x,1} - \mathbf{S}_{x,2}) \cdot (\mathbf{S}_{1,1} - \mathbf{S}_{1,2}) \rangle = \frac{3\bar{s}^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{P(\cos k)}} dk. \quad (3.50)$$

Le calcul de cette intégrale par le théorème des résidus est délicat à cause des lignes de coupures, mais le comportement en  $x$  est essentiellement donné par  $e^{iz_1 x}$  et  $e^{iz_2 x}$ , où  $z_1$  et  $z_2$  sont les singularités de  $S_k$  dans le demi-plan supérieur. De plus, la présence de la racine suggère que le résultat se comporte comme l'intégrale :

$$\int_0^{+\infty} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{k^2 + \xi^{-2}}} dk \underset{x \gg \xi}{\sim} \frac{e^{-x/\xi}}{\sqrt{x}}. \quad (3.51)$$

En effet, comme pour les corrélations dans la chaîne  $J_1$ - $J_2$  [88], la correction en  $1/\sqrt{x}$  permet de mieux fitter les corrélations calculées numériquement.<sup>7</sup> Remarquons qu'au changement de régime, cette correction disparaît et la décroissance est purement exponentielle. On en déduit le comportement des fonctions de corrélation selon les valeurs de  $d_2$ .

- Pour  $d_2 < d_{2,c}$ , on est dans le régime commensurable :

$$\langle (\mathbf{S}_{x,1} - \mathbf{S}_{x,2}) \cdot (\mathbf{S}_{1,1} - \mathbf{S}_{1,2}) \rangle \sim \frac{(-1)^x}{\sqrt{x}} \left( A e^{-x/\xi_{\text{spin}}^+} - B e^{-x/\xi_{\text{spin}}^-} \right), \quad (3.52)$$

où  $\xi_{\text{spin}}^\pm$  sont donnés par l'équation (3.42) et  $A, B$  sont des constantes qui dépendent respectivement de  $\xi_{\text{spin}}^\pm$ .

- À la transition ( $d_2 = d_{2,c}$ ), on a :

$$\langle (\mathbf{S}_{x,1} - \mathbf{S}_{x,2}) \cdot (\mathbf{S}_{1,1} - \mathbf{S}_{1,2}) \rangle \sim C (-1)^x e^{-x/\xi_{\text{spin}}}, \quad (3.53)$$

où  $\xi_{\text{spin}}$  est donné par l'équation (3.43) et  $C$  est une constante, fonction de  $\xi_{\text{spin}}$ .

- Pour  $d_2 > d_{2,c}$ , on est dans le régime incommensurable :

$$\langle (\mathbf{S}_{x,1} - \mathbf{S}_{x,2}) \cdot (\mathbf{S}_{1,1} - \mathbf{S}_{1,2}) \rangle \sim C' \frac{e^{-x/\xi_{\text{spin}}}}{\sqrt{x}} \cos(qx + \phi), \quad (3.54)$$

où  $q$  et  $\xi_{\text{spin}}$  sont respectivement donnés par les équations (3.46) et (3.47), et  $C', \phi$  sont des constantes, fonctions de  $q$  et  $\xi_{\text{spin}}$ .

Enfin, pour compléter la discussion, l'incommensurabilité n'apparaît dans le facteur de structure  $S_k$  que lorsque  $d_2$  atteint  $d_1/4 > d_{2,c}$ . On peut interpréter cette transition graphiquement : la position  $\bar{q}$  du maximum de  $S_k$  est donnée par l'intersection de l'axe réel avec les courbes d'équation

$$\cos(a) \operatorname{ch}(b) + \frac{d_1}{4d_2} = 0, \quad (3.55)$$

c'est-à-dire  $\operatorname{Im}[P(\cos k)] = 0$ . Comme le montre la figure 3.8, ces courbes sont simplement les prolongements des lignes de coupures.

Pour vérifier ces prédictions, et notamment l'expression (3.46) du vecteur d'onde incommensurable  $q$ , on a calculé en DMRG les fonctions de corrélation ainsi que leurs transformées de Fourier pour différentes valeurs de  $J_2/J_1$  et  $J_\perp/J_1$ . Les fonctions de corrélation sont extrapolées par une loi de la forme

$$\langle (\mathbf{S}_{x,1} - \mathbf{S}_{x,2}) \cdot (\mathbf{S}_{1,1} - \mathbf{S}_{1,2}) \rangle = \frac{A}{x^\alpha} (-1)^x e^{-x/\xi_{\text{spin}}}, \quad (3.56)$$

dans le régime commensurable et

$$\langle (\mathbf{S}_{x,1} - \mathbf{S}_{x,2}) \cdot (\mathbf{S}_{1,1} - \mathbf{S}_{1,2}) \rangle = \frac{A}{x^\alpha} e^{-x/\xi_{\text{spin}}} \cos(qx + \phi), \quad (3.57)$$

---

7. Cette correction n'est observable que lorsque la longueur de corrélation  $\xi_{\text{spin}}$  n'est pas trop petite, et donc quand  $J_\perp$  n'est pas trop grand devant  $J_{1,2}$ .

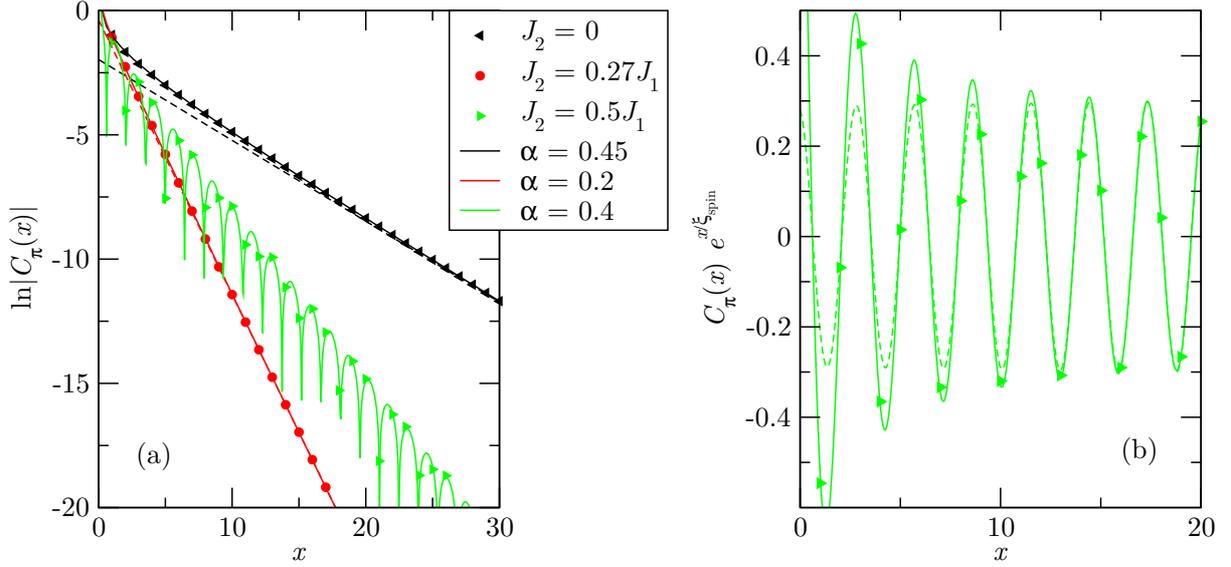


FIGURE 3.9 – Fonction de corrélation  $C_\pi(x) = \langle (\mathbf{S}_{x,1} - \mathbf{S}_{x,2}) \cdot (\mathbf{S}_{1,1} - \mathbf{S}_{1,2}) \rangle$  d’une échelle isotrope ( $J_\perp = J_1$ ), pour différentes valeurs du rapport  $J_2/J_1$ . Les résultats du DMRG (symboles) sont fittés par une enveloppe exponentielle pure  $e^{-x/\xi_{\text{spin}}}$  (lignes discontinues) et par une enveloppe avec une correction en loi de puissance  $e^{-x/\xi_{\text{spin}}}/x^\alpha$  (lignes continues). (a) Échelle semi-logarithmique. (b) Échelle dilatée montrant les oscillations dans le régime incommensurable.

dans le régime incommensurable ( $A$ ,  $\alpha$ ,  $q$  et  $\phi$  sont des paramètres de fit). Comme le montre la figure 3.9, l’exposant  $\alpha$  est proche de  $1/2$  dans les régimes commensurable et incommensurable et est fortement réduit au voisinage du changement de régime. La figure 3.10 montre un excellent accord des expressions (3.37) et (3.46) du champ moyen, avec les valeurs de  $q$  et  $\bar{q}$  déterminées numériquement. Plus  $J_\perp$  augmente, plus la différence entre  $q$  et  $\bar{q}$  est importante. Dans la limite  $J_\perp \gg J_{1,2}$ , l’incommensurabilité apparaît pour

$$\frac{J_2}{J_1} > \frac{J_1}{4J_\perp} \xrightarrow{J_\perp \gg J_1} 0 \quad (3.58)$$

dans les fonctions de corrélation, tandis qu’elle n’apparaît que pour

$$\frac{J_2}{J_1} > \frac{1}{4} \quad (3.59)$$

dans le facteur de structure et la relation de dispersion. Par ailleurs, remarquons que pour  $J_\perp = J_1$ , la situation est particulièrement trompeuse. En effet, pour cette valeur de  $J_\perp$ , l’apparition de l’incommensurabilité dans l’espace réel, donnée par la condition (3.58), coïncide exactement avec son apparition dans l’espace de Fourier à fort  $J_\perp$ , donnée par la condition (3.59). Le départ de  $\pi$  est le même pour  $q$  (3.48) et  $q^*$  (3.49). La différence entre  $q$  et  $q^*$  n’est observée que proche de  $\pi/2$ , dans le régime à fort  $J_2$ .

Enfin, on peut se demander si  $q$ ,  $q^*$  et  $\bar{q}$  atteignent  $\pi/2$  avant que la limite  $J_1 = 0$  ne soit atteinte, de la même façon que  $q$ ,  $q^*$  et  $\bar{q}$  restent bloqués à  $\pi$ , avant l’apparition de l’incommensurabilité. Cette question est cependant difficile à trancher numériquement. S’il y a un blocage à  $\pi/2$ , on s’attend à ce qu’il ait lieu dans le régime non-perturbatif  $J_2 \gtrsim J_\perp \gtrsim J_1$ .

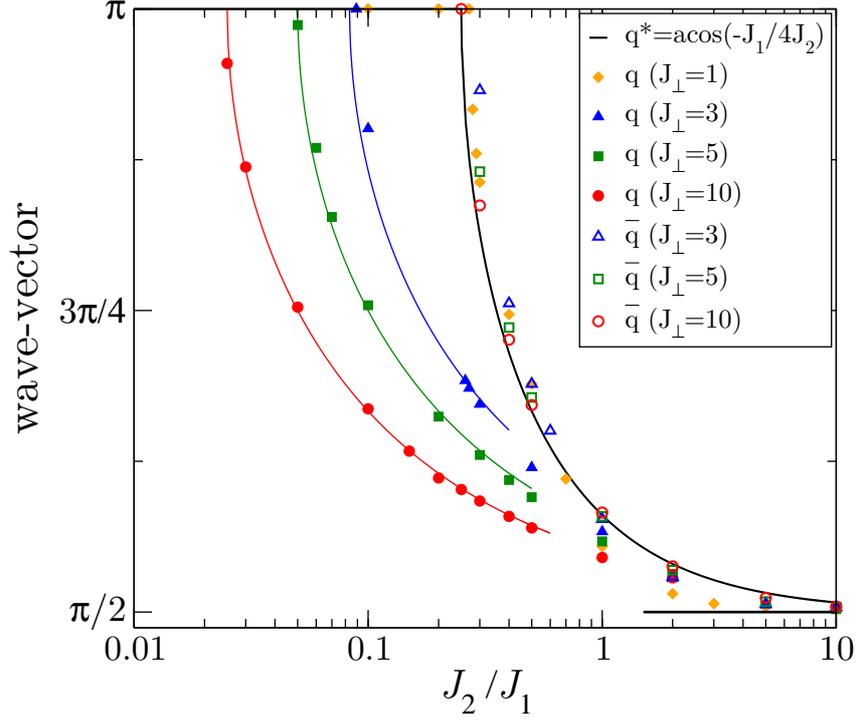


FIGURE 3.10 – Vecteurs d’onde  $q$  extraits des fonctions de corrélation et position  $\bar{q}$  du maximum du facteur de structure en fonction de la frustration  $J_2$ , pour différentes valeurs de  $J_\perp/J_1$ . Les résultats en DMRG sont comparés aux résultats (3.37) et (3.46) du champ moyen.

### 3.3.4 Gap de spin et longueurs de corrélation

#### Évolution à $J_\perp/J_1$ fixé

Dans la limite de fort  $J_\perp$ , le gap de spin  $\Delta_S$  est déduit de la relation de dispersion (3.17) de l’approche perturbative :

$$\Delta_S = \begin{cases} J_\perp - J_1 + J_2 + \frac{3}{4} \frac{J_1^2 + J_2^2}{J_\perp} & \text{pour } J_2 \leq J_1/4, \\ J_\perp - J_2 - \frac{J_1^2}{8J_2} + \frac{3}{4} \frac{J_1^2 + J_2^2}{J_\perp} & \text{pour } J_2 \geq J_1/4. \end{cases} \quad (3.60)$$

Pour  $J_\perp = 3J_1$ , la figure 3.11(b) montre déjà un très bon accord avec le calcul numérique en DMRG. Remarquablement, le gap augmente puis diminue avec la frustration, passant par un maximum local. Ce maximum est atteint pour une valeur de  $J_2/J_1$  plus grande que  $1/4$ , qui correspond à l’apparition de l’incommensurabilité dans  $q^* \simeq \bar{q}$ . À l’ordre zéro en  $J_2/J_\perp$ , le maximum de (3.60) a lieu à  $J_2 \simeq J_1/\sqrt{8}$ , en accord avec la figure 3.11(b). Pour l’échelle isotrope ( $J_\perp = J_1$ ), l’expression (3.60) n’est plus quantitative, mais l’existence d’un maximum local et sa position au-delà de l’apparition de l’incommensurabilité restent vérifiées (figure 3.11(a)).

Le comportement de la longueur de corrélation de spin  $\xi_{\text{spin}}$  est différent de celui du gap. L’expression de  $\xi_{\text{spin}}$  dans l’approximation de champ moyen est donnée par les équations (3.42), (3.43) et (3.47). Le comportement de  $\xi_{\text{spin}}$  est singulier au changement

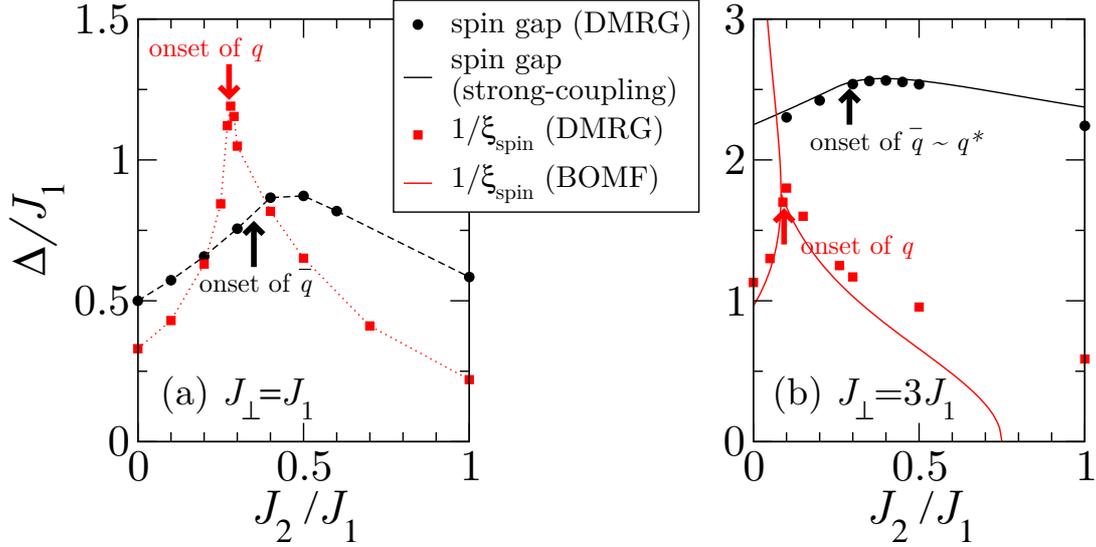


FIGURE 3.11 – Gap triplet et inverse de la longueur de corrélation de spin en fonction de la frustration  $J_2/J_1$  à  $J_\perp/J_1$  fixé. Les apparitions de l'incommensurabilité dans la fonction de corrélation ( $q$ ) et dans le facteur de structure ( $\bar{q}$ ) sont indiquées par des flèches. (a) Échelle isotrope ( $J_\perp = J_1$ ), pour laquelle  $q \simeq q^*$ . Les lignes en tirets et pointillés sont juste des guides pour les yeux. (b) Limite perturbative ( $J_\perp = 3J_1$ ) : le DMRG est comparé avec le calcul perturbatif pour le gap et avec le champ moyen (BOMF) pour la longueur de corrélation de spin.

de régime. Du côté commensurable,  $\xi_{\text{spin}}$  a le même comportement critique (3.48) que  $q$  du côté incommensurable :

$$\xi_{\text{spin}}^\pm - \text{argch} \left( \frac{J_\perp}{J_1} \right) \sim \pm \left( \frac{J_1}{4J_\perp} - \frac{J_2}{J_1} \right)^{1/2}, \quad (3.61)$$

Du côté incommensurable, la dérivée de  $\xi_{\text{spin}}$  reste finie, comme pour  $q$  du côté commensurable, sauf que la dérivée de  $\xi_{\text{spin}}$  n'est pas nulle. La figure 3.11(b) montre un bon accord avec le numérique, dans le régime de fort  $J_\perp$ . Cependant, l'accord est moins bon que pour le vecteur d'onde  $q$  (figure 3.10), car il faut se rappeler que le gap n'est pas bien reproduit dans l'approximation de champ moyen (voir partie 3.3.2). On a vérifié en DMRG que ce comportement singulier de  $\xi_{\text{spin}}$  reste valable tout le long de la ligne d'apparition de l'incommensurabilité dans les fonctions de corrélation représentée sur le diagramme de phase de la figure 3.3. Par ailleurs, comme  $\xi_{\text{spin}}^- \ll 1$ , l'existence de la seconde longueur de corrélation  $\xi_{\text{spin}}^-$  du côté commensurable est difficile à mettre en évidence numériquement.

### Évolution à $J_2/J_1$ fixé

On étudie maintenant le comportement du gap de spin à travers la transition de phase, en augmentant le couplage transverse  $J_\perp/J_1$  le long de la ligne  $J_2 = 0.6J_1$ . Les résultats obtenus en DMRG sont représentés figure 3.12.

- Le gap dépend peu de  $J_\perp$  dans la phase *columnar-dimer*, car les excitations de spins (paires de spinons) restent essentiellement localisées sur un montant de l'échelle. Le

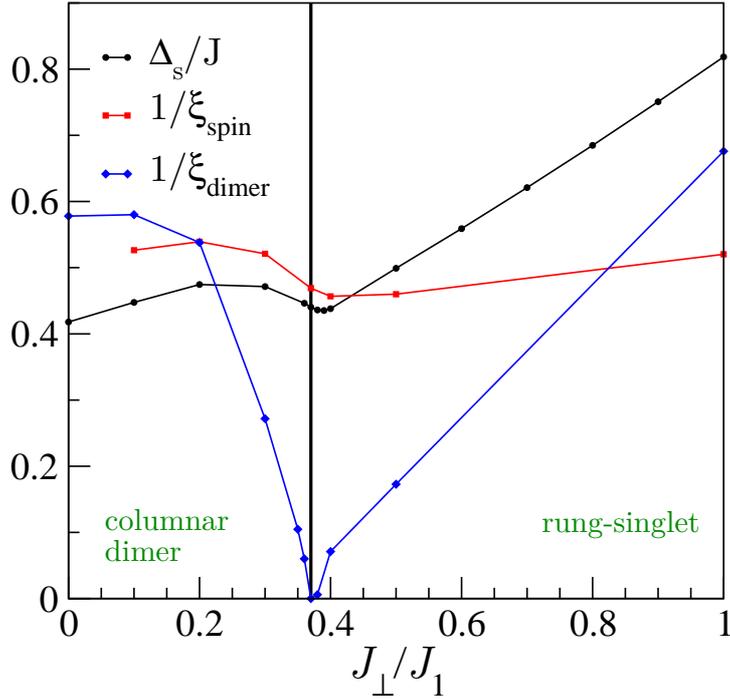


FIGURE 3.12 – Évolution du gap triplet et des longueurs caractéristiques avec  $J_{\perp}/J_1$ , à  $J_2 = 0.6J_1$  fixé. La ligne verticale indique la position du point critique.

couplage transverse induit à la fois des fluctuations RVB dans l'ordre de dimères et un faible échange des paires de spinons entre les deux montants, qui donne au gap un comportement non-monotone.

- Dans la phase *rung-singlet*, le gap est essentiellement contrôlé par la formation de triplets sur les barreaux et croît linéairement avec  $J_{\perp}$  dans le régime de fort couplage, d'après l'expression (3.60).
- Au voisinage de la transition, le gap admet un minimum local non-trivial, pour une valeur de  $J_{\perp}$  légèrement supérieure à la valeur critique.

Il est intéressant de comparer ce comportement à ceux des longueurs caractéristiques du système : la longueur de corrélation de spin  $\xi_{\text{spin}}$  et la longueur associée à l'ordre des dimères  $\xi_{\text{dimer}}$ . Conformément aux prédictions de la partie 3.2.1,  $\xi_{\text{dimer}}$  diverge à la transition, alors que  $\xi_{\text{spin}}$  reste finie. Comme le gap de spin,  $\xi_{\text{spin}}^{-1}$  admet un minimum proche de la transition, pour une valeur de  $J_{\perp}$  légèrement supérieure à celle du minimum du gap de spin.

### Évolution du gap de spin à travers le diagramme de phase

La figure 3.13 montre le comportement du gap à travers la totalité du diagramme de phase. Le minimum local, observé près de la ligne de transition, et le maximum local, au voisinage de l'apparition de l'incommensurabilité, donnent lieu à un point selle à peu près à l'intersection des lignes de transition.

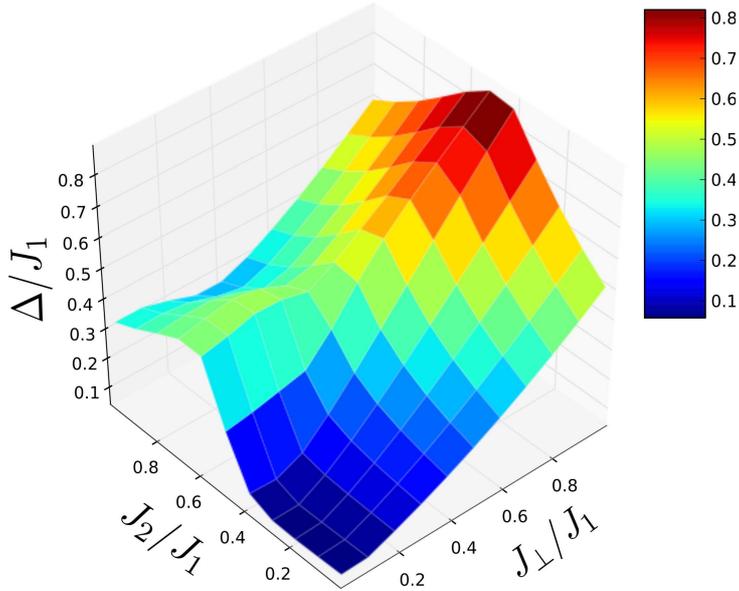


FIGURE 3.13 – Gap triplet calculé en DMRG pour  $L = 64$ , en fonction de  $J_{\perp}$  et  $J_2$ , à  $J_1$  fixé.

### 3.4 Thermodynamique

Dans cette partie, on discute quelques questions liées à la thermodynamique du modèle. Les courbes de susceptibilité magnétique et de chaleur spécifique, en fonction de la température, peuvent être calculées numériquement en diagonalisant complètement le hamiltonien. Les moyens de calcul restreignent cette méthode à des échelles de taille maximale  $L = 10$ . Dans la région du diagramme de phase où les échelles d'énergie sont petites (voir figure 3.13), les longueurs de corrélations sont grandes et on s'attend à des effets de taille finie importants. C'est pourquoi on discute le cas d'échelle dans la phase *rung-singlet*, avec un  $J_{\perp}$  suffisamment grand. On peut cependant faire quelques commentaires qualitatifs sur la thermodynamique de la phase *columnar-dimer*. Comme on l'a vu sur la figure 3.6, il existe quatre états de basse énergie dans le secteur singulet, qui sur des échelles de taille finie, contribuent à la chaleur spécifique, mais pas à la susceptibilité. Au point critique, à cause du mode non-gappé qui se développe dans le secteur singulet, on peut supposer que la chaleur spécifique a un comportement linéaire à basse température (en accord avec l'exposant universel de la classe d'universalité d'Ising), alors que la susceptibilité magnétique tend vers zéro exponentiellement, avec une échelle d'énergie donnée par le gap de spin. Les tailles de système auxquelles on a accès sont malheureusement trop petites pour démontrer ce scénario.

On étudie maintenant la susceptibilité magnétique dans la phase *rung-singlet*. Comme on a une expression analytique (3.17) pour la relation de dispersion  $\omega_k$  à un magnon dans le régime de fort couplage  $J_{\perp}$ , on peut dériver la susceptibilité en supposant les magnons indépendants. Le problème est que les magnons ne sont ni des bosons, ni des fermions, car il ne peuvent pas être à deux sur le même barreau, mais peuvent être plusieurs dans le même état  $(\mathbf{k}, \sigma)$ . En effet, le nombre d'états à  $N$  magnons sur  $L$  barreaux est  $3^N \binom{L}{N}$ . L'approximation proposée par Troyer et al. [81] consiste à modifier légèrement la fonction de partition grand canonique  $\Xi$  de sorte que chaque  $N$  contribue avec la bonne entropie :

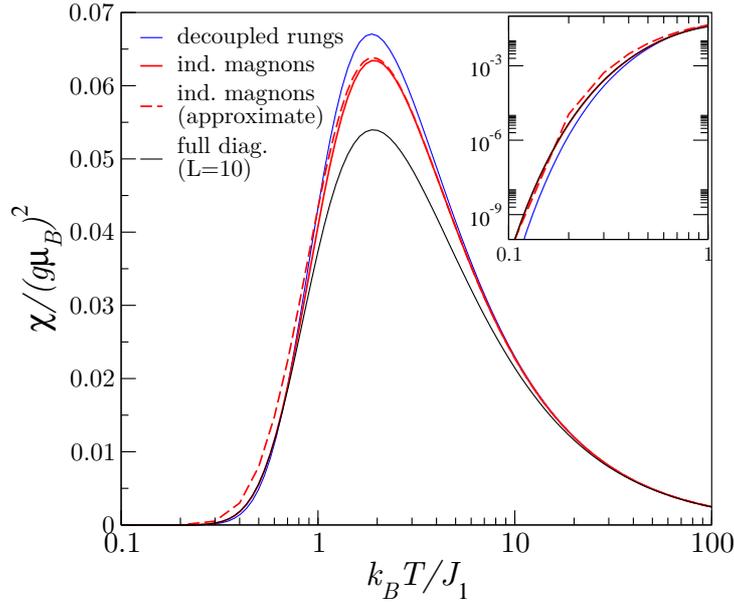


FIGURE 3.14 – Susceptibilité magnétique  $\chi$  en fonction de la température  $T$  pour  $J_{\perp} = 3J_1$  et  $J_2 = J_1/2$ . L'encart montre le comportement à basse température en échelle logarithmique.

on prend

$$\Xi = \sum_{N=0}^L \frac{3^N \binom{L}{N}}{(3L)^N} Z_N, \quad (3.62)$$

où  $Z_N$  est la fonction de partition canonique pour  $N$  magnons discernables. On en déduit une expression approchée de la susceptibilité magnétique :

$$\chi(\beta) = \beta \frac{z(\beta)}{1 + 3z(\beta)}, \quad (3.63)$$

où  $\beta = 1/k_B T$  est la température inverse, et

$$z(\beta) = \frac{1}{L} \sum_k e^{-\beta \omega_k} \quad (3.64)$$

la fonction de partition à un magnon. Le résultat de cet ansatz avec la relation de dispersion (3.17) est comparé avec le calcul numérique sur la figure 3.14. Le gap étant bien capté par la relation de dispersion perturbative (3.17), le comportement à basse température

$$\chi(\beta) \propto \sqrt{\beta} e^{-\beta \Delta_S}, \quad (3.65)$$

pour lequel les effets à plusieurs magnons (à la fois d'interaction et de statistique) sont négligeables, est bien reproduit. Dans la limite haute température, on retrouve la bonne loi de Curie :

$$\chi(\beta) \simeq \frac{\beta}{4}, \quad (3.66)$$

mais cette loi est tout aussi bien captée par des barreaux découplés (figure 3.14). À température intermédiaire  $T \sim \Delta_S/k_B$ , dans la région du maximum, la comparaison est

la plus mauvaise, illustrant le fait que la valeur et la position du maximum de  $\chi$  sont un problème difficile [41].

On peut cependant se faire une idée qualitative de l'effet de la frustration dans la limite de fort  $J_\perp$ , en développant les expressions (3.63) et (3.64) en  $J_{1,2}/J_\perp$ . On obtient alors

$$\chi(\beta) \simeq \chi_0(\beta) \left[ 1 - \frac{1}{1 + 3e^{-\beta J_\perp}} \left( \frac{3 J_{\text{eff}}}{4 J_\perp} (\beta J_{\text{eff}}) - \frac{1}{4} (\beta J_{\text{eff}})^2 \right) \right], \quad (3.67)$$

où

$$\chi_0(\beta) = \beta \frac{e^{-\beta J_\perp}}{1 + 3e^{-\beta J_\perp}} \quad (3.68)$$

est la susceptibilité de barreaux  $J_\perp$  découplés et  $J_{\text{eff}} = \sqrt{J_1^2 + J_2^2}$ . En dépit d'approximations sévères, cette formule rend compte de la réduction du maximum avec  $J_{\text{eff}}$ . Dans la mesure où  $J_{\text{eff}}$  augmente avec la frustration, on s'attend à ce que le maximum de  $\chi$  dépende largement de la frustration.

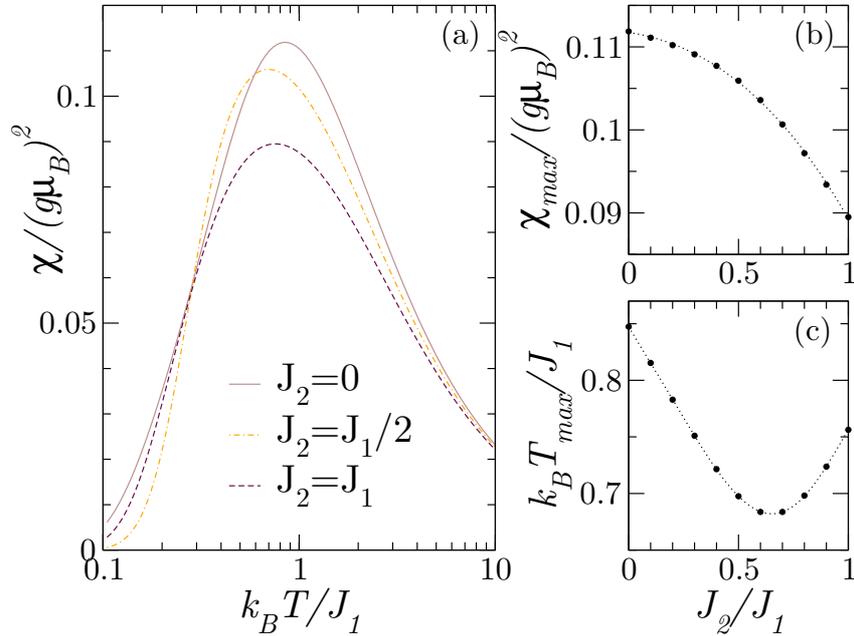


FIGURE 3.15 – (a) Évolution de la susceptibilité avec la frustration  $J_2/J_1$  pour une échelle isotrope ( $J_\perp = J_1$ ). (b) Maximum de la susceptibilité. (c) Température du maximum.

Pour préciser l'effet de la frustration dans la phase *rung-singlet*, on a tracé sur la figure 3.15, la susceptibilité d'une échelle isotrope de taille  $L = 10$ , pour plusieurs valeurs de  $J_2$ . L'évolution de ces courbes est à la fois contrôlée par le gap et la frustration. Le gap peut être extrait du comportement à basse température, mais comme celui-ci a un comportement non-monotone avec la frustration (figure 3.11), sa seule détermination ne suffit pas à déterminer  $J_2$ . Le régime à haute et moyenne températures est lui davantage contrôlé par  $J_{\text{eff}}/J_\perp$  et montre une réduction systématique du maximum. La position du maximum par contre, a un comportement non-monotone en fonction de  $J_2/J_1$ , réminiscent du comportement du gap. Ce comportement non-trivial du maximum peut certainement être captée par des développements à haute température tels que ceux présentés dans la référence [66].



# Chapitre 4

## Impuretés non-magnétiques dans les échelles

Ce chapitre est consacré à l'effet d'impuretés non-magnétiques dans le modèle d'échelle frustrée du chapitre 3. Cette étude est motivée par les expériences sur les composés  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$  et  $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$  dopés avec du zinc [6, 10].

Dans un premier temps, on étudie l'aimantation à champ nul et la constante de Curie, à température nulle, par des arguments probabilistes introduits par la référence [78]. De plus, la distribution des tailles d'échelles due aux coupures par les impuretés est déterminée exactement. En s'appuyant sur les résultats du chapitre précédent, on étudie ensuite les interactions effectives entre impuretés dans le cas frustré. Enfin, on discute les effets des impuretés sur la courbe d'aimantation à bas champ et sur la loi de Curie à basse température. On montre notamment, en introduisant un modèle de dimères aléatoires, que la courbe d'aimantation et le comportement en température de la constante de Curie permettent tous deux de sonder la distribution des couplages effectifs entre impuretés.

On note  $z$  la concentration en impuretés et la moyenne sur le désordre est indiquée par une barre.

### 4.1 Résultats exacts sur un réseau bipartite à température nulle

En l'absence de frustration, on peut déterminer certaines propriétés à température nulle, et notamment la constante de Curie. Les résultats obtenus dans cette partie constituent une amélioration de résultats obtenus par Sigrist et Furusaki [78]. Ces résultats sont plus généraux que le cas de l'échelle à deux montants : les seules hypothèses sont d'avoir un réseau bipartite et que le réseau percole, c'est à dire qu'on ne forme pas de domaines déconnectés.

#### 4.1.1 Distribution du spin total

Frischmuth et al. ont déterminé la distribution du spin total sur une chaîne de longueur  $\ell$  avec des couplages (uniquement aux premiers voisins) aléatoires ferromagnétiques ou antiferromagnétiques [27, 28]. Dans ce cas, le spin total est simplement une marche

aléatoire à une dimension de longueur  $\ell$ . Le résultat est sensiblement différent lorsque les spins (ou les vacances) sont disposés aléatoirement sur un réseau sous-jacent.

On considère un réseau bipartite de  $N$  sites, de sous-réseaux  $A$  et  $B$ , dont on suppose qu'ils ont le même nombre de sites  $N/2$ .  $N_i = zN$  impuretés sont distribuées uniformément sur le réseau et on note respectivement  $N_i^A$  et  $N_i^B$  le nombre d'impuretés sur chaque sous-réseau. On suppose en outre que les impuretés ne séparent pas le réseau en deux réseaux déconnectés. Suivant l'idée originale de Sigrist et Furusaki [78], on applique le théorème de Marshall présenté au chapitre 1. Pour une configuration d'impuretés donnée, le spin du fondamental est

$$S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}|N_i^A - N_i^B| = \frac{1}{2}|2N_i^A - N_i|. \quad (4.1)$$

La probabilité d'avoir une configuration avec  $N_i^A = n$  impuretés sur le sous-réseau  $A$ , et donc  $N_i^B = N_i - n$  sur le sous-réseau  $B$ , s'écrit

$$\mathbb{P}(N_i^A = n) = \frac{\binom{N/2}{n} \binom{N/2}{N_i - n}}{\binom{N}{N_i}}, \quad (4.2)$$

d'où la probabilité d'avoir un spin total  $S$  :

$$\mathbb{P}(S_{\text{tot}} = S) = \frac{\binom{N/2}{\frac{N_i}{2} + S} \binom{N/2}{\frac{N_i}{2} - S}}{\binom{N}{N_i}} (2 - \delta_{S,0}), \quad (4.3)$$

où  $S \in [0, \frac{N_i}{2}]$ . Ce résultat exact va nous permettre de calculer numériquement le spin total moyen et la constante de Curie à température nulle. Dans la limite  $N_i \gg 1$  (et  $z$  fixé), d'après le théorème central limite,  $P(S_{\text{tot}})$  converge vers une loi gaussienne. Une approximation de point selle donne le comportement asymptotique suivant :

$$\mathbb{P}(S_{\text{tot}} = S) \simeq \frac{2}{\sqrt{2\pi\sigma_S^2}} e^{-S^2/2\sigma_S^2}, \quad (4.4)$$

où la variance est donnée par

$$\sigma_S^2 = \frac{N_i}{4}(1 - z). \quad (4.5)$$

L'expression (4.4) permet de calculer le spin moyen et le spin carré moyen<sup>1</sup> dans la limite  $N_i \gg 1$ , soit

$$\overline{S_{\text{tot}}} \simeq \sqrt{\frac{1-z}{2\pi}} \sqrt{N_i} \quad \text{et} \quad \overline{S_{\text{tot}}^2} \simeq \frac{1-z}{4} N_i. \quad (4.7)$$

On a vérifié numériquement ces expressions sur la figure 4.1. Sous ces hypothèses, le spin moyen par impureté tend vers zéro à la limite thermodynamique ; il n'y a pas d'aimantation spontanée, même à température nulle, et le système est paramagnétique.

1. Le spin carré moyen peut se calculer exactement à partir de la distribution de probabilité (4.3). On obtient alors

$$\overline{S_{\text{tot}}^2} = \frac{1}{\binom{N}{N_i}} \left[ \frac{N_i^2}{4} \binom{N}{N_i} - N(N_i - 1) \binom{N-1}{N_i-1} + N(N-1) \binom{N-2}{N_i-2} \right]. \quad (4.6)$$

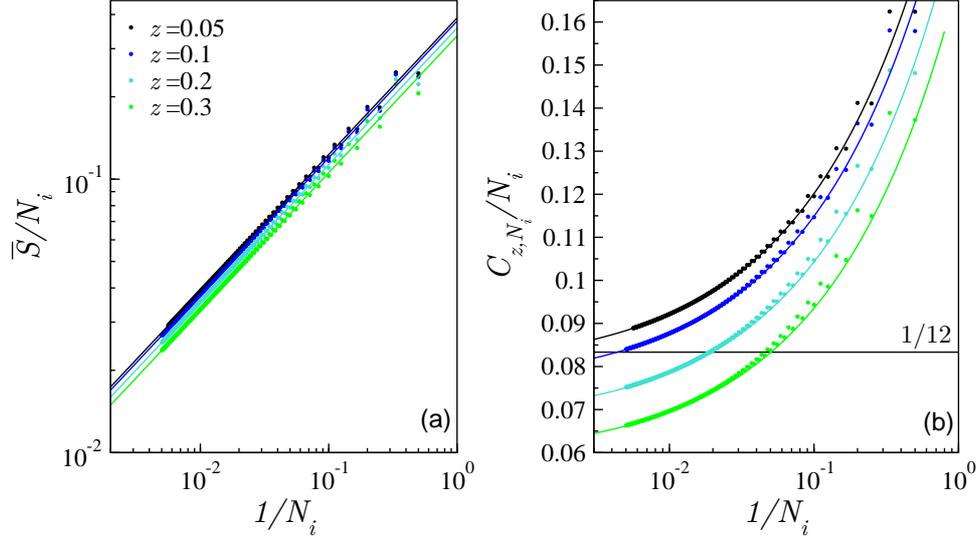


FIGURE 4.1 – (a) Corrections de taille finie sur le spin total moyen  $\overline{S}_{\text{tot}}$ , pour quatre concentrations  $z$  différentes. Le calcul numérique exact (points) est comparé à l'équation (4.7). (b) Corrections de taille finie sur la constante de Curie à température nulle, comparées avec l'équation (4.13). La ligne à  $1/12$  montre le résultat généralement admis.

### 4.1.2 Loi de Curie

On étudie maintenant la susceptibilité magnétique uniforme du système avec impuretés

$$\chi(T) = \frac{\partial m}{\partial H}(H = 0), \quad (4.8)$$

où  $m$  est la densité d'aimantation définie par

$$m(H, T) = \frac{2 \langle S_{\text{tot}}^z \rangle}{N}. \quad (4.9)$$

En l'absence d'interactions entre impuretés, ou à des températures supérieures à l'échelle d'énergie  $J_0$  de ces interactions, la contribution des  $N_i = zN$  impuretés libérant chacune un spin  $1/2$  est la fonction de Brillouin

$$m(H, T) = z \operatorname{th} \left( \frac{H}{2T} \right). \quad (4.10)$$

La susceptibilité correspondante est une loi de Curie  $\chi(T) = c/T$  où  $c = z/2$  est la constante de Curie définie par

$$c = T \frac{\partial m}{\partial H}(H = 0) = \frac{2 \overline{\langle S_{\text{tot}}^z \rangle^2}}{N}. \quad (4.11)$$

À température nulle, on a

$$\overline{\langle S_{\text{tot}}^z \rangle^2} = \frac{1}{3} \overline{S_{\text{tot}}(S_{\text{tot}} + 1)}, \quad (4.12)$$

donc d'après les expressions (4.7)

$$c_{z,N_i}(T=0) = \frac{z(1-z)}{6} \left[ 1 + \sqrt{\frac{8}{\pi(1-z)} N_i^{-1/2}} \right]. \quad (4.13)$$

Les effets de taille finie sur  $c$  à température nulle sont représentés sur la figure 4.1. Ils sont essentiels pour interpréter les simulations à taille finie. À la limite thermodynamique et dans la limite diluée  $z \ll 1$ , on retrouve la valeur  $c \simeq z/6$  obtenue par la référence [78] en négligeant l'effet du réseau.

Ainsi, la constante de Curie passe de  $z(1-z)/6$  à très basse température, à  $z/2$  pour des températures intermédiaires inférieures au gap  $\Delta_S$ . À haute température, tous les spins se comportent essentiellement comme des spins libres et la constante de Curie atteint  $(1-z)/2$  [78]. Pour un système qui possède un gap de spin  $\Delta_s$  en l'absence d'impuretés, le plateau intermédiaire n'existe que si l'échelle d'énergie  $J_0$  correspondant aux interactions entre impuretés et  $\Delta_S$  sont bien séparés. Comme on va le voir, ce n'est pas le cas dans les échelles où  $J_0 \sim J_\perp \sim \Delta_S$  (figure 4.6).

### 4.1.3 Effets des coupures

Les résultats à température nulle  $\overline{S_{\text{tot}}} = 0$  et  $c = z(1-z)/6$  sont exacts en supposant qu'il n'y ait pas de coupure du réseau. Cependant, dans le cas de l'échelle non-frustrée<sup>2</sup>, la connectivité est coupée lorsque

- deux impuretés sont sur le même barreau,
- deux impuretés sont sur la diagonale d'une plaquette (figure 4.7(a)).

À cause de ces coupures, le système à la limite thermodynamique est composé d'un ensemble d'échelles de taille finie déconnectées et il faut moyenner les expressions (4.7) sur la distribution des tailles des sous-systèmes  $\rho(\ell)$  [78].<sup>3</sup> Par ailleurs, Trinh et al. ont montré que ces coupures induisent, pour la longueur de corrélation du système dopé, une valeur maximale de l'ordre de  $z^{-2}$ , qui n'est cependant atteinte que pour des très basses température [80].

### Distribution des tailles

Si on considère une impureté à la position  $(x, 0)$ , il y a trois positions pour une seconde impureté qui brisent l'échelle :  $(x-1, 1)$ ,  $(x, 1)$  et  $(x+1, 1)$ . Dans la limite diluée  $z \ll 1$ , la densité de coupures est donc  $3z^2$  et la longueur moyenne des échelles  $\bar{\ell} \simeq 1/3z^2$ . Comme les positions des coupures ne sont pas corrélées (à suffisamment grandes distances), il est raisonnable de supposer que le nombre de coupures suit un processus de Poisson, soit

$$\rho(\ell) \simeq \zeta e^{-\zeta \ell}, \quad (4.14)$$

avec  $\zeta \simeq 3z^2$ .

---

2. En présence de couplages aux seconds voisins, les coupures sont également possibles, mais beaucoup plus rares puisqu'elles nécessitent d'avoir quatre impuretés sur une plaquette.

3. En réalité, la concentration en impuretés fluctue d'un sous-système à l'autre, autour de la valeur moyenne  $z$ . Rigoureusement, il faudrait donc considérer la distribution jointe des tailles et des nombres d'impuretés. Cependant, l'approximation qui consiste à négliger ces fluctuations c'est-à-dire à supposer qu'un sous-système de taille  $\ell$  contient  $N_i = 2\ell z$  impuretés donne des résultats satisfaisants.

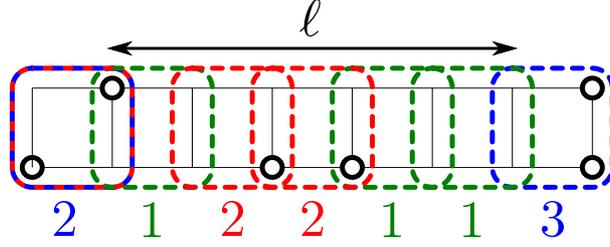


FIGURE 4.2 – Chaîne de Markov correspondant à une configuration d'impuretés. La plaquette de départ brise l'échelle, mais est considérée comme dans l'état 2.

En fait, la distribution des tailles peut être calculée exactement. Pour cela, l'échelle est décrite par une chaîne de Markov  $(X_n)_{n \geq 0}$ , où  $X_n$  représente la configuration des impuretés sur la plaquette  $n$  constituée des barreaux  $n$  et  $n + 1$ . Ce processus vérifie bien la propriété de Markov : la configuration sur la plaquette  $n + 1$  ne dépend que de la configuration sur la plaquette  $n$ , avec laquelle elle partage un barreau. Les  $2^4$  configurations sur une plaquette  $n$  sont classées en trois états, correspondant aux valeurs possibles pour la variable  $X_n$  :

1. la plaquette ne brise pas l'échelle et il n'y a pas d'impureté sur le barreau  $n + 1$ ,
2. la plaquette ne brise pas l'échelle et il y a une impureté sur le barreau  $n + 1$ ,
3. la plaquette brise l'échelle.

Les probabilités de transition à partir de l'état 3 ne sont pas utiles et on peut prendre cet état comme un état piège. La matrice de transition  $Q$ , dont les éléments  $Q_{ij}$  sont les probabilités de passer de l'état  $i$  à l'état  $j$ , s'écrit

$$Q = \left( \begin{array}{cc|c} \tilde{Q} & & z^2 \\ \hline 0 & 0 & 1 \end{array} \right), \quad (4.15)$$

où

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} (1-z)^2 & 2z(1-z) \\ (1-z)^2 & z(1-z) \end{pmatrix}. \quad (4.16)$$

La distribution  $\rho(\ell)$  est la distribution des distances pour atteindre l'état 3, donnée par

$$\rho(\ell) = \mathbb{P}(X_\ell = 3, X_{\ell-1} \neq 3, \dots, X_0 \neq 3) = \zeta_{\ell-1} \prod_{n=0}^{\ell-2} (1 - \zeta_n), \quad (4.17)$$

où

$$\zeta_n = \mathbb{P}(X_{n+1} = 3 | X_n \neq 3) = \frac{z^2 \mathbb{P}(X_n = 1) + z \mathbb{P}(X_n = 2)}{\mathbb{P}(X_n = 1) + \mathbb{P}(X_n = 2)}. \quad (4.18)$$

Partant d'une distribution initiale pour  $X_0$

$$P_0 = (p \quad 1-p \quad 0), \quad (4.19)$$

on montre par récurrence que

$$\mathbb{P}(X_n = i) = (P_0 Q^n)_i. \quad (4.20)$$

On en déduit l'expression de  $\zeta_n$

$$\zeta_n = \frac{(p-1-p) \tilde{Q}^n \left( \begin{smallmatrix} z^2 \\ z \end{smallmatrix} \right)}{(p-1-p) \tilde{Q}^n \left( \begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix} \right)}. \quad (4.21)$$

La distribution exacte (4.17) est différente de la loi (4.14) mais  $\zeta_n$  converge rapidement vers une constante indépendante de  $p$

$$\zeta = \frac{1}{2} \left( 1 + z - (1-z) \sqrt{1 + 4z(1-z)} \right) \underset{z \ll 1}{\sim} 3z^2. \quad (4.22)$$

Par conséquent, la loi (4.17) est pratiquement une loi géométrique de paramètre  $\zeta$  :

$$\rho(\ell) \simeq \zeta(1-\zeta)^{\ell-1}, \quad (4.23)$$

dont la limite continue est bien la loi (4.14).

### Aimantation et constante de Curie à la limite thermodynamique ( $T = 0$ )

Les expressions (4.7) du spin total et du spin total au carré doivent être moyennées sur les différentes tailles  $\ell$  de sous-systèmes, soit, en négligeant les fluctuations du nombre d'impuretés,

$$\overline{S_{\text{tot}}} \simeq \sum_{\ell=1}^{+\infty} \rho(\ell) \sqrt{\frac{z}{\pi}(1-z)\ell} \quad \text{et} \quad \overline{S_{\text{tot}}^2} \simeq \sum_{\ell=1}^{+\infty} \rho(\ell) \frac{z}{2}(1-z)\ell. \quad (4.24)$$

En utilisant l'approximation par une loi géométrique (4.23) pour la distribution des tailles<sup>4</sup>, on en déduit

$$\overline{S_{\text{tot}}} \simeq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{z}{\zeta}(1-z)} \quad \text{et} \quad \overline{S_{\text{tot}}^2} \simeq \frac{z}{2\zeta}(1-z)(1-\zeta). \quad (4.25)$$

Il faut ensuite multiplier ces expressions par la densité de sous-systèmes  $\zeta$ .

En particulier, la densité de spin total n'est pas nulle à la limite thermodynamique. Par conséquent, l'aimantation à température nulle saute à une valeur  $\delta m$  finie pour un champ infinitésimal :

$$m(T=0) \xrightarrow{H \rightarrow 0^+} \delta m. \quad (4.26)$$

L'aimantation et la constante de Curie à température nulle s'écrivent

$$\delta m \simeq \frac{1}{2} \sqrt{z\zeta(1-z)} \quad \text{et} \quad c \simeq \frac{z}{6}(1-z)(1-\zeta) + \frac{1}{6} \sqrt{z\zeta(1-z)}, \quad (4.27)$$

soit dans la limite diluée  $z \ll 1$

$$\delta m \sim \frac{\sqrt{3}}{2} z^{3/2} \quad \text{et} \quad c \sim \frac{z}{6} + \frac{z^{3/2}}{2\sqrt{3}} - \frac{z^2}{6}. \quad (4.28)$$

---

4. Pour calculer le spin moyen, il faut approcher la somme par une intégrale et utiliser la limite continue (4.14) pour la distribution des tailles. On fait ainsi apparaître  $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$ .

## 4.2 Modèle effectif de basse énergie

### 4.2.1 Hamiltonien effectif

On va maintenant dériver le hamiltonien de basse énergie qui rend compte des interactions effectives entre impuretés, pour un modèle général de  $N$  spins en interaction. Le hamiltonien sans impuretés se met sous la forme

$$\mathcal{H}_{\text{clean}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} J_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}'}, \quad (4.29)$$

où  $J_{\mathbf{R}}$  est la forme générale des couplages microscopiques.<sup>5</sup> On considère maintenant  $N_i$  impuretés non-magnétiques aux positions  $\mathbf{I}$  du réseau. Le hamiltonien s'écrit alors

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r} \neq \mathbf{I}} \sum_{\mathbf{r}' \neq \mathbf{I}} J_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}'}, \quad (4.30)$$

c'est-à-dire

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{clean}} + \mathcal{H}_{\text{imp}}, \quad (4.31)$$

où

$$\mathcal{H}_{\text{imp}} = - \sum_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{I}} J_{\mathbf{r}-\mathbf{I}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{I}}. \quad (4.32)$$

Remarquons qu'on a introduit des opérateurs de spin effectifs aux positions  $\mathbf{I}$  des impuretés, alors que ces sites sont justement vacants. Le hamiltonien (4.32) se met sous la forme

$$\mathcal{H}_{\text{imp}} = - \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{H}_{\mathbf{r}}^{\text{eff}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}}, \quad (4.33)$$

où

$$\mathbf{H}_{\mathbf{r}}^{\text{eff}} = \sum_{\mathbf{I}} J_{\mathbf{r}-\mathbf{I}} \mathbf{S}_{\mathbf{I}} \quad (4.34)$$

est un champ magnétique effectif. On suppose que l'on peut traiter  $\mathcal{H}_{\text{imp}}$  en perturbation de  $\mathcal{H}_{\text{clean}}$ , autrement dit que la présence des impuretés ne modifie pas trop le fondamental de  $\mathcal{H}_{\text{clean}}$ . On peut alors remplacer l'opérateur de spin en transformée de Fourier  $\mathbf{S}_{\mathbf{k}}$ , par sa valeur moyenne dans la théorie de la réponse linéaire

$$\mathbf{S}_{\mathbf{k}} \simeq \langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle \simeq \chi_{\mathbf{k}} \mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{\text{eff}}, \quad (4.35)$$

où  $\chi_{\mathbf{k}}$  est la susceptibilité statique du système pur et  $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{\text{eff}}$  la transformée de Fourier de  $\mathbf{H}_{\mathbf{r}}^{\text{eff}}$ , soit

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{\text{eff}} = J_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{I}} \mathbf{S}_{\mathbf{I}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{I}}. \quad (4.36)$$

La perturbation  $\mathcal{H}_{\text{imp}}$  se met alors sous la forme suivante :

$$\mathcal{H}_{\text{imp}} = \sum_{\mathbf{I}, \mathbf{J}} J_{\mathbf{I}-\mathbf{J}}^{\text{eff}} \mathbf{S}_{\mathbf{I}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{J}}, \quad (4.37)$$

---

5.  $J_{\mathbf{R}}$  est une fonction paire de  $\mathbf{R}$ .

où

$$J_{\mathbf{R}}^{\text{eff}} = - \sum_{\mathbf{k}} |J_{\mathbf{k}}|^2 \chi_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} , \quad (4.38)$$

est une interaction effective entre impuretés. Si le système sans impuretés possède un gap de spin et une longueur caractéristique associée  $\xi_{\text{spin}}$ , la susceptibilité  $\chi_{\mathbf{R}}$ , et donc l'interaction effective  $J_{\mathbf{R}}^{\text{eff}}$ , décroissent exponentiellement avec  $\|\mathbf{R}\|$ . Pour une concentration en impuretés  $z$  suffisamment faible (c'est-à-dire  $z \ll 1/\xi_{\text{spin}}$  à une dimension), les interactions effectives entre impuretés restent petites devant le gap. Pour des températures inférieures au gap, le hamiltonien  $\mathcal{H}_{\text{clean}}$  est à peu près gelé dans son fondamental et le système est alors décrit par le hamiltonien effectif  $\mathcal{H}_{\text{imp}}$  de l'équation (4.37). De plus, si le hamiltonien effectif  $\mathcal{H}_{\text{imp}}$  est non-frustrant, on peut intuitivement voir que les résultats de la partie 4.1 restent valables même si le réseau microscopique n'est pas bipartite ( $J_2 \neq 0$ ).

## 4.2.2 Calcul de la susceptibilité dans l'approximation de champ moyen

On reprend le hamiltonien (3.1) de l'échelle frustrée. La susceptibilité statique du système sans impuretés peut être calculée en utilisant les résultats de la partie 3.3.2. Comme on l'a vu dans la partie 3.2.3, le gap de spin se trouve dans le secteur  $k_y = \pi$  et la branche d'excitation dans ce secteur est bien séparée du reste du spectre autour du gap (figure 3.6). La contribution principale de la susceptibilité se situe donc à  $k_y = \pi$ , signature de la tendance des spins à s'anti-aligner dans la direction transverse  $y$ . Pour simplifier, on néglige la contribution à  $k_y = 0$  qui décroît plus rapidement avec la distance selon  $x$ . Cette approximation est d'autant plus valable que le couplage transverse  $J_{\perp}$  est grand.

Pour calculer la susceptibilité à  $\mathbf{k} = (k, \pi)$ , on regarde l'effet d'un champ magnétique à cette fréquence :

$$\mathbf{H}_{\mathbf{r}} = H \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{e}_z . \quad (4.39)$$

Dans l'approximation de champ moyen présentée partie 3.3.2, le hamiltonien se réécrit :

$$\mathcal{H} = E_0 + \sum_{k', \sigma} \omega_{k'} b_{k', \sigma}^{\dagger} b_{k', \sigma} - \frac{L}{2} H \bar{s} (u_k - v_k) \left( b_{k_0} + b_{-k_0} + b_{k_0}^{\dagger} + b_{-k_0}^{\dagger} \right) . \quad (4.40)$$

On peut calculer la correction à l'énergie au deuxième ordre de la théorie des perturbations en  $H$  :

$$E \simeq E_0 - L \bar{s}^2 \frac{(u_k - v_k)^2}{2\omega_k} H^2 , \quad (4.41)$$

En identifiant cette expression à l'énergie dans la théorie de la réponse linéaire

$$E \simeq E_0 - L(\chi_{\mathbf{k}} + \chi_{-\mathbf{k}}) H^2 , \quad (4.42)$$

on en déduit l'expression de la susceptibilité statique :

$$\chi_{k, \pi} = \frac{\bar{s}^2}{(J_{\perp} - 4\mu)P(\cos k)} , \quad (4.43)$$

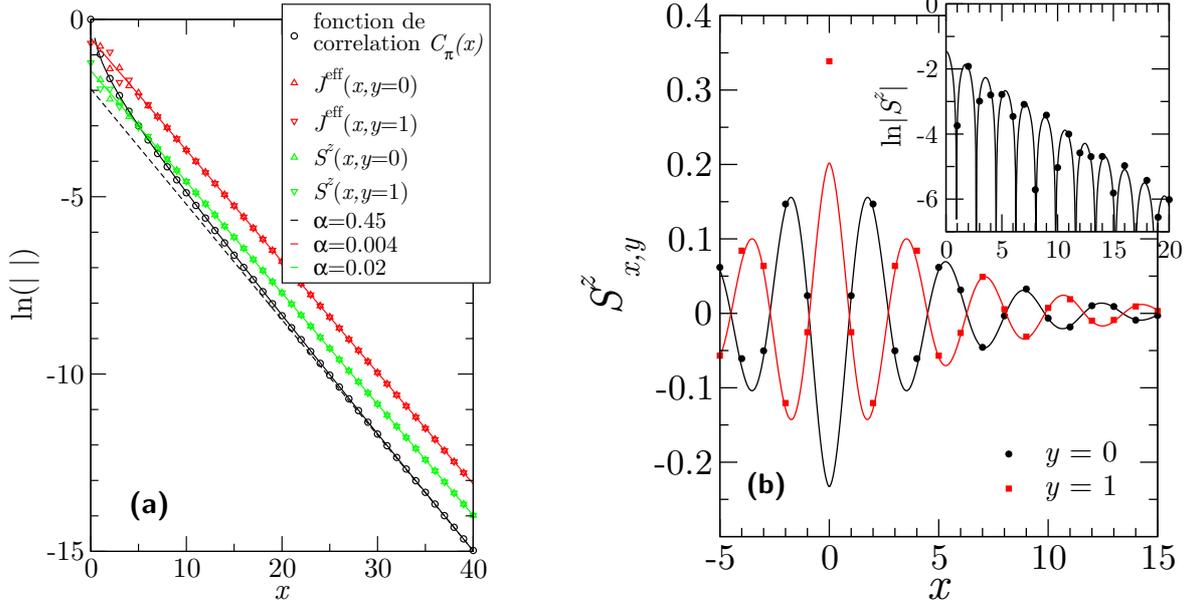


FIGURE 4.3 – Profil d’aimantation dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 1/2$  induit par une impureté non-magnétique au site  $(0, 0)$ , dans une échelle isotrope ( $J_{\perp} = J_1$ ), calculé en DMRG. (a)  $J_2 = 0$  : régime commensurable. Les décroissances du profil d’aimantation et de l’interaction effective entre impuretés sont comparées avec la décroissance de la fonction de corrélation de spin. La longueur caractéristique  $\xi_{\text{spin}}$  est la même pour les trois grandeurs. L’aimantation et l’interaction effective ont une décroissance purement exponentielle tandis que la fonction de corrélation possède une correction en  $1/x^{\alpha}$ . (b)  $J_2 = J_1$  : régime incommensurable. Les résultats du DMRG sont fittés par l’expression (4.52).

où  $P$  est le polynôme défini par l’équation (3.38). La susceptibilité fait donc apparaître les mêmes singularités que le facteur de structure, selon les valeurs de  $J_2$  (voir partie 3.3.3). Dans la limite de fort  $J_{\perp}$ , on a :

$$\chi_{k,\pi} \simeq \frac{1}{4J_{\perp} + 8J_1 \cos k + 8J_2 \cos 2k} . \quad (4.44)$$

### 4.2.3 Aimantation induite par une impureté

Avant d’étudier l’interaction effective entre impuretés, on considère le cas d’une seule impureté, à la position  $\mathbf{I}_0$ . Le champ magnétique effectif correspondant (défini par l’équation (4.34)) est simplement  $\mathbf{H}_{\mathbf{r}}^{\text{eff}} = J_{\mathbf{r}-\mathbf{I}_0} \mathbf{S}_{\mathbf{I}_0}$ . La valeur moyenne de l’opérateur de spin  $\mathbf{S}_{\mathbf{r}}$  est alors donnée par la théorie de la réponse linéaire, soit en transformée de Fourier

$$\langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle \simeq \chi_{\mathbf{k}} \mathbf{H}_{\mathbf{k}}^{\text{eff}} . \quad (4.45)$$

Cette expression perturbative n’est valable que là où l’impureté ne perturbe pas trop le fondamental de  $\mathcal{H}_{\text{clean}}$ , c’est-à-dire loin de l’impureté. Le profil d’aimantation dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 1/2$  s’écrit donc

$$\langle S_{\mathbf{I}_0+\mathbf{R}}^z \rangle \simeq \frac{1}{2\sqrt{2L}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \chi_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}} . \quad (4.46)$$

où la forme générale du couplage correspondant au hamiltonien (3.1) de l'échelle frustrée est

$$J_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2L}} (2J_1 \cos k_x + 2J_2 \cos 2k_x + J_{\perp} \cos k_y) . \quad (4.47)$$

À l'aide de l'expression de la susceptibilité dans l'approximation de champ moyen (4.43), on en déduit l'expression du profil d'aimantation à la limite thermodynamique :

$$\langle S_{x,y}^z \rangle \simeq \frac{1}{8} (-1)^y \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{e^{ikx}}{P(\cos k)} dk , \quad (4.48)$$

où  $(x, y)$  sont les coordonnées par rapport à la position de l'impureté. On peut calculer cette intégrale à l'aide du théorème des résidus, en intégrant sur un rectangle de hauteur infinie entre 0 et  $2\pi$ . On a déjà étudié les racines du dénominateur dans la partie 3.3.3.

– Dans le régime commensurable ( $\frac{J_2}{J_1} < \frac{J_{\perp}}{4J_1}$ ), on obtient

$$\langle S_{x,y}^z \rangle \simeq \frac{1}{8} (-1)^{x+y} \left( \frac{e^{-x/\xi_{\text{spin}}^+}}{\text{sh}(1/\xi_{\text{spin}}^+) P'[-\text{ch}(1/\xi_{\text{spin}}^+)]} + \frac{e^{-x/\xi_{\text{spin}}^-}}{\text{sh}(1/\xi_{\text{spin}}^-) P'[-\text{ch}(1/\xi_{\text{spin}}^-)]} \right) , \quad (4.49)$$

où  $\xi_{\text{spin}}^{\pm}$  sont définis par l'équation (3.42).

– Dans le régime incommensurable ( $\frac{J_2}{J_1} > \frac{J_{\perp}}{4J_1}$ ), on obtient

$$\langle S_{x,y}^z \rangle \simeq \frac{1}{4} (-1)^y e^{-x/\xi_{\text{spin}}} \text{Im} \left[ \frac{e^{iqx}}{\sin(q + i\xi_{\text{spin}}^{-1}) P'[\cos(q + i\xi_{\text{spin}}^{-1})]} \right] , \quad (4.50)$$

où  $q$  et  $\xi_{\text{spin}}$  sont définis par les équations (3.46) et (3.47).

– Exactement au changement de régime,  $P$  se factorise exactement : il n'y a plus qu'un pôle d'ordre 2 et le résidu est nul, soit  $\langle S_{x,y}^z \rangle = 0$ .

Lorsque l'on tend vers le changement de régime, du côté commensurable ou incommensurable, chaque résidu pris séparément diverge, mais la somme des deux tend vers zéro. Par contre l'amplitude de  $\langle S_{x,y}^z \rangle$ , elle, tend vers  $+\infty$ .

Sur la figure 4.3, on a calculé le profil d'aimantation dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 1/2$  induit au voisinage d'une impureté en DMRG. Les expressions (4.49) et (4.50) donnent un bon ordre de grandeur, mais en pratique il est préférable de fitter le profil d'aimantation par une fonction de la forme

$$\langle S_{x,y}^z \rangle = C (-1)^{x+y+1} e^{-x/\xi_{\text{spin}}} , \quad (4.51)$$

dans le régime commensurable et

$$\langle S_{x,y}^z \rangle = C (-1)^{y+1} e^{-x/\xi_{\text{spin}}} \cos(qx + \phi) , \quad (4.52)$$

dans régime incommensurable. Ces expressions restent valable à petite distance, jusqu'à  $x = 1$ . On peut vérifier que le paramètre  $C$  possède un pic au voisinage du changement de régime. Contrairement aux fonctions de corrélation, on n'attend pas de correction en loi de puissance dans les profils d'aimantation. Sur la figure 4.3(a), le fit par une enveloppe

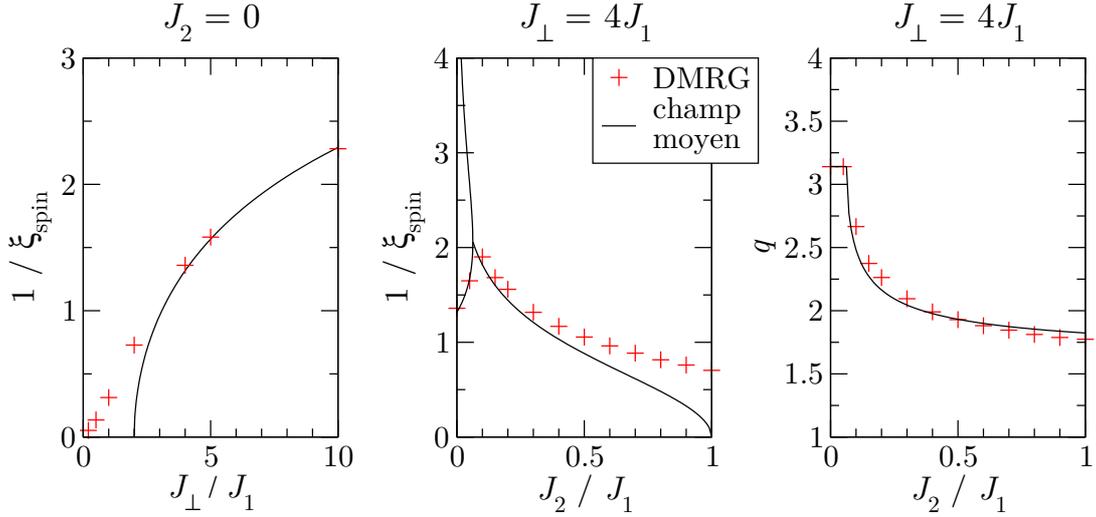


FIGURE 4.4 – Longueur de corrélation  $\xi_{\text{spin}}$  et vecteur d’onde extraits du profil d’aimantation induit par une impureté et de l’interaction effective entre impureté. Les résultats du DMRG sont comparés avec les prédictions du champ moyen dans le régime de fort  $J_{\perp}$ .

de la forme  $e^{-x/\xi_{\text{spin}}}/x^{\alpha}$  donne un exposant  $\alpha$  pratiquement nul pour le profil d’aimantation induit par une impureté et un exposant  $\alpha \simeq 1/2$  dans le cas des corrélations, conformément aux résultats de la partie 3.3.3. La comparaison des paramètres de fit  $\xi_{\text{spin}}$  et  $q$  avec les résultats du champ moyen donnent de bons résultats, comme le montre la figure 4.4.

Physiquement, tout se passe comme si l’impureté libérait un spinon soumis à un potentiel attractif, qui le localise au voisinage de l’impureté sur une longueur caractéristique  $\xi_{\text{spin}}$ .

## 4.2.4 Interaction effective entre impuretés

### Comportement à grande distance

Dans l’approximation de champ moyen et dans le régime de fort  $J_{\perp}$ , l’interaction effective entre impuretés (4.38) s’écrit à la limite thermodynamique

$$J_{x,y}^{\text{eff}} \simeq \frac{J_{\perp}}{8} (-1)^{y+1} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{Q^2(\cos k)}{P(\cos k)} e^{ikx} dk, \quad (4.53)$$

où

$$Q(X) = 1 + 2\frac{J_2}{J_{\perp}} - 2\frac{J_1}{J_{\perp}}X - 4\frac{J_2}{J_{\perp}}X^2. \quad (4.54)$$

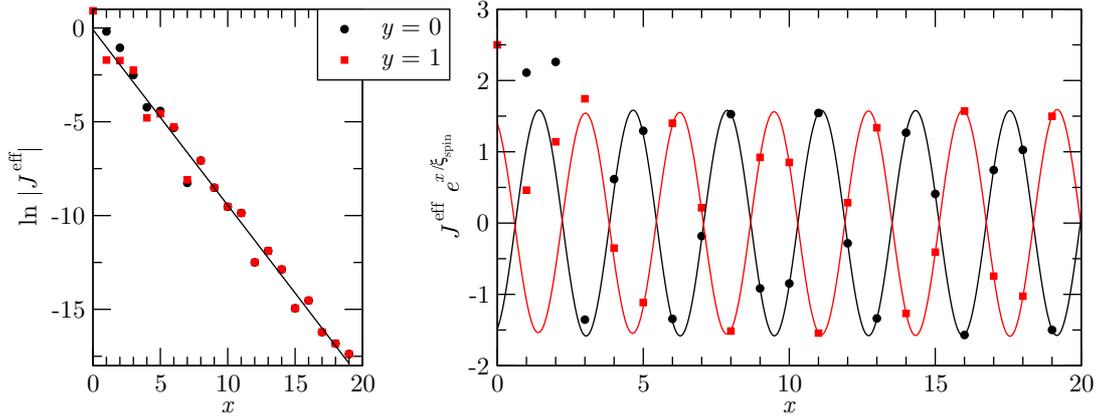


FIGURE 4.5 – Comportement de l’interaction effective entre deux impuretés en fonction de leur distancerelative  $x$ , pour  $J_{\perp} = 3J_1$  et  $J_2 = J_1/2$ . Les résultats du DMRG (symboles) sont fittés par l’expression (4.58).

Comme pour le profil d’aimantation, l’intégrale peut être calculée par le théorème des résidus. On obtient alors

$$J_{x,y}^{\text{eff}} \simeq \frac{1}{8} (-1)^{x+y+1} \left( \frac{Q^2 [-\text{ch}(1/\xi_{\text{spin}}^+)]}{\text{sh}(1/\xi_{\text{spin}}^+) P'[-\text{ch}(1/\xi_{\text{spin}}^+)]} e^{-x/\xi_{\text{spin}}^+} + \frac{Q^2 [-\text{ch}(1/\xi_{\text{spin}}^-)]}{\text{sh}(1/\xi_{\text{spin}}^-) P'[-\text{ch}(1/\xi_{\text{spin}}^-)]} e^{-x/\xi_{\text{spin}}^-} \right), \quad (4.55)$$

dans le régime commensurable et

$$J_{x,y}^{\text{eff}} \simeq \frac{1}{4} (-1)^{y+1} e^{-x/\xi_{\text{spin}}} \text{Im} \left[ \frac{Q^2 [\cos(q + i\xi_{\text{spin}}^{-1})]}{\sin(q + i\xi_{\text{spin}}^{-1}) P'[\cos(q + i\xi_{\text{spin}}^{-1})]} e^{iqx} \right], \quad (4.56)$$

dans le régime incommensurable. Comme pour le profil d’aimantation, l’amplitude de  $J_{x,y}^{\text{eff}}$  diverge au voisinage du changement de régime, même si elle est nulle exactement à celui-ci. De plus, on n’attend pas non plus de correction en loi de puissance (cette décroissance purement exponentielle avait déjà été mise en évidence numériquement en l’absence de frustration [61]).

L’interaction effective peut être calculée numériquement en comparant les énergies dans les secteurs singulet et triplet :

$$J^{\text{eff}} = E_{S_{\text{tot}}=1} - E_{S_{\text{tot}}=0}. \quad (4.57)$$

Comme le secteur triplet apparaît aussi dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 0$ , l’amplitude  $|J^{\text{eff}}|$  est donnée par la différence des deux premières énergies dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 0$ . Le signe de  $J^{\text{eff}}$  est obtenu en comparant avec l’énergie dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 1$ . Sur la figure 4.5, les résultats sont fittés par une fonction de la forme

$$J_{x,y}^{\text{eff}} = J_0 (-1)^{y+1} e^{-x/\xi_{\text{spin}}} \cos(qx + \phi), \quad (4.58)$$

où  $q = \pi$  et  $\phi = 0$  dans le régime commensurable. Comme attendu, le vecteur d’onde  $q$  et la longueur caractéristique  $\xi_{\text{spin}}$  correspondent exactement à ceux du profil d’aimantation

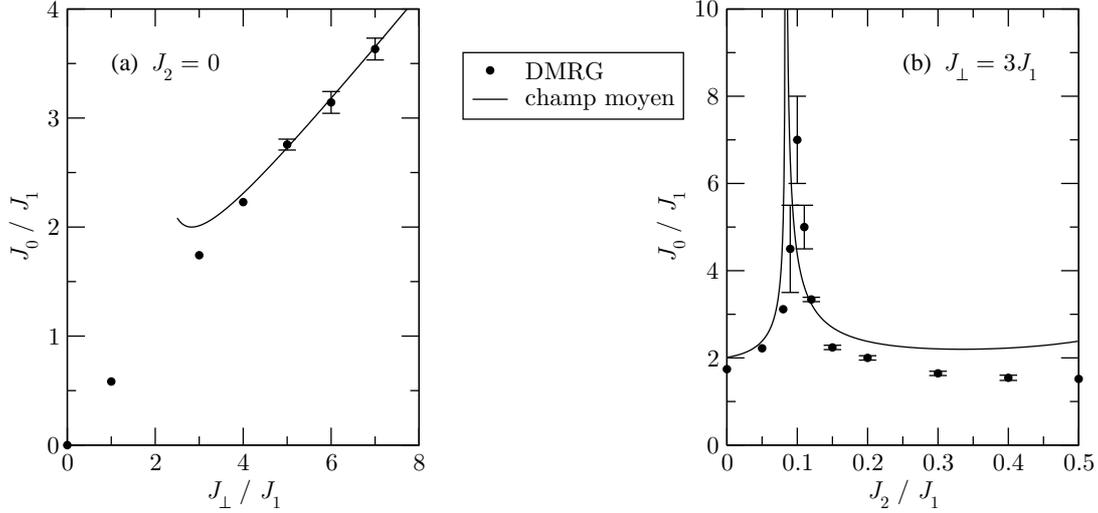


FIGURE 4.6 – Amplitude  $J_0$  de l’interaction effective. (a) Évolution à  $J_2 = 0$  en fonction de  $J_\perp/J_1$ . (b) Évolution à  $J_\perp = 3J_1$  en fonction de  $J_2/J_1$ , montrant la divergence à l’apparition de l’incommensurabilité.

ou de la fonction de corrélation. Le comportement de  $J_0$  n’est pas quantitativement prédit par l’approximation de champ moyen, notamment car le comportement de  $\xi_{\text{spin}}$  n’est pas très bien reproduit. Mais, comme on peut le voir sur la figure 4.6, l’amplitude  $J_0$  montre une divergence au voisinage de l’apparition de l’incommensurabilité, comme prédit par les expressions (4.55) et (4.56).

### Comportement à faible distance

Le comportement à courte distance de l’interaction effective calculée en DMRG (représentée figure 4.5) ne suit plus la loi (4.58). En effet, l’approximation de la réponse linéaire n’est a priori plus valable dans ce régime. On peut néanmoins avoir une idée du signe de  $J^{\text{eff}}$  en étudiant chaque configuration.

En l’absence de couplages aux seconds voisins ( $J_2 = 0$ ), l’interaction effective oscille à  $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$ , même a courte distance, sauf en  $\mathbf{r} = (1, 1)$  où l’interaction est quasi-nulle (d’après le DMRG). En effet, cette situation représentée figure 4.7(a) brise l’échelle. Les spinons libérés par chaque impureté sont sur des segments différents et se comportent essentiellement comme deux spins libres. Par conséquent, le premier état singulet est dégénéré avec les premiers triplets et l’interaction effective est nulle. Remarquons que si les impuretés sont face à face,  $\mathbf{r} = (0, 1)$ , l’échelle est également brisée mais il n’y a pas de spinon libéré et l’interaction effective est alors donnée par le gap de spin.

En présence de frustration, on peut constater sur la figure 4.5 que les configurations  $\mathbf{r} = (1, 1)$  et  $\mathbf{r} = (0, 1)$  n’ont pas le signe prévu par l’oscillation incommensurable à grande distance (4.58). Les figures 4.7(b) et (c) montrent que les spinons libérés par les impuretés ont alors tendance à s’anti-aligner. Dans ces deux cas, on comprend donc que l’interaction effective soit positive, conformément au DMRG (figure 4.5).

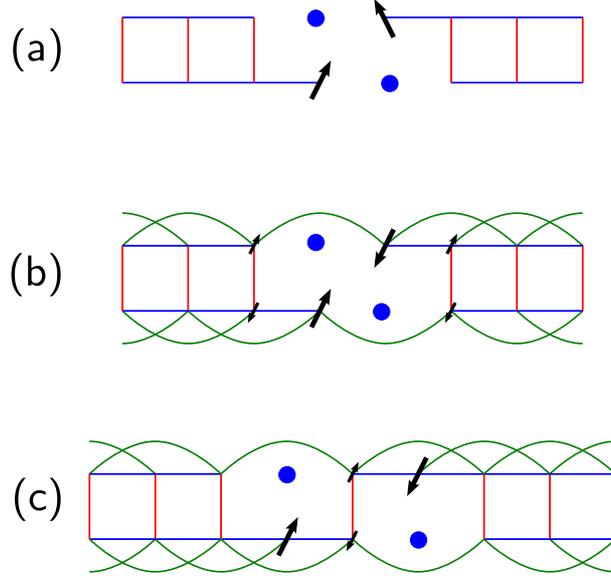


FIGURE 4.7 – Configurations d’impuretés où l’interaction effective n’a pas le signe prévu par la loi (4.58) : (a)  $\mathbf{r} = (1, 1)$  avec  $J_2 = 0$ , (b)  $\mathbf{r} = (1, 1)$  avec  $J_2 \neq 0$  et (c)  $\mathbf{r} = (2, 1)$  avec  $J_2 \neq 0$ .

### 4.3 Modèle de dimères aléatoires

La physique de basse énergie du système est contrôlée par le hamiltonien effectif (4.37). Ce hamiltonien est particulièrement difficile à traiter car tous les spins effectifs sont connectés. C’est pourquoi on considère un modèle rudimentaire dans lequel les impuretés forment des dimères indépendants dont les couplages sont distribués selon la distribution  $p(J)$  des couplages effectifs aux premiers voisins. La physique de très basse énergie ne peut pas être captée par ce modèle, mais celui-ci permet de comprendre la réponse du système pour des échelles d’énergie intermédiaires  $H, T \lesssim J_0$ .

#### 4.3.1 Courbe d’aimantation

L’aimantation d’un seul dimère avec un couplage  $J$  est donnée par

$$m_{\text{dimer}}(H, T; J) = \frac{2 \operatorname{sh}(H/T)}{1 + e^{J/T} + 2 \operatorname{ch}(H/T)}. \quad (4.59)$$

Le nombre total de dimères est  $N_i/2$  si bien que la densité d’aimantation totale s’écrit

$$m(H, T) = 2z \int p(J) dJ \frac{\operatorname{sh}(H/T)}{1 + e^{J/T} + 2 \operatorname{ch}(H/T)}. \quad (4.60)$$

Dans la limite  $T \gg J_0$ , on retrouve la fonction de Brillouin (4.10) et la courbe sature à  $z$  quand  $H \rightarrow +\infty$ . Les limites  $H \rightarrow 0$  et  $T \rightarrow 0$  ne sont pas interchangeables. À température nulle, la courbe d’aimantation est simplement reliée à la fonction de répartition  $R$  des couplages :

$$m(H, T = 0) = zR(H) = z \int_{-\infty}^H p(J) dJ. \quad (4.61)$$

La limite de champ nul à température finie donne une constante de Curie dépendante de la température

$$c(T) = 2z \int p(J) dJ \frac{1}{3 + e^{\beta J}}, \quad (4.62)$$

qui rejoint la limite  $z/2$  des impuretés libres à haute température.

### 4.3.2 Distribution des couplages

On discute maintenant la distribution des couplages entre impuretés premières voisines  $p(J)$ , résultant de la forme générale de l'interaction effective en fonction de la distance  $\mathbf{r} = (x, y)$ ,

$$J(\mathbf{r}) = J_0 (-1)^{y+1} \cos(qx + \phi) e^{-x/\xi}. \quad (4.63)$$

On considère  $N_i$  impuretés distribuées de manière uniforme sur une échelle de  $N = 2L$  sites. La concentration  $z = N_i/N$  est simplement la probabilité pour un site d'être occupé par une impureté. Parcourant l'échelle en zigzag en partant d'une impureté, la probabilité de trouver l'impureté suivante à une distance  $\mathbf{r} = (n_x, n_y)$ , où  $n_x, n_y \in \mathbb{N}$ , est une loi géométrique de paramètre  $z$

$$P_{n_x, n_y} = z(1-z)^{2n_x+n_y-1}, \quad \text{avec } n_x + n_y > 0. \quad (4.64)$$

On a alors les résultats suivants pour les distances longitudinales et transverses moyennes :

$$\bar{x} = \frac{1}{z} \left( \frac{1-z}{2-z} \right), \quad (4.65)$$

$$\bar{y} = \frac{1}{2-z}, \quad (4.66)$$

qui résultent de la possibilité de mettre deux impuretés sur le même barreau. Dans la limite diluée  $z \ll 1$ , on retrouve le résultat intuitif  $\bar{y} \simeq 1/2$  et  $\bar{x} \simeq 1/(2z) = 1/z'$ , comme si les impuretés étaient disposées sur une chaîne avec une concentration  $z' = 2z$ . Formellement, la distribution des couplages est définie par

$$p(J) = \iint dx dy p(\mathbf{r}) \delta(J - J(\mathbf{r})), \quad (4.67)$$

où

$$p(\mathbf{r}) = \sum_{(n_x, n_y)} P_{n_x, n_y} \delta(x - n_x) \delta(y - n_y). \quad (4.68)$$

Enfin, on choisit<sup>6</sup> comme échelle d'énergie caractéristique, à comparer avec le champ magnétique  $H$  appliqué au système, la moyenne des couplages antiferromagnétiques  $J_+$ , définie par

$$J_+ = \frac{\int_0^\infty J p(J) dJ}{\int_0^\infty p(J) dJ}. \quad (4.69)$$

---

6. Ce choix est motivé par le modèle des dimères aléatoires, car les liens ferromagnétiques sont alors immédiatement polarisés pour un champ magnétique infinitésimal.

## Régime commensurable

Dans le régime commensurable, on a  $q = \pi$  et  $\phi = 0$ . Dans ce cas, la distribution des couplages a été étudiée dans la référence [80]. On précise ici certains résultats. Le changement de variable  $\mathbf{r} \rightarrow J$  se fait en utilisant la relation

$$\delta(J - J(\mathbf{r})) = \frac{\xi}{|J|} \delta(x - n(J)) \delta\left(y - \frac{(-1)^x \operatorname{sgn}(J) + 1}{2}\right), \quad (4.70)$$

où  $n(J) = \xi \ln(J_0/|J|)$  et  $\operatorname{sgn}$  est la fonction signe.

**Limite continue** Dans un premier temps, on se place dans la limite  $z \ll 1$  et  $\xi \gg 1$  à  $z\xi$  fixé. La distribution  $p(x)$  peut alors être approximée par une loi exponentielle de paramètre  $z'$ ,<sup>7</sup>

$$p(x) = z' e^{-z'x}, \quad (4.73)$$

d'où, pour  $J \in [-J_0, J_0]$

$$p(J) = \frac{z\xi}{J_0} \left(\frac{J_0}{|J|}\right)^{1-2z\xi}. \quad (4.74)$$

On en déduit

$$R(J) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \operatorname{sgn}(J) \left(\frac{|J|}{J_0}\right)^{2z\xi} \right], \quad (4.75)$$

et

$$J_+ = \frac{2z\xi}{1 + 2z\xi} J_0. \quad (4.76)$$

Une expression similaire à trois dimensions a été utilisée pour interpréter la température à laquelle s'ordonnent les impuretés dans les expériences sur le composé  $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$  dopé [10].

**Cas discret** La limite continue n'est pas très justifiée dans les systèmes avec une petite longueur de corrélation de spin, comme les échelles<sup>8</sup>. Dans le cas discret, la distribution des couplages est un peigne de Dirac

$$p(J) = \sum_{n \in \mathbb{N}} P(J) \delta(n - n(J)), \quad (4.77)$$

---

7. On a en fait approximé le nombre d'impuretés  $N_i(x)$  sur une distance  $x$  par un processus de Poisson. La probabilité de trouver  $n$  impuretés sur une distance  $x$  est alors une loi de Poisson :

$$\mathbb{P}[N_i(x) = n] = \frac{(z'x)^n}{n!} e^{-z'x}, \quad (4.71)$$

et la distribution des distances  $x$  aux  $(n+1)$ èmes voisins  $p_n(x)$  s'écrit

$$p_n(x) = z' \frac{(z'x)^n}{n!} e^{-z'x}. \quad (4.72)$$

8. Rappelons que pour une échelle isotrope, on a trouvé  $\xi_{\text{spin}} \simeq 3$  (voir figures 3.11 et 3.12).

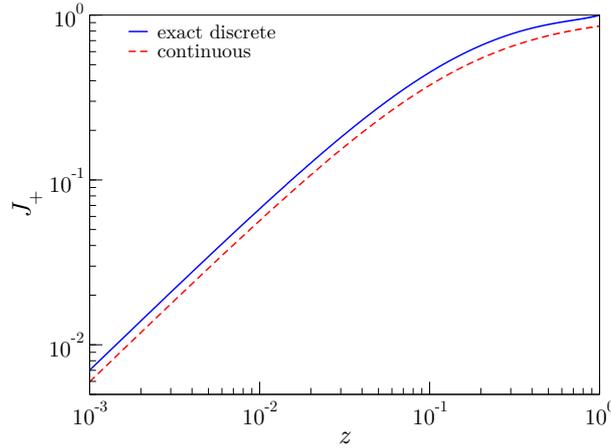


FIGURE 4.8 – Echelle d'énergie de la distribution de couplages effectifs en fonction de la concentration  $z$ , pour une longueur de corrélation typique  $\xi = 3$ .

où

$$P(J) = \frac{z\xi}{(1-z)J_0} \left( \frac{J_0}{|J|} \right)^{1+2\xi \ln(1-z)} \quad (4.78)$$

pour  $J \in [-J_0, J_0]$ . On en déduit le comportement de la fonction de répartition des couplages antiferromagnétiques

$$R_+(J) = \frac{R(J) - R(0)}{1 - R(0)} \sim \left( \frac{J_0}{J} \right)^{2\xi \ln(1-z)}. \quad (4.79)$$

En particulier, l'exposant n'est plus une fonction de  $z\xi$ , mais une fonction de  $z$  et  $\xi$ . On peut aussi calculer exactement l'échelle d'énergie caractéristique

$$J_+ = \frac{[1 - (1-z)^4] [1 + (1-z)e^{-1/\xi}]}{(2-z) [1 - (1-z)^4 e^{-2/\xi}]} J_0. \quad (4.80)$$

On retrouve l'expression (4.76) dans la limite  $\xi \gg 1$  et  $z \ll 1$  à  $z\xi$  fixé. L'effet du réseau est illustré sur la figure 4.8.

### Régime incommensurable

Lorsque  $q$  s'écarte de  $\pi$ , on peut avoir des petits couplages pour des distances pourtant petites. Autrement dit, la présence du cosinus diminue le poids des couplages forts et augmente le poids des couplages faibles. Sur la figure 4.9, on a représenté la fonction de répartition pour différents  $q$ . La fonction de répartition à  $q \neq \pi$  est toujours au-dessus de celle à  $q = \pi$  : il y a toujours plus de petits couplages dans le cas  $q \neq \pi$ . Cet effet se traduit par un changement significatif de l'échelle d'énergie  $J_+$ . Lorsque  $q$  est différent de  $\pi$  mais commensurable avec le réseau, des plateaux apparaissent dans la fonction de répartition, traduisant l'accumulation de couplages à certaines valeurs.<sup>9</sup> Lorsque  $q$  est incommensurable, la distribution des couplages est peu affectée et reste bien captée par la loi de puissance (4.79). Le principal effet de  $q$  est alors de légèrement baisser l'énergie caractéristique  $J_+$ .

9. Sur la figure 4.9, comme  $\phi = 0$ , les couplages s'accumulent à  $J = 0$  et les plateaux pour  $q = \pi/2$  et  $3\pi/4$  sont respectivement à  $1/2$  et  $1/4$ .

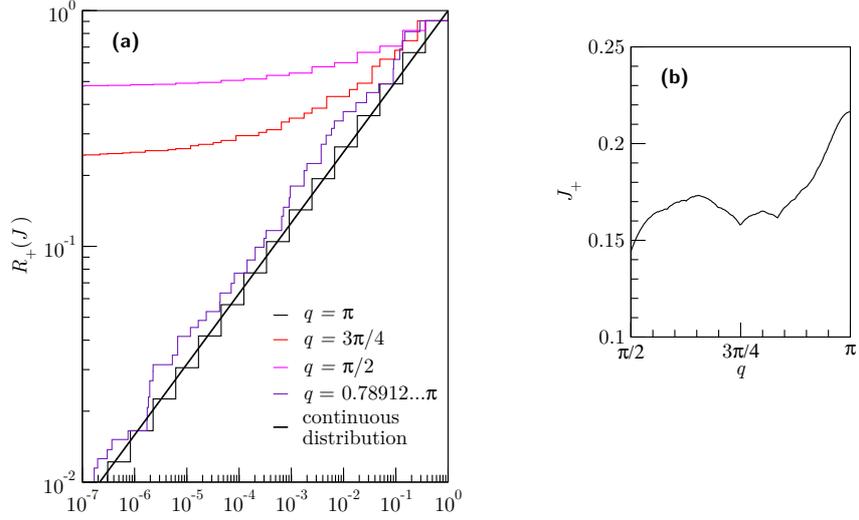


FIGURE 4.9 – (a) Fonction de repartition  $R_+(J)$  des couplages antiferromagnétiques pour  $z = 0.05$ ,  $\xi = 3$  et  $\phi = 0$ . (b) Couplage moyen  $J_+$  en fonction du vecteur d'onde  $q$ .

## 4.4 Constante de Curie

Dans la limite de champ faible à température finie, le comportement de l'aimantation généralement attendu est une loi de Curie de la forme

$$m(H, T) = \frac{c(T)}{T} H. \quad (4.81)$$

Dans cette partie, on étudie le comportement de la constante de Curie  $c$  avec la température.

### 4.4.1 Modèle de dimères aléatoires

La formule (4.62) du modèle de dimères aléatoires montre déjà une dépendance non triviale de  $c$  avec la température. Dans la limite continue (4.74) de la distribution de couplage, le développement à haute température de la constante de Curie conduit à

$$c(T) = \frac{z}{2} \left[ 1 - \frac{1}{16} \frac{\alpha}{\alpha + 2} \left( \frac{J_0}{T} \right)^2 + \frac{5}{768} \frac{\alpha}{\alpha + 4} \left( \frac{J_0}{T} \right)^4 - \frac{77}{184320} \frac{\alpha}{\alpha + 6} \left( \frac{J_0}{T} \right)^6 + \dots \right], \quad (4.82)$$

où  $\alpha = 2z\xi$  est l'exposant de la distribution. Un développement de type Sommerfeld dans la limite de basse température fait apparaître une loi de puissance :

$$\frac{c(T)}{2z} = \frac{1}{6} + K_\alpha \left( \frac{T}{J_0} \right)^\alpha, \quad (4.83)$$

avec une constante

$$K_\alpha = \frac{4}{9} \int_0^1 du (-\ln u)^\alpha \frac{1 - u^2}{\left(1 + \frac{10}{3}u + u^2\right)^2}, \quad (4.84)$$

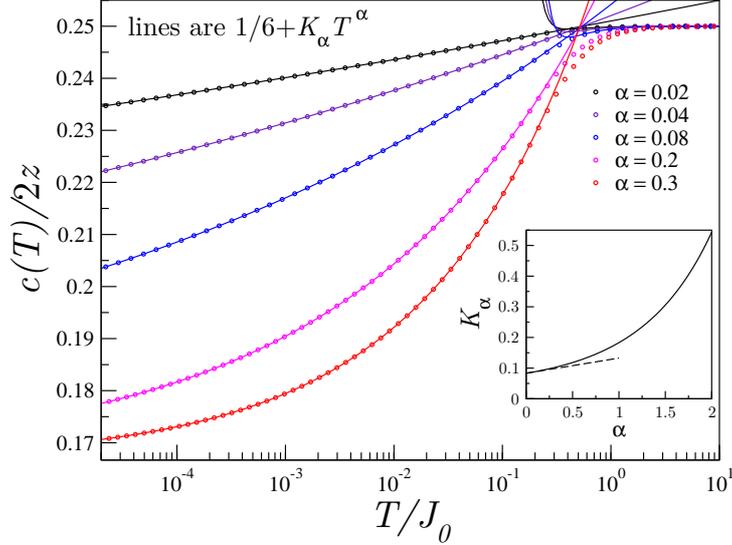


FIGURE 4.10 – Constante de Curie du modèle de dimères aléatoires ( $\alpha = 2z\xi$ ). *Encart* : comportement de la constante  $K_\alpha$ .

de l'ordre de 0.1 ( $K_0 = 1/12 \simeq 0.0833$ ,  $K_1 = \frac{\ln 3}{6} \simeq 0.1831\dots$ ). Dans la limite diluée  $\alpha \ll 1$ , on a  $K_\alpha = 1/12 + K'\alpha$ , où  $K' \simeq 0.05$ . La courbe  $c(T)$  est représentée sur la figure 4.10 pour différentes valeurs de  $\alpha$  et montre que l'expression (4.83) reste valide sur une large gamme de températures. Le comportement en loi de puissance (4.83) n'est bien sûr pas universel et n'apparaît que parce que la distribution des couplages est elle-même une loi de puissance.

#### 4.4.2 Diagonalisation exacte

Le hamiltonien effectif de basse énergie (4.37) peut être diagonalisé numériquement dans tous les secteurs de spin  $S_{\text{tot}}^z$ . L'absence de symétries limite cette procédure à une dizaine d'impuretés et nécessite de moyennner sur beaucoup d'échantillons (typiquement 10000). La connaissance de toutes les énergies dans tous les secteurs permet de calculer la constante de Curie à toute température.

Le comportement  $c(T)$  obtenu dans le régime commensurable ( $q = \pi$ ) est représenté sur la figure 4.11(a). La constante de Curie passe de  $z/2$  à haute température à  $c_{z,N_i}(T = 0)$  dont la valeur approchée est donnée par l'expression (4.13), mais qui peut être calculée exactement à l'aide de la formule (4.3). En retranchant cette valeur à la courbe  $c_{z,N_i}(T)$ , on fait apparaître une loi de puissance à basse température représentée 4.11(b) :

$$c_{z,N_i}(T) \simeq c_{z,N_i}(T = 0) + KT^\alpha, \quad (4.85)$$

où les constantes  $K$  et  $\alpha$  dépendent a priori de  $z$ ,  $\xi$  et  $N_i$ . La figure 4.11(c) montre que l'exposant est celui prédit par le modèle de dimères aléatoires  $\alpha \simeq 2z\xi$ .

#### 4.4.3 Comportement universel à basse température

Le modèle effectif est celui d'une chaîne avec des interactions aléatoires à courte portée. Dans le régime commensurable, le signe de l'interaction effective respecte la bipartité

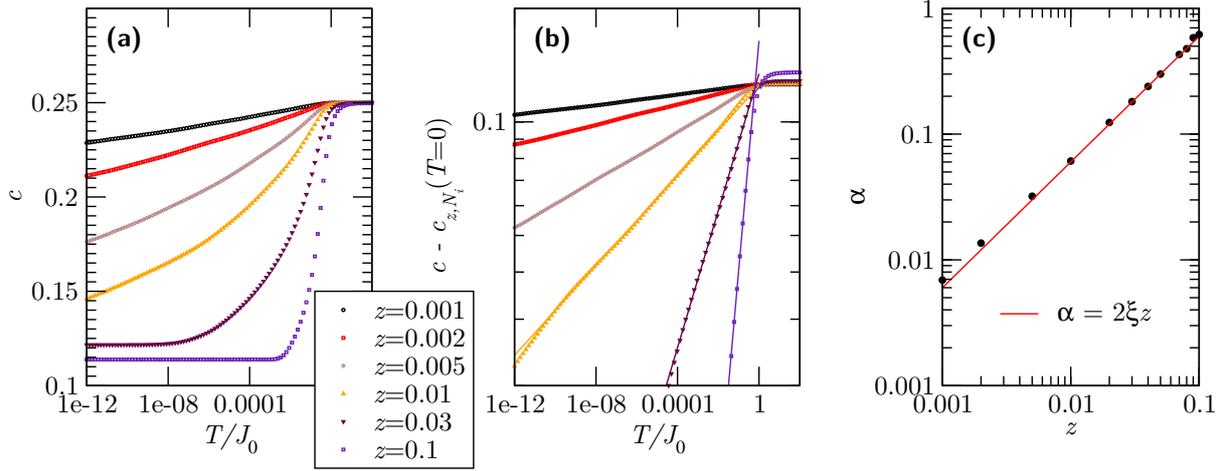


FIGURE 4.11 – (a) Comportement avec la température de la constante de Curie  $c$ , calculée en diagonalisant exactement le hamiltonien effectif pour 10000 échantillons de 10 impuretés. (b) Comportement de  $c$  après avoir retranché la valeur limite à  $T = 0$ , faisant apparaître une loi de puissance d’exposant  $\alpha$  à basse température. (c) Evolution de l’exposant  $\alpha$  avec la concentration  $z$ .

du réseau, tandis que dans le régime incommensurable, les interactions deviennent frustrantes. Cependant, la décroissance exponentielle de l’interaction fait que dans le régime dilué  $z\xi \ll 1$ , les deux cas correspondent essentiellement à une chaîne avec des interactions aux premiers voisins aléatoires, ferromagnétiques ou antiferromagnétiques (F-AF). Le groupe de renormalisation dans l’espace réel (RSRG, décrit dans l’annexe C) appliqué à ce système converge vers un point fixe de désordre fini, qui correspond à une phase de grands spins effectifs faiblement couplés [85, 86].

Tout comme le modèle de dimères aléatoires, le RSRG prévoit un comportement universel de la constante de Curie en loi de puissance. L’exposant n’est pas universel lorsque l’exposant de la distribution initiale des couplages est supérieur à une valeur critique de l’ordre de 0.7 [85, 86], ce qui correspond ici à  $2z\xi < 0.3$ . C’est le cas sur la figure 4.11, pour les cinq premières concentrations. Néanmoins, il n’est pas possible, au travers de cette étude, de déterminer si le comportement observé correspond au comportement universel du RSRG avec un exposant  $\alpha \simeq 2z\xi$ , ou s’il s’agit simplement de l’effet de la distribution initiale déjà visible dans le modèle de dimères aléatoires. Si l’exposant du RSRG est différent de  $2z\xi$ , on s’attend à l’observer à des températures très faibles ( $T < 10^{-12}J_0$  pour  $2z\xi < 0.05$ ), probablement inaccessibles expérimentalement.

Le RSRG prédit l’existence d’un exposant universel de l’ordre de 0.2 dans la constante de Curie, si l’exposant de la distribution initiale est inférieur à 0.7, c’est-à-dire  $2z\xi > 0.3$ . Dans ce cas, nous n’avons pas observé l’exposant universel mais bien l’exposant  $2z\xi$  (concentration  $z = 0.1$  sur la figure 4.11). Comme les effets de taille finie ( $N_i = 10$ ) pour  $2z\xi > 0.3$  se font sentir à des températures assez hautes ( $T > 10^{-4}J_0$ ), cette étude ne permet pas de savoir si les courbes rejoignent l’exposant universel à plus basse température. Cependant, le régime  $2z\xi > 0.3$  ne correspond plus à la limite diluée et l’application des résultats de la chaîne F-AF aux échelles avec impuretés, peut être remis en question. Une autre explication est la nature discrète de la distribution des couplages,

qui fait que cette distribution est en fait beaucoup plus singulière que l'approximation continue [80]. L'exposant universel de la constante de Curie a été observé dans la chaîne F-AF à l'aide du Monte-Carlo quantique qui permet de traiter des systèmes beaucoup plus grands [27, 28].

## 4.5 Courbe d'aimantation à bas champ

En l'absence d'interactions entre impuretés, la courbe d'aimantation à bas champ est donnée par la fonction de Brillouin (4.10). Quel est l'effet des interactions effectives entre impuretés sur cette courbe ?

### 4.5.1 Température nulle

À la limite  $T = 0$ , la fonction de Brillouin devient une marche

$$m(H, T = 0) = \begin{cases} 0 & \text{pour } H = 0, \\ z & \text{pour } H > 0. \end{cases} \quad (4.86)$$

Le modèle de dimères aléatoires prévoit déjà une correction à cette réponse, puisque la courbe d'aimantation est donnée par la fonction de répartition des couplages. Dans le cas de la distribution continue (4.74), on obtient un comportement en loi de puissance

$$m(H, T = 0) = \frac{z}{2} \left[ 1 + \left( \frac{H}{J_0} \right)^{2z\xi} \right], \quad (4.87)$$

pour  $H \leq J_0$ .<sup>10</sup> Le modèle de dimères prévoit une aimantation  $\delta m = z/2$  quand  $H \rightarrow 0^+$ , due aux couplages ferromagnétiques. En réalité, la limite  $\delta m$  de l'aimantation quand  $H \rightarrow 0^+$  est donnée par la densité de spin total dans le fondamental  $\delta m = \overline{S_{\text{tot}}}/L$ . Dans le régime commensurable, cette aimantation n'est pas négligeable sur un système de taille finie<sup>11</sup> et est donnée par la formule (4.7)

$$\delta m \simeq \sqrt{\frac{z(1-z)}{\pi L}}. \quad (4.88)$$

Ce résultat peut être incorporé au modèle de dimères aléatoires en étirant l'expression (4.61) selon l'ansatz :

$$m(H, T = 0) \simeq \delta m + (z - \delta m) \frac{R(H) - R(0)}{1 - R(0)} \simeq \delta m + (z - \delta m) \left( \frac{H}{J_0} \right)^{2z\xi}. \quad (4.89)$$

Dans le régime incommensurable, l'expression (4.88) n'est plus valable. À cause de la frustration, la valeur de  $\overline{S_{\text{tot}}}/L$  est plus faible et on peut prendre  $\delta m \simeq 0$ .

10. Remarquons que pour des concentrations  $z$  supérieures à  $z^* = 1/2\xi$ , la courbure de la courbe d'aimantation passe de concave à convexe. Cette situation peut s'avérer physique pour des systèmes où la longueur de corrélation est grande et pour des concentrations importantes, d'autant plus que le véritable exposant est  $-2\xi \ln(1-z) > 2z\xi$ .

11. L'expression (4.88) néglige l'effet des coupures ; on a vu dans la partie 4.1.3 que  $\delta m$  reste finie à la limite thermodynamique.

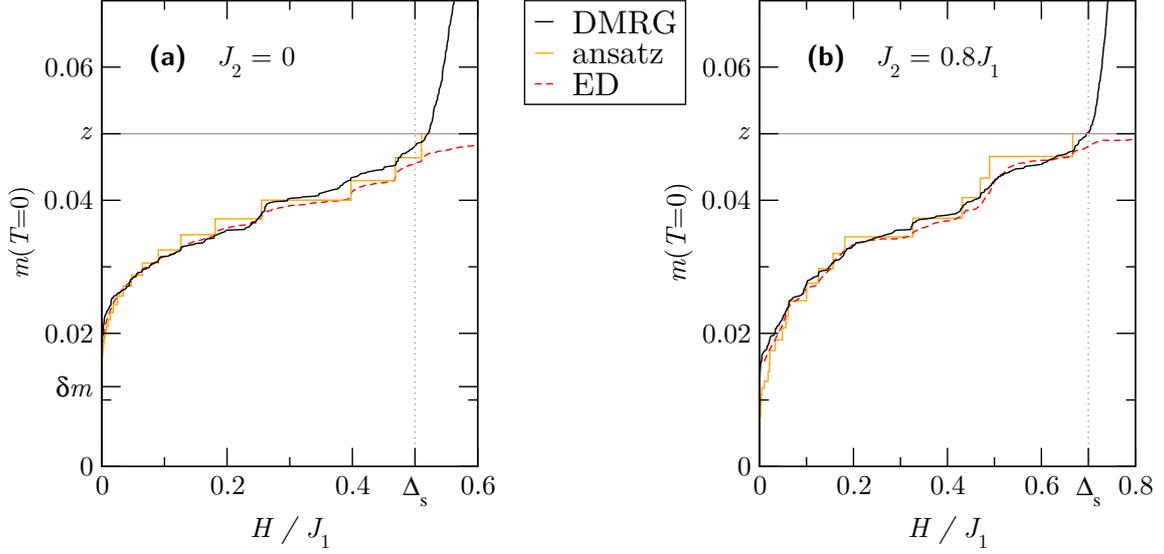


FIGURE 4.12 – Courbe d’aimantation à température nulle pour une échelle isotrope ( $J_1 = J_\perp$ ) de taille  $L = 100$  avec une concentration en impuretés  $z = 0.05$  : (a)  $J_2 = 0$ , (b)  $J_2 = 0.8J_1$ .

La courbe d’aimantation peut également être obtenue en diagonalisant numériquement le hamiltonien de basse énergie (4.37) pour des échantillons d’une dizaine d’impuretés. Enfin, le DMRG sur le hamiltonien microscopique (4.30) permet de calculer *ab initio* la courbe d’aimantation à  $T = 0$ . Sur la figure 4.12, les résultats numériques sont comparés à l’ansatz (4.89) en prenant les couplages effectifs exacts issus du DMRG. La courbe d’aimantation est essentiellement captée par la fonction de répartition. La courte longueur de corrélation  $\xi_{\text{spin}} \simeq 3$  fait que la discrétisation des couplages est très visible, y compris sur la courbe en DMRG. La diagonalisation exacte permet de capter un peu plus précisément la courbe, notamment à basse température. À longueur de corrélation égale (comme c’est le cas sur la figure 4.12), la frustration ne change pratiquement pas l’allure de la courbe : l’abaissement de l’aimantation résiduelle quand  $H \rightarrow 0^+$  est compensé par le changement de la distribution des couplages qui augmente le poids de petits  $J$ . Bien entendu, le modèle effectif  $\mathcal{H}_{\text{imp}}$  ne capte pas la contribution des magnons que l’on observe en DMRG pour des champs supérieurs au gap de spin  $\Delta_S$ .

## 4.5.2 Température finie

La réponse pour des champs inférieurs à la température est essentiellement donnée par la loi de Curie (4.81). Le régime de très bas champ est donc contrôlé par la constante de Curie dont on a étudié la dépendance avec  $T$  dans la partie 4.4. Dans le régime  $H \gtrsim T$ , les interactions effectives entraînent une déviation par rapport à la courbe de Brillouin, qui peut être captée par le modèle de dimères aléatoires. Comme à  $T = 0$ , il convient de remplacer la contribution des dimères ferromagnétiques par  $\delta m = \overline{S_{\text{tot}}}/L$  en étirant l’aimantation du modèle de dimères (4.60) selon l’ansatz (4.89), soit

$$m(H, T) \simeq \delta m \operatorname{th} \left( \frac{H}{2T} \right) + \frac{z - \delta m}{1 - R(0)} \int_{J>0} p(J) dJ \frac{2 \operatorname{sh}(H/T)}{1 + e^{J/T} + 2 \operatorname{ch}(H/T)}. \quad (4.90)$$

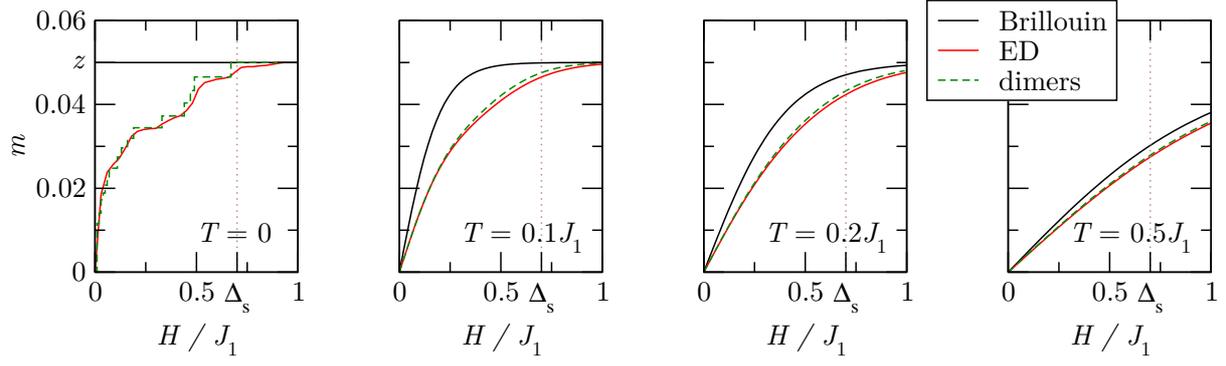


FIGURE 4.13 – Contribution des impuretés à la courbe d’aimantation dans une échelle frustrée ( $J_1 = J_\perp$  et  $J_2 = 0.8J_1$ ) pour une concentration  $z = 0.05$ . L’ansatz (4.90) correspondant essentiellement à des dimères indépendants est comparé à la diagonalisation exacte du modèle effectif sur des échantillons de dix impuretés.

Cette expression n’est valable que pour des températures inférieures au gap  $\Delta_S$ . Au-delà il est nécessaire de prendre en compte l’activation thermique des magnons, proportionnelle à  $e^{\frac{H-\Delta_S}{T}}$ . Comme on peut le voir sur la figure 4.13, l’ansatz (4.90) capte parfaitement la réponse des impuretés au champ magnétique, calculée en diagonalisant exactement le hamiltonien effectif. L’écart à la courbe de Brillouin à basse température est d’autant plus important que l’exposant de la fonction de répartition  $2z\xi$  est grand. Cette déviation pourrait être vérifiée expérimentalement.



# Chapitre 5

## Désordre dans la chaîne de Majumdar-Ghosh

Comme on l'a vu dans la partie précédente, la présence d'impuretés dans un système magnétique conduit naturellement à un hamiltonien effectif de basse énergie avec des couplages désordonnés. Ce hamiltonien peut même être frustrant dans le cas de corrélations incommensurables. Il existe a priori deux approches pour étudier ce type de hamiltonien désordonné, selon la force du désordre. Lorsque le désordre est faible, on peut envisager de traiter celui-ci perturbativement (en bosonisation par exemple). A fort désordre, la méthode usuelle est la renormalisation dans l'espace réel (RSRG [53, 19, 26, 38]), mais cette dernière n'est exacte que dans le cas d'un point fixe de désordre infini. C'est notamment le cas d'une chaîne désordonnée avec uniquement des couplages aux premiers voisins, mais ce n'est pas le cas des échelles ou des chaînes frustrées [36]. Par ailleurs, les approches numériques sont très difficiles dans les systèmes désordonnés à cause des effets de taille finie. En effet, la physique y est souvent contrôlée par des événements rares difficilement observables sur les tailles de système accessibles numériquement.

Dans ce chapitre, on étudie les effets du désordre sur une chaîne frustrée, avec des couplages aux premiers et seconds voisins. Ce travail a donné lieu à la publication [46]. Le hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H} = \sum_i \alpha_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \beta_i \mathbf{S}_{i-1} \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (5.1)$$

où les  $\alpha_i$  et  $\beta_i$  sont des variables aléatoires de valeurs moyennes respectives  $\alpha$  et  $\beta$ . On prendra dans la suite des distributions de couplages uniformes, mais la plupart des résultats qui suivent restent valables pour des distributions avec une valeur minimale.

En utilisant la méthode variationnelle introduite au chapitre 2, on identifie deux mécanismes de localisation pour les spinons. Le premier est une localisation de type Anderson ; la longueur de localisation associée et la densité d'états à basse énergie correspondantes sont déterminées analytiquement. Le second mécanisme est un mécanisme de confinement aléatoire qui détruit le gap en générant l'apparition de domaines d'Imry-Ma délimités par des spinons. Cette image à faible désordre est finalement discutée à la lumière de la renormalisation à fort désordre.

## 5.1 Condition de Majumdar-Ghosh généralisée

L'idée de base de ce travail est d'utiliser la description variationnelle des spinons au point MG, mais en présence de désordre. Pour cela, il est préférable que les états de MG restent états propres du hamiltonien désordonné. Appliquons les différents termes du hamiltonien à l'état  $|\text{MG}\rangle = |\cdots \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \cdots\rangle$  (où les singulets sont sur les liens  $(2j, 2j + 1)$ ) :

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_{2j} \cdot \mathbf{S}_{2j+1} |\cdots \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \cdots\rangle &= -\frac{3}{4} |\cdots \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \cdots\rangle \\
\mathbf{S}_{2j-1} \cdot \mathbf{S}_{2j} |\cdots \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \cdots\rangle &= \frac{1}{4} |\cdots \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \cdots\rangle + \frac{1}{2} |\cdots \bullet\bullet \overset{\curvearrowright}{\bullet\bullet} \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \cdots\rangle \\
\mathbf{S}_{2j-1} \cdot \mathbf{S}_{2j+1} |\cdots \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \cdots\rangle &= \frac{1}{4} |\cdots \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \cdots\rangle - \frac{1}{2} |\cdots \bullet\bullet \overset{\curvearrowright}{\bullet\bullet} \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \cdots\rangle \\
&= -\frac{1}{4} |\cdots \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \cdots\rangle - \frac{1}{2} |\cdots \bullet\bullet \overset{\curvearrowright}{\bullet\bullet} \bullet\bullet \bullet\bullet \bullet\bullet \cdots\rangle .
\end{aligned} \tag{5.2}$$

On obtient donc :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}|\text{MG}\rangle &= \frac{1}{4} \sum_j (-3\alpha_{2j} + \alpha_{2j+1} - \beta_{2j} - \beta_{2j+1}) |\text{MG}\rangle \\
&\quad + \frac{1}{2} \sum_j (\alpha_{2j-1} - \beta_{2j} - \beta_{2j-1}) |[2j-2, 2j+1]\rangle . \tag{5.3}
\end{aligned}$$

Une expression similaire est obtenue pour l'autre état de MG. Les deux états de MG restent ainsi états propres (et dégénérés), pourvu que pour tout  $i$  :

$$\alpha_i = \beta_i + \beta_{i+1} . \tag{5.4}$$

En moyenne, cette condition redonne bien la condition de MG :  $\alpha = 2\beta$ .<sup>1</sup> Compte-tenu de cette condition de MG généralisée (5.4), il est assez naturel de séparer le hamiltonien en deux [90] :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{RMG}} + \lambda \mathcal{H}_{\text{dim}} , \tag{5.5}$$

où

$$\mathcal{H}_{\text{RMG}} = \sum_i (\beta_i + \beta_{i+1}) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \beta_i \mathbf{S}_{i-1} \cdot \mathbf{S}_{i+1} \tag{5.6}$$

vérifie (5.4) et  $\lambda \mathcal{H}_{\text{dim}}$  est la partie restante. Pour comprendre les effets de  $\mathcal{H}_{\text{RMG}}$  et de  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  sur la dynamique des spinons, nous allons utiliser l'approche variationnelle de la partie 2.1.

## 5.2 Localisation d'un spinon

Dans un premier temps, on étudie uniquement la partie MG désordonnée du hamiltonien  $\mathcal{H}_{\text{RMG}}$ . Cela revient à supposer que les  $\alpha_i$  sont entièrement corrélés aux  $\beta_i$  par la condition de MG généralisée (5.4).

---

1. L'équation (5.3) permet aussi de retrouver la ligne de Shastry-Sutherland le long de laquelle l'état de MG avec les dimères sur les liens forts reste état propre (et état fondamental) dans la chaîne explicitement dimérisée  $J_1\text{-}J_2\text{-}\delta$  (partie 1.3.3). En effet, on a alors  $\beta_i = J_2$  et  $\alpha_i = J_1 + (-1)^i \delta$  et la condition (5.4) sur les liens faibles donne  $J_1 - \delta = 2J_2$ .

### 5.2.1 Modèle effectif et localisation

On applique l'approche variationnelle décrite dans la partie 2.1 à  $\mathcal{H}_{\text{RMG}}$  (5.6). La restriction de  $\mathcal{H}_{\text{RMG}}$  au sous-espace variationnel s'écrit :

$$\left(\tilde{\mathcal{H}}_{\text{RMG}} - E_{\text{MG}}\right) |2j\rangle = \frac{\beta_{2j}}{2} \left( |2j-2\rangle + \frac{5}{2}|2j\rangle + |2j+2\rangle \right), \quad (5.7)$$

où

$$E_{\text{MG}} = -\frac{3}{4} \sum_i \beta_i \quad (5.8)$$

est l'énergie des états de MG extrapolée aux tailles impaires. Dans la suite, on prend  $E_{\text{MG}}$  comme origine des énergies. Le hamiltonien effectif<sup>2</sup> (5.7) est un hamiltonien d'Anderson avec désordre diagonal et hors-diagonal. Ce type de hamiltonien a été largement étudié et on pourra se référer à [52] pour une description générale. En appliquant le hamiltonien effectif (5.7) à une fonction d'onde variationnelle

$$|\psi\rangle = \sum_j \psi_j |2j\rangle, \quad (5.9)$$

on obtient l'équation de Schrödinger :

$$\frac{\tilde{\beta}_j}{2} \left( \psi_{j-1} + \frac{5}{2}\psi_j + \psi_{j+1} \right) = E\psi_j, \quad (5.10)$$

où on a posé  $\beta_{2j} = \tilde{\beta}_j$ . Comme les coefficients de l'équation (5.10) sont réels, on peut choisir les  $\psi_j$  réels également. Cette équation se réécrit sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \psi_{j+1} \\ \psi_j \end{pmatrix} = T_j \begin{pmatrix} \psi_j \\ \psi_{j-1} \end{pmatrix}, \quad (5.11)$$

---

2. Comme on travaille dans une base non-orthogonale, le hamiltonien (5.7) est représenté par une matrice non-hermitienne

$$[\tilde{\mathcal{H}}_{\text{RMG}}] = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{5}{2}\beta_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_2 & \frac{5}{2}\beta_2 & \beta_2 & & \\ & \beta_3 & \frac{5}{2}\beta_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

La similitude avec une matrice hermitienne est facile à démontrer lorsque  $\forall i, \beta_i > 0$ . Dans ce cas, la matrice de passage diagonale  $[D]$  d'éléments  $[D]_{ij} = \sqrt{\beta_i}\delta_{ij}$  transforme  $[\tilde{\mathcal{H}}_{\text{RMG}}]$  en une matrice symétrique réelle :

$$[D]^{-1}[\tilde{\mathcal{H}}_{\text{RMG}}][D] = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{5}{2}\beta_1 & \sqrt{\beta_1\beta_2} & & & \\ \sqrt{\beta_1\beta_2} & \frac{5}{2}\beta_2 & \sqrt{\beta_2\beta_3} & & \\ & \sqrt{\beta_2\beta_3} & \frac{5}{2}\beta_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

où  $T_j$  est une matrice de transfert aléatoire donnée par

$$T_j = \begin{pmatrix} \frac{2E}{\beta_j} - \frac{5}{2} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

Le comportement asymptotique de la fonction d'onde est donc donné par le produit d'un grand nombre de matrices aléatoires  $2 \times 2$ . Ce produit est caractérisé par l'existence d'un exposant de Lyapunov  $\gamma$  :

$$\gamma = \lim_{j \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \ln \left| \text{Tr} \left[ \prod_{j < N} T_j \right] \right|, \quad (5.13)$$

L'existence d'un exposant de Lyapunov strictement positif témoigne de la décroissance exponentielle de la fonction d'onde à l'infini. C'est la localisation d'Anderson.

Pour valider le hamiltonien effectif (5.7) obtenu dans l'approche variationnelle, le profil d'aimantation obtenu par cette méthode (voir partie 2.1) est comparé à des simulations DMRG dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 1/2$ . Comme on le voit sur la figure 5.1(a), le spinon est bien localisé et le modèle effectif donne des résultats quantitatifs pour l'aimantation. Le profil de dimérisation  $d_i = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle$  (figure 5.1(b)) montre que le spinon sépare clairement deux domaines MG différents.

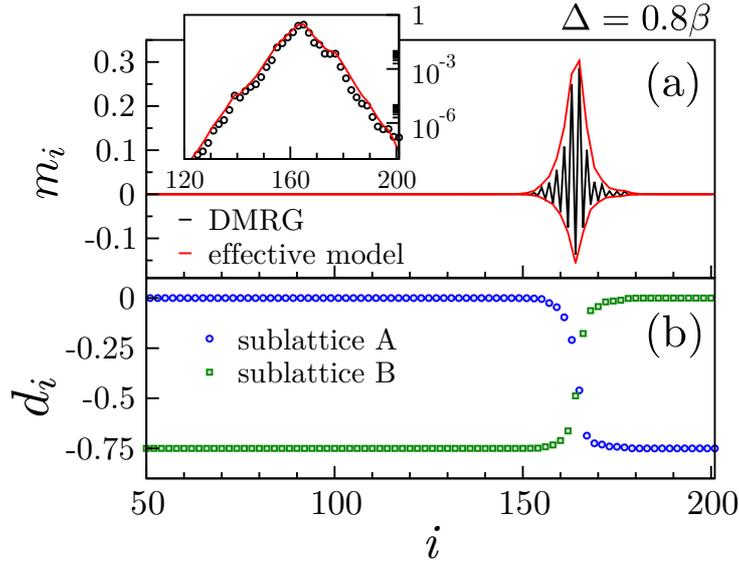


FIGURE 5.1 – (a) Profil d'aimantation dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 1/2$ , calculé en DMRG. Encart : échelle verticale logarithmique. (b) Profil de dimérisation calculé en DMRG, montrant les domaines de MG.

## 5.2.2 Méthode de Dyson-Schmidt

Le comportement de l'exposant de Lyapunov peut être étudié à l'aide de la méthode de Dyson-Schmidt [22, 52]. On commence par introduire les variables de Riccati :

$$R_j = \frac{\psi_{j+1}}{\psi_j}. \quad (5.14)$$

L'équation de Schrödinger effective (5.10) donne une relation de récurrence sur les variables de Riccati :

$$R_j + \frac{5}{2} + \frac{1}{R_{j-1}} = \frac{2E}{\beta_j} . \quad (5.15)$$

On suppose que la densité de probabilité des variables de Riccati  $R_j$  converge vers une distribution invariante  $F(R)$  de mesure  $dW(R) = F(R)dR$  quand  $j \rightarrow +\infty$ . Il s'agit maintenant de relier l'exposant de Lyapunov  $\gamma(E)$  à cette mesure invariante. Par définition des variables de Riccati, on a :

$$\psi_j = \psi_0 \prod_{i=0}^{j-1} R_i , \quad \text{soit} \quad \ln |\psi_j| = \ln |\psi_0| + \sum_{i=0}^{j-1} \ln |R_i| . \quad (5.16)$$

Comme les variables de Riccati sont asymptotiquement distribuées selon la mesure invariante  $dW(R)$ , on en déduit :  $\ln |\psi_j| \sim j\gamma(E)$ , où  $\gamma(E)$  est l'exposant de Lyapunov défini par :

$$\gamma(E) = \lim_{j \rightarrow +\infty} \frac{1}{j} \sum_{i=0}^{j-1} \ln |R_i| = \int \ln |R| dW(R) . \quad (5.17)$$

On peut généraliser l'expression de l'exposant de Lyapunov et la notion de mesure invariante à des variables de Riccati complexes. On introduit ainsi l'exposant caractéristique, défini pour des énergies complexes :

$$\Omega(E) = \int \ln(R) dW(R) , \quad (5.18)$$

où  $R$  est maintenant une variable complexe et  $dW(R)$  une mesure à support complexe. D'après (5.17) l'exposant de Lyapunov est simplement la partie réelle de  $\Omega(E)$ . On peut montrer que la partie imaginaire de  $\Omega(E)$  est reliée à la densité d'états intégrée [52], selon la formule

$$\Omega(E + i0^+) = \gamma(E) + i\pi(1 - N(E)) . \quad (5.19)$$

En itérant la relation de récurrence (5.15), on peut calculer numériquement la distribution  $F(R)$  des variables de Riccati et en déduire l'exposant de Lyapunov et la densité d'état.

### 5.2.3 Développement de faible désordre

On considère d'abord le cas non-désordonné où tous les  $\beta_i$  sont égaux à  $\beta$ . Dans ce cas, on a vu (partie 2.2.1) que le spectre est donné par la relation de dispersion :

$$E(k) = \beta \left( \frac{5}{4} + \cos k \right) . \quad (5.20)$$

On peut paramétrer l'énergie sur  $\mathbb{R}$  par  $k$ , avec  $0 < \text{Re}[k] < \pi$  et  $\text{Im}[k] < 0$ , de sorte que la partie imaginaire de l'énergie soit positive. Le segment  $k \in [0, \pi]$  correspond au spectre  $E \in [\beta/4, 9\beta/4]$ ; les lignes  $k = -it$  et  $k = \pi - it$  avec  $t > 0$  décrivent les énergies hors du spectre, respectivement  $E > 9\beta/4$  et  $E < \beta/4$ . Dans le cas non-désordonné, la relation de récurrence sur les variables de Riccati est simplement :

$$R_j = 2 \cos(k) - \frac{1}{R_{j-1}} = f(R_{j-1}) \quad (5.21)$$

La fonction  $f$  a deux points fixes  $R = e^{\pm ik}$ , l'un stable ( $e^{ik}$  car  $\text{Im}[k] < 0$ ), l'autre instable ( $e^{-ik}$ ). On en déduit la densité de probabilité invariante des variables de Riccati,  $F(R) = \delta(R - e^{ik})$  et l'exposant caractéristique,  $\Omega = ik$ . On peut simplifier l'application de  $f$  en effectuant le changement de variable :

$$y = \frac{R - e^{ik}}{R - e^{-ik}} . \quad (5.22)$$

On vérifie en effet qu'en terme des variable  $y_j$ , la relation de récurrence devient :

$$y_j = e^{-2ik} y_{j-1} , \quad (5.23)$$

dans le cas non-désordonné et

$$y_j = e^{-2ik} \frac{y_{j-1} - g_j(1 - y_{j-1})}{1 - g_j(1 - y_{j-1})} , \quad (5.24)$$

où

$$g_j = \frac{\left(\frac{5}{4} + \cos k\right) \left(\tilde{\beta}_j - \beta\right)}{i \sin(k) \tilde{\beta}_j} , \quad (5.25)$$

dans le cas désordonné. Dans la limite de faible désordre, les  $g_j$  deviennent infiniment petits et les variables  $y_j$  tendent exponentiellement vers 0 (car  $\text{Im}[k] < 0$ ). On peut alors développer l'exposant caractéristique en terme des moments de la distribution des  $g_j$  et donc des  $\tilde{\beta}_j$ . Le développement à l'ordre le plus bas donne :

$$\Omega = ik - \frac{\overline{g^2}}{2} + O\left(\overline{g^3}\right) . \quad (5.26)$$

Ce calcul est valable quelle que soit la distribution des  $\tilde{\beta}_j$ , pourvu qu'elle possède un moment d'ordre 2. Si on prend pour les  $\tilde{\beta}_j$  une densité de probabilité uniforme de largeur  $2\Delta$  centrée en  $\beta$ , on peut calculer l'exposant de Lyapunov :

- pour  $E < \frac{\beta}{4}$  et  $E = \beta \left(\frac{5}{4} - \text{ch } t\right)$  :  $\gamma \simeq t - \frac{1}{6} \left(\frac{\left(\frac{5}{4} - \text{ch } t\right) \Delta}{\text{sh}(t)\beta}\right)^2$ ,
- pour  $\frac{\beta}{4} < E < \frac{9\beta}{4}$  et  $E = \beta \left(\frac{5}{4} + \cos k\right)$  :  $\gamma \simeq \frac{1}{6} \left(\frac{\left(\frac{5}{4} + \cos k\right) \Delta}{\sin(k)\beta}\right)^2$ ,
- pour  $E > \frac{9\beta}{4}$  et  $E = \beta \left(\frac{5}{4} + \text{ch } t\right)$  :  $\gamma \simeq t - \frac{1}{6} \left(\frac{\left(\frac{5}{4} + \text{ch } t\right) \Delta}{\text{sh}(t)\beta}\right)^2$ .

Ces résultats sont comparés au calcul exact en tirant numériquement les variables de Riccati, sur la figure 5.2. En particulier, on peut calculer la longueur de localisation  $\xi_{\text{loc}} = 1/\gamma$  à l'énergie minimale  $E_{\text{min}} = \beta_{\text{min}}/4$  (où  $\beta_{\text{min}} = \min \tilde{\beta}_j$ ) :

$$\xi_{\text{loc}} \simeq \sqrt{\frac{2\beta}{\Delta}} , \quad (5.27)$$

en unité de la maille du sous-réseau  $2a$ . Comme l'aimantation est reliée à la densité de probabilité  $|\psi_i|^2$  (voir partie 2.1), c'est aussi la longueur qui intervient dans l'aimantation

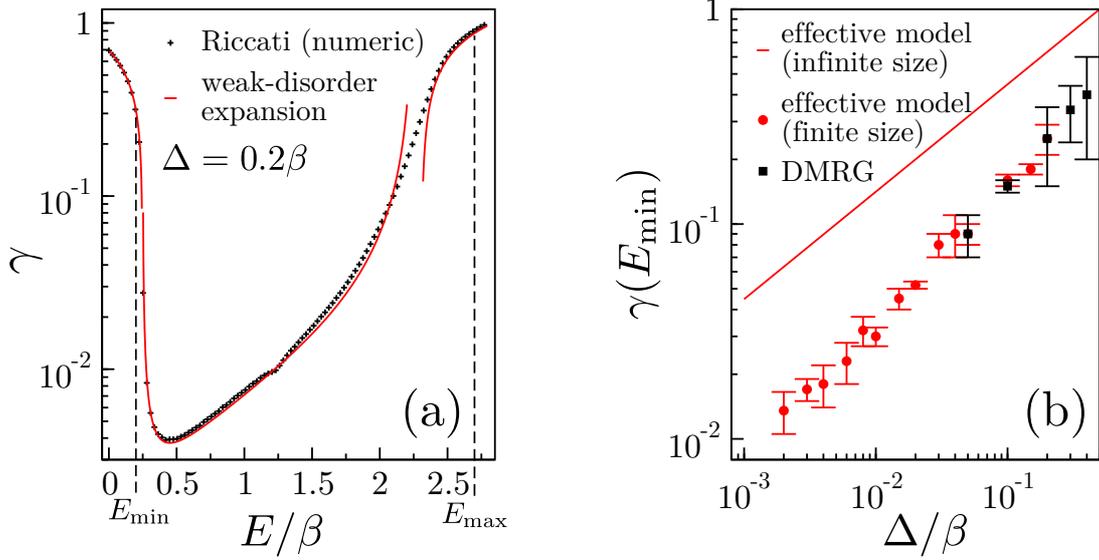


FIGURE 5.2 – (a) Exposant de Lyapunov  $\gamma$  en fonction de l'énergie  $E$  du modèle effectif. (b) Effets de taille finie sur l'exposant de Lyapunov  $\gamma$ .

en unité de  $a$ . Cette longueur de localisation n'est en aucun cas reliée à la longueur de corrélation de spin dans l'état de MG et ne peut pas non plus être captée par RSRG. Sur la figure 5.2(b), cette expression (5.27) est comparée aux longueurs de localisation extraites de la fonction d'onde calculée par diagonalisation exacte du hamiltonien effectif (5.7) et du profil d'aimantation calculé en DMRG. Comme nous allons le voir, la différence s'explique par les effets de taille finie.

### 5.2.4 Argument de Lifshitz pour la densité d'état

Pour décrire les effets de taille finie, il faut étudier la densité d'état. On peut déterminer la forme de la densité d'état à basse énergie en adaptant l'argument de Lifshitz [51]. A cause du coefficient  $5/4$  dans l'équation de Schrödinger (5.10), le spinon gagne plus à minimiser son énergie potentielle que son énergie cinétique. Par conséquent, les états de basse énergie sont localisés sur des amas où les  $\tilde{\beta}_j$  sont petits. Le cas le plus favorable est un amas infini avec  $\tilde{\beta}_j = \beta_{\min}$  quel que soit  $j$ . Dans ce cas, l'énergie du fondamental vaut

$$E_{\min} = \frac{\beta_{\min}}{4}, \quad (5.28)$$

qui est l'énergie d'un spinon à la limite thermodynamique. Supposons maintenant que la fonction d'onde soit localisée sur un amas de taille  $\ell$  (en unité de  $2a$ ), sur lequel les  $\tilde{\beta}_j$  sont tous pratiquement égaux à  $\beta_{\min}$ . Les énergies possibles sont alors les énergies d'une particule libre dans une boîte avec des conditions aux limites ouvertes :

$$E_n = \beta_{\min} \left( \frac{5}{4} + \cos \frac{n\pi}{\ell + 1} \right), \quad (5.29)$$

avec  $0 < n < \ell + 1$ . En particulier, l'énergie la plus basse est :

$$E_\ell \simeq \beta_{\min} \left( \frac{1}{4} + \frac{\pi^2}{2\ell^2} \right). \quad (5.30)$$

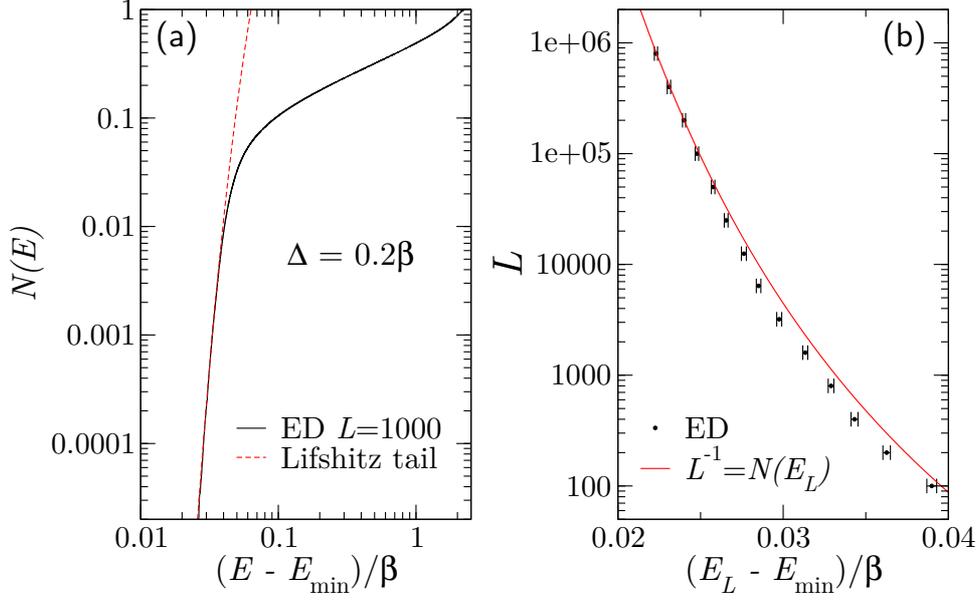


FIGURE 5.3 – (a) Densité d'état intégrée du modèle effectif pour un spinon. (b) Correction de taille finie sur l'énergie du fondamental.

Cette estimation est bonne tant que les variations des  $\tilde{\beta}_j$  sur l'amas restent négligeables devant  $E_\ell - E_{\min}$ , c'est-à-dire tant que

$$\left| \tilde{\beta}_j - \beta_{\min} \right| < C (E_\ell - E_{\min}) , \quad (5.31)$$

où  $C$  est une constante indéterminée. Pour une distribution uniforme des  $\tilde{\beta}_j$ , la probabilité d'avoir un tel amas sur un système de taille  $L \gg \ell$  est :

$$P_\ell \sim L \left[ \frac{C(E_\ell - E_{\min})}{2\Delta} \right]^\ell . \quad (5.32)$$

C'est aussi la probabilité d'avoir un état d'énergie  $E < E_\ell$ . On en déduit donc la forme de la densité d'états intégrée, par unité de longueur, à basse énergie :

$$N(E) \sim \exp \left\{ -\pi \sqrt{\frac{\beta_{\min}}{2(E - E_{\min})}} \ln \left[ \frac{2\Delta}{C(E - E_{\min})} \right] \right\} , \quad (5.33)$$

qui possède une singularité essentielle en  $E = E_{\min}$ , dite singularité de Lifshitz. Comme le montre la figure 5.3(a), ce comportement est en très bon accord avec le calcul numérique de la densité d'état sur le modèle effectif.

De plus, la forme de la densité d'état renseigne sur les effets de taille finie. En effet, l'énergie  $E_L$  d'un spinon sur une chaîne de longueur effective  $L$  est telle que  $N(E_L) = 1/L$ . La figure 5.3(b) montre que ce résultat reproduit très bien les effets de taille finie du modèle effectif obtenus numériquement. Asymptotiquement, on s'attend donc à des corrections de taille finie de la forme :

$$E_L \simeq E_{\min} + K\beta_{\min} \left[ \frac{\ln(\ln L)}{\ln L} \right]^2 , \quad (5.34)$$

où  $K$  est une constante. La limite thermodynamique correspondant à des amas de Lifshitz rares, les effets de taille finie (et d'échantillonnage) sont très importants. Ils expliquent notamment la différence observée figure 5.1(d) entre l'exposant de Lyapunov dans le fondamental à taille finie et à la limite thermodynamique. L'exposant de Lyapunov à taille finie  $\gamma(E_L)$  est en effet sensiblement différent de la limite thermodynamique  $\gamma(E_{\min})$ .

### 5.3 Transition vers une phase paramagnétique

Ces résultats sur la dynamique d'un seul spinon permettent de comprendre la physique de basse énergie du hamiltonien  $\mathcal{H}_{\text{RMG}}$  (5.6). Tant que les spinons coûtent une énergie  $E_{\min} > 0$ , les états de MG restent les fondamentaux et le système reste gappé. Les premiers états excités consistent à créer une paire de spinons localisés. Tant que les deux états de MG restent localement dégénérés, les spinons ont uniquement une interaction de contact. Ils ne peuvent former un état lié que dans les secteurs d'impulsion du centre de masse  $K \in [\pi/3, 2\pi/3]$ , l'énergie de l'état lié restant de toute façon supérieure au gap dans les secteurs  $K = 0, \pi$  (partie 2.3). Par conséquent, les deux spinons localisent de manière indépendante sur des amas a priori éloignés. On peut vérifier ce scénario en calculant par DMRG le profil d'aimantation dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 1$ . Le résultat est tracé figure 5.4 pour une réalisation typique du désordre. Le profil d'aimantation est bien reproduit en diagonalisant exactement le modèle effectif pour chaque spinon, c'est-à-dire sur chaque sous-réseau. À la limite thermodynamique, le gap de spin  $\Delta_S$  est simplement l'énergie des deux spinons :

$$\Delta_S = 2E_{\min} = \frac{\beta_{\min}}{2}, \quad (5.35)$$

où  $\beta_{\min} = \beta - \Delta$  pour la distribution uniforme. Cette expression est en bon accord avec le gap minimum calculé avec le DMRG sur cent réalisations du désordre pour  $L = 200$ , représenté figure 5.4(c). On a également tracé le gap estimé à l'aide du modèle effectif sur les mêmes réalisations du désordre, pour montrer que l'écart au comportement linéaire (5.35) est principalement dû aux effets de taille finie.

Si on augmente encore le désordre, l'énergie  $E_{\min}$  (5.28) des spinons devient négative et le gap (5.35) se ferme. La création d'une ou plusieurs paires de spinons devient énergétiquement favorable. Les états de MG restent états propres mais ne sont plus les fondamentaux. Il y a donc une transition de phase quantique vers une phase paramagnétique de spinons localisés, dont la nature sera discutée par le RSRG (partie 5.5). Au voisinage de la transition, les spinons sont suffisamment dilués pour négliger leurs interactions. La densité de spinons  $\rho$  est alors simplement la densité d'états à un spinon d'énergie négative, c'est-à-dire  $\rho = N(0)$ . Les calculs en DMRG confirment cette image de la phase désordonnée, montrant que le fondamental et les premiers états excités sont pratiquement dégénérés, avec des spinons localisés visibles dans le profil d'aimantation.

La susceptibilité à basse température passe d'un comportement activé en  $\chi \sim e^{-\Delta_S/T}$  à une loi de Curie  $\chi \sim N(0)/4T$  lors de la transition. La transition est continue pour une distribution continue des  $\beta_i$  et du premier ordre pour une distribution discrète. Cependant, la forme de  $N(E)$  à basse énergie n'est plus donnée par la singularité de Lifshitz (5.33) pour  $E_{\min} \simeq 0$ . En effet, lorsque  $\beta_{\min} \simeq 0$ , l'argument de Lifshitz n'est plus valable car l'énergie sur un amas de taille  $\ell$  donnée par la formule (5.29) ne dépend plus de  $\ell$ . Par

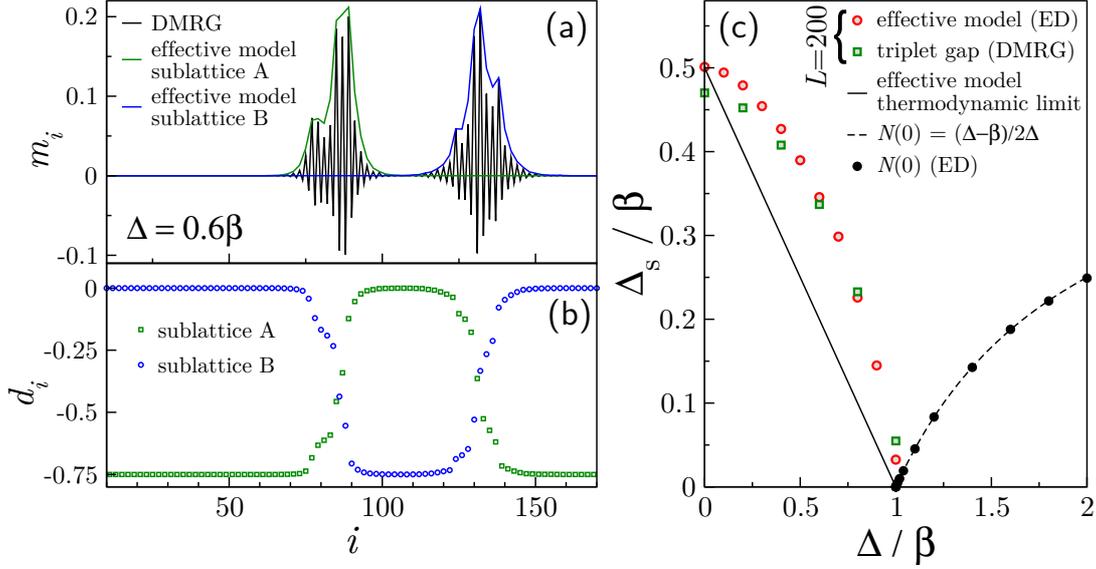


FIGURE 5.4 – Profils d’aimantation (a) et de dimérisation (b) dans le premier état excité (triplet). (c) Évolution du gap de spin et de la densité de spinons en fonction du désordre.

contre, le nombre d’états d’énergie négative est simplement égal au nombre de  $\beta_i$  négatifs. On en déduit la densité d’états d’énergie négative pour la distribution uniforme :

$$N(0) = \frac{\Delta - \beta}{2\Delta}, \quad (5.36)$$

et l’exposant critique associé à la densité de spinon est simplement 1, en accord avec la figure 5.4.

On a négligé l’interaction magnétique résiduelle entre spinons. Les spinons dans le secteur singulet ne peuvent pas être en contact car cet état est un état de MG qui est état propre du hamiltonien. Par contre, il existe une condition limite de contact dans le secteur triplet que l’on a dérivée dans la partie 2.3 pour le cas non-désordonné. Cette condition permet d’abaisser l’énergie du secteur triplet et il en résulte une interaction ferromagnétique entre spinons. L’amplitude est à peu près donnée par le recouvrement des fonctions d’onde des deux spinons et par conséquent décroît exponentiellement avec la distance.

## 5.4 Dimérisation aléatoire

On étudie maintenant le hamiltonien  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$ . Pour cela, on introduit un paramètre  $\lambda \in [0, 1]$  qui décorrèle progressivement les  $\alpha_i$  des  $\beta_i$  :

$$\alpha_i = (1 - \lambda)(\beta_i + \beta_{i+1}) + \lambda\delta_i, \quad (5.37)$$

où les  $\delta_i$  sont des nouvelles variables aléatoires décorrélées des  $\beta_i$ . Le cas  $\lambda = 0$  correspond à la condition de MG généralisée (5.4). On peut calculer les corrélations entre les  $\alpha_i$  et les  $\beta_i$  :

$$\overline{\alpha_i \beta_i} - \overline{\alpha_i} \overline{\beta_i} = (1 - \lambda)\sigma_\beta^2, \quad (5.38)$$

où  $\sigma$  désigne l'écart-type. On montre ainsi que les  $\alpha_i$  et les  $\beta_i$  deviennent parfaitement décorréelées pour  $\lambda = 1$ . De plus, on choisit d'imposer la condition de MG (5.4) pour les différents moments de la distribution :  $\overline{\alpha_i} = 2\overline{\beta_i}$ ,  $\sigma_\alpha^2 = 2\sigma_\beta^2$ , etc. Ainsi, pour une forme de distribution des  $\beta_i$  donnée (la distribution uniforme par exemple), le désordre est entièrement décrit par seulement deux paramètres : la force du désordre  $\Delta$  et la décorrélation  $\lambda$ . En séparant le hamiltonien selon l'équation (5.5), on obtient :

$$\mathcal{H}_{\text{dim}} = \sum_i \eta_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}, \quad (5.39)$$

où on introduit des nouvelles variables aléatoires  $\eta_i = \delta_i - \beta_i - \beta_{i+1}$  de valeur moyenne nulle. Par clarté, on a listé ci-dessous les différentes variables aléatoires, ainsi que leur moyenne, variance et corrélations avec les  $\beta_i$ .

variable	moyenne	variance $\sigma^2$	corrélations
$\beta_i$	$\beta$	$\sigma_\beta^2$	
$\alpha_i = (1 - \lambda)(\beta_i + \beta_{i+1}) + \lambda\delta_i$	$\alpha = 2\beta$	$\sigma_\alpha^2 = 2\sigma_\beta^2$	$\overline{\alpha_i\beta_i} - \alpha\beta = (1 - \lambda)\sigma_\beta^2$
$\delta_i$	$\delta = 2\beta$	$\sigma_\delta^2 = 2\frac{2-\lambda}{\lambda}\sigma_\beta^2$	$\overline{\delta_i\beta_i} - \delta\beta = 0$
$\eta_i = \delta_i - \beta_i - \beta_{i+1}$	0	$\sigma_\eta^2 = \frac{4}{\lambda}\sigma_\beta^2$	$\overline{\eta_i\beta_i} = -\sigma_\beta^2$

La décorrélation  $\lambda$  permet de traiter  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  en perturbation de  $\mathcal{H}_{\text{RMG}}$ . À faible désordre ( $\Delta < \beta$ ), les états fondamentaux non-perturbés de  $\mathcal{H}_{\text{RMG}}$  sont les états de MG. La perturbation  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  (5.40) est un terme de dimérisation aléatoire, qui au premier ordre en  $\lambda$ , lève localement la dégénérescence entre les deux états de MG.

### 5.4.1 Confinement d'un spinon

L'effet de  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  sur la dynamique d'un spinon peut être à nouveau compris par l'approche variationnelle. On a étudié l'application de  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  à un état  $|2j\rangle$  dans le cas non-désordonné ( $\eta_i = \eta$ ,  $\forall i$ ) dans la partie 2.2.2 :  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  génère des états de la forme  $[[2i - 2, 2i + 1], 2j]$  ou  $|2j, [2i - 1, 2i + 2]\rangle$  dont les projections sur le sous-espace variationnel sont données par les équations (2.23) et (2.24). On en déduit la restriction de  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  au sous-espace variationnel :

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}}_{\text{dim}}|2j\rangle = & \left[ -\frac{3}{4} \left( \sum_{i<j} \eta_{2i} + \sum_{i\geq j} \eta_{2i+1} \right) + \frac{1}{4} (\eta_{2j-1} + \eta_{2j}) \right] |2j\rangle \\ & + \frac{1}{2} \eta_{2j-1} |2j - 2\rangle + \frac{1}{2} \eta_{2j} |2j + 2\rangle + \sum_{i<j} \left( -\frac{1}{2} \right)^{j-i} \eta_{2i-1} \left( \frac{1}{4} |2i\rangle + \frac{1}{2} |2i - 2\rangle \right) \\ & + \sum_{i>j} \left( -\frac{1}{2} \right)^{i-j} \eta_{2i} \left( \frac{1}{4} |2i\rangle + \frac{1}{2} |2i + 2\rangle \right). \quad (5.40) \end{aligned}$$

Comme  $\bar{\eta} = 0$ , tous ces termes sont nuls en moyenne. Et les termes de sauts notamment n'influencent pas beaucoup sur la dynamique.

Le principal effet de  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  est d'induire un potentiel chimique aléatoire :

$$\mu_j = \langle 2j | \mathcal{H}_{\text{dim}} | 2j \rangle = -\frac{3}{4} \left( \sum_{i<j} \eta_{2i} + \sum_{i\geq j} \eta_{2i+1} \right). \quad (5.41)$$

Les  $\eta_i$  sur un même sous-réseau étant des variables indépendantes, ce potentiel est simplement la somme de deux marches aléatoires de longueur totale fixée. Si on développe ce potentiel autour d'un minimum  $\mu_0$  en  $j_0$ , le premier terme est un terme linéaire proportionnel à  $\sigma_\eta$  de la forme

$$\mu_j = \mu_0 + |j - j_0|c\sigma_\eta, \quad (5.42)$$

où  $c$  est une constante indéterminée. Ce potentiel est analogue au potentiel de confinement dans la chaîne explicitement dimérisée (partie 2.4). Si on néglige le désordre sur la partie cinétique, l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde variationnelle du spinon s'écrit :

$$E\psi_j = \frac{\beta}{2}(\psi_{j+1} - \psi_{j-1}) + \lambda|j - j_0|c\sigma_\eta\psi_j, \quad (5.43)$$

où on a pris l'énergie potentielle en  $j_0$  comme origine des énergies. Dans la limite continue, cette équation se réécrit (voir partie 2.4.1) :

$$\varepsilon\psi(x) = -\xi_{\text{conf}}^3\psi''(x) + |x|\psi(x), \quad (5.44)$$

où  $\xi_{\text{conf}}$  est la longueur caractéristique de confinement dont le comportement est donné par

$$\xi_{\text{conf}} \propto \left(\frac{\beta}{\lambda\sigma_\eta}\right)^{\frac{1}{3}} \propto \left(\frac{\beta}{\sqrt{\lambda}\Delta}\right)^{\frac{1}{3}}. \quad (5.45)$$

Cette longueur est à comparer avec la longueur de localisation  $\xi_{\text{loc}}$  donnée par l'équation (5.27).

La fonction d'onde du spinon résulte de la compétition entre le confinement induit par la dimérisation aléatoire  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  et la localisation due à la partie MG du hamiltonien  $\mathcal{H}_{\text{RMG}}$ . L'étude numérique de la position moyenne du spinon sur une chaîne de taille finie montre un *crossover* entre la localisation d'Anderson à petit  $\lambda$  et la minimisation du potentiel chimique effectif à  $\lambda \lesssim 1$ . Cependant, à la limite thermodynamique, le potentiel chimique (5.41) peut devenir très négatif et pour  $\lambda > 0$ , la position du spinon est toujours contrôlée par  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  à grande échelle. Par contre, la décroissance de la fonction d'onde fait intervenir les deux mécanismes : localisation et confinement. Le rapport

$$\frac{\xi_{\text{loc}}}{\xi_{\text{conf}}} \propto \left(\frac{\lambda\beta}{\Delta}\right)^{\frac{1}{6}} \quad (5.46)$$

montre que la localisation domine à petit  $\lambda$  et fort désordre alors que le confinement domine à grand  $\lambda$  et faible désordre.

La forme de la fonction d'onde est bien reproduite en diagonalisant le hamiltonien effectif complet  $\tilde{\mathcal{H}}_{\text{RMG}} + \lambda\tilde{\mathcal{H}}_{\text{dim}}$ . Sur la figure 5.5, le profil d'aimantation ainsi obtenu est comparé avec le résultat en DMRG pour une réalisation typique. Le profil d'aimantation est mieux reproduit par une fonction d'Airy que par une décroissance exponentielle pure, montrant que les paramètres  $\lambda$  et  $\Delta$  correspondant à la figure, se situent plutôt dans le régime de confinement que de localisation.

## 5.4.2 Argument d'Imry-Ma et formation de domaines

Par ailleurs, le potentiel chimique effectif stabilise certains états à plusieurs spinons. Ces spinons séparent des domaines MG qui minimisent l'énergie due à la dimérisation

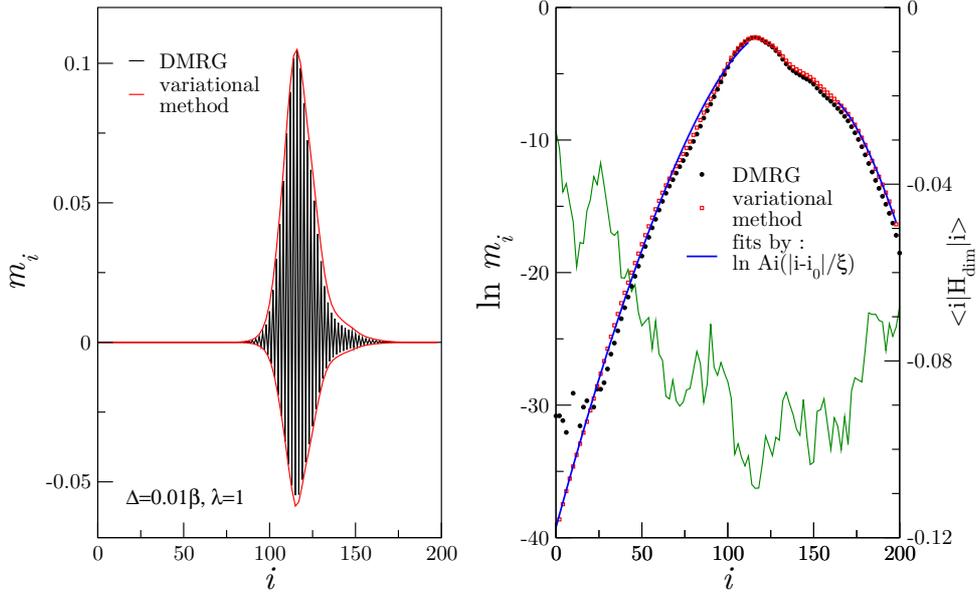


FIGURE 5.5 – (a) Profil d’aimantation d’un seul spinon pour une décorrélation  $\lambda = 1$ . (b) Tracé en échelle semi-logarithmique montrant également un fit par des fonctions d’Airy et le potentiel chimique effectif  $\mu_j$  dû à la dimérisation aléatoire.

aléatoire. L’abaissement de l’énergie des domaines de MG compense le coût de création des spinons. Ce raisonnement est un cas particulier de l’argument d’Imry-Ma [39], qui prédit la formation de domaines dans une phase ordonnée en champ aléatoire.<sup>3</sup> Par conséquent à la limite thermodynamique, le gap se ferme quelque soit  $\lambda$  non nul. Pour s’en convaincre, on peut comparer l’énergie moyenne d’un état  $||2i, 2j + 1\rangle = | \dots \overbrace{\bullet \bullet \bullet \bullet} \dots \rangle$  avec un dimère à longue portée, à l’énergie moyenne des états de MG (qui reste inchangée même si les états de MG ne sont plus états propres). À l’aide de l’équation (5.40), on obtient :

$$\langle [2i, 2j + 1] | \mathcal{H} | [2i, 2j + 1] \rangle - E_{\text{MG}} = \frac{3}{4}(\beta_{2i} + \beta_{2j+1}) - \lambda \frac{3}{4} \sum_{n=2i}^{2j+1} (-1)^n \eta_n . \quad (5.47)$$

Le premier terme qui vient de  $\mathcal{H}_{\text{RMG}}$  rend compte de l’énergie de création des deux spinons. Le second terme vient de  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  et peut être interprété comme une interaction aléatoire (dans l’espace des positions) entre les spinons. Cette interaction est nulle en moyenne, mais localement les  $\eta_n$  ne se compensent pas forcément. Sur un grand système, il est toujours possible de trouver une région assez grande pour que la différence d’énergie (5.47) devienne négative.

Cette image reste néanmoins perturbative en  $\lambda$  car les états de MG ne sont pas états propres de  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$ . Rien ne prouve que ce scénario reste valable à  $\lambda = 1$ . Les profils d’aimantation et de dimérisation calculés en DMRG montrent en fait qu’à petit désordre, cette image survit bien jusqu’à  $\lambda = 1$ . Sur la figure 5.6, on a exhibé un échantillon à  $\lambda = 1$ , pour lequel le gap de spin est nul à la précision numérique près. Le profil d’aimantation

3. Dans notre cas, le terme  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  dans le hamiltonien peut être vu au premier ordre en  $\lambda$  comme l’action d’un champ couplé au paramètre d’ordre de la phase dimérisée. Lorsque le paramètre d’ordre possède une symétrie discrète (ici  $\mathbb{Z}_2$ ), les domaines apparaissent en dimension  $d < 2$ . Dans le cas d’une symétrie continue, les domaines apparaissent en dimension  $d < 4$  [39].

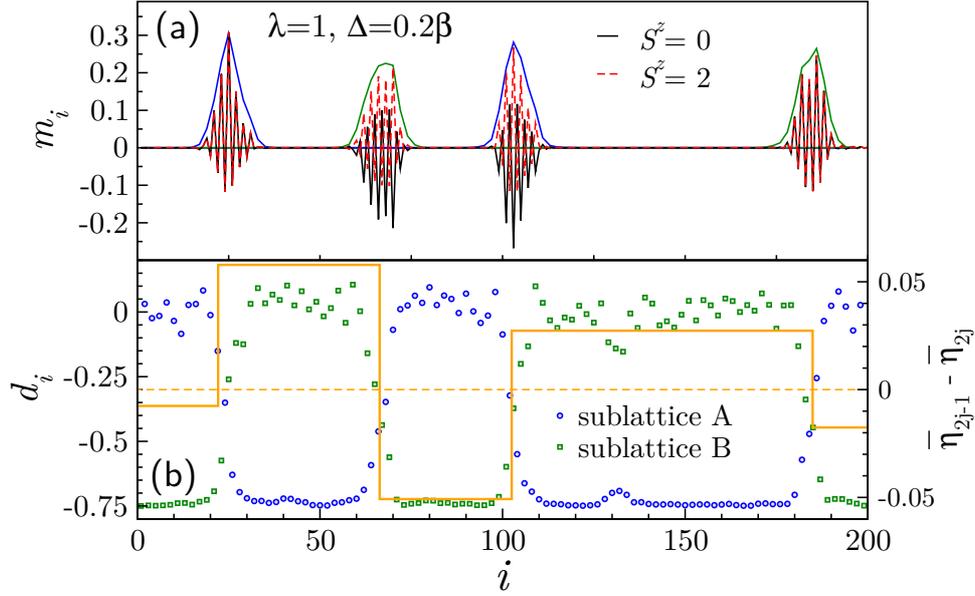


FIGURE 5.6 – (a) Profil d’aimantation montrant la présence de spinons localisés dans le fondamental pour des couplages décorrélés ( $\lambda = 1$ ). Les lignes représentent les prédictions du modèle effectif. (b) Profil de dimérisation montrant les domaines de MG. Pour chaque domaine, La ligne jaune représente la différence moyenne des  $\eta_n$  sur les deux sous-réseaux.

dans les secteurs dégénérés  $S_{\text{tot}}^z = 0, 1, 2$  montre la présence de quatre spinons dans le fondamental.<sup>4</sup> Le profil d’aimantation de chaque spinon est bien reproduit par les premiers états obtenus en diagonalisant numériquement le hamiltonien effectif à un spinon sur chaque sous-réseau. De plus, le profil de dimérisation montre clairement les domaines de MG. La moyenne de  $\mathcal{H}_{\text{dim}}$  calculée sur chaque domaine confirme le mécanisme de formation des spinons.

### 5.4.3 Statistique des domaines

Pour des couplages décorrélés ( $\lambda = 1$ ), la position moyenne des spinons est essentiellement contrôlée par la dimérisation. La décroissance de la fonction d’onde résulte de la compétition entre les mécanismes de confinement et de localisation, mais on peut supposer qu’elle est suffisamment rapide pour que l’énergie d’un état à deux spinons soit bien approximée par l’énergie moyenne (5.47) de l’état où chaque spinon est localisé sur un site. Pour avoir une image approchée du fondamental sur un échantillon donné, il s’agit alors de déterminer le nombre de spinons et leurs positions qui minimisent l’énergie moyenne. Ce problème statistique est facilement résolu par récurrence. On cherche d’abord un état à deux spinons qui minimise l’énergie (5.47). La position des deux premiers spinons ainsi

4. A priori, la symétrie  $SU(2)$  impose que l’aimantation locale soit nulle dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 0$ , même en présence de spinons dans le fondamental. Cependant, le DMRG construit des états variationnels avec une aimantation non-nulle à la position des spinons. En effet, les couplages magnétiques résiduels entre spinons sont très faibles et le gap singulet-triplet est en général inférieur à la résolution du DMRG. Par conséquent, le DMRG ne distingue pas les états de différents  $S_{\text{tot}}$  dans le secteur  $S_{\text{tot}}^z = 0$  et retourne une superposition de ceux-ci avec une aimantation locale non-nulle. En pratique, c’est cette limite du DMRG qui permet de mettre en évidence la présence de spinons dans le fondamental.

fixée, on minimise l'énergie en rajoutant deux nouveaux spinons. On procède ainsi jusqu'à ce qu'on ne puisse plus abaisser l'énergie.

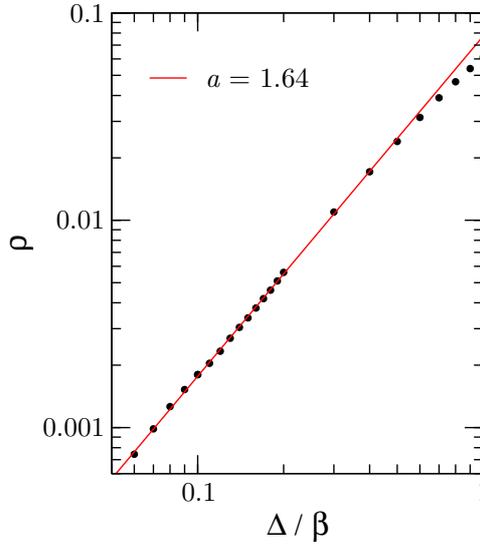


FIGURE 5.7 – Densité de spinons  $\rho$  à  $\lambda = 1$  en fonction du désordre, obtenue en moyennant sur mille échantillons de taille  $L = 1000$ .

Cet algorithme est facile à implémenter numériquement. Sur la figure 5.7, on a représenté la densité de spinons  $\rho$  ainsi obtenue. À petit désordre  $\Delta/\beta$ , le comportement de la densité de spinons avec le désordre est une loi puissance  $\rho \sim (\Delta/\beta)^a$  avec un exposant non-trivial :  $a = 1.64 \pm 0.05$ . Sur la figure 5.8, on a tracé la distribution  $p(d)$  des tailles des domaines de MG pour différentes valeurs du désordre  $\Delta/\beta$ . Cette distribution a un comportement non-trivial à courtes distances et tend naturellement vers une loi exponentielle à grandes distances

$$p(d) \underset{d \gg 1/\rho}{\propto} e^{-\rho^* d}, \quad (5.48)$$

où le paramètre  $\rho^*$  est différent de  $\rho$  à cause du comportement de  $p(d)$  à courte distance. Le *scaling* du paramètre de la loi exponentielle avec le désordre  $\rho^* \sim (\Delta/\beta)^b$  fait apparaître un exposant  $b$  sensiblement différent de  $a$  qu'on évalue numériquement à  $b = 1.46 \pm 0.05$ . La distribution des tailles des domaines de MG est importante car c'est elle qui va contrôler la distribution des couplages magnétiques résiduels entre spinons et par conséquent la physique de basse énergie.

## 5.5 Lien avec la renormalisation à fort désordre

Jusqu'à présent, on a négligé l'interaction magnétique résiduelle entre spinons. Pour  $\lambda \neq 0$ , on a vérifié en DMRG que l'interaction effective entre spinons peut être ferromagnétique ou antiferromagnétique. Son amplitude est à peu près donnée par le recouvrement des fonctions d'onde des deux spinons et par conséquent on s'attend à une décroissance avec la distance  $d$  en  $e^{-d}$  dans le régime de localisation et en  $e^{-d^{3/2}}$  dans le

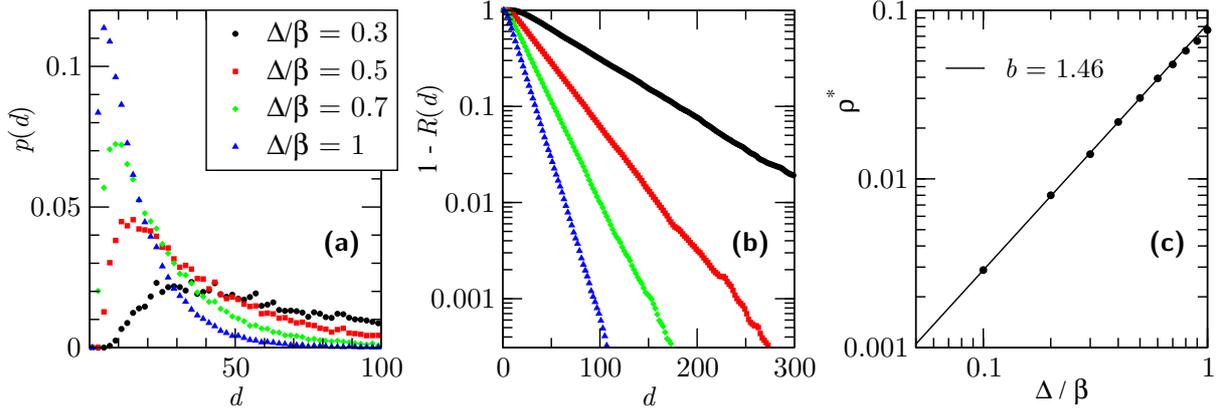


FIGURE 5.8 – (a) Distribution  $p(d)$  de la taille des domaines de MG. (b) Comportement exponentiel à grandes distances de la fonction de répartition  $R(d)$ . (c) Scaling du paramètre  $\rho^*$  de la loi exponentielle.

régime de confinement<sup>5</sup>. La distribution des distances ayant une queue exponentielle, la distribution des couplages effectifs est approximativement une loi de puissance (comme pour les impuretés dans les échelles). Le modèle effectif de spinons est donc équivalent à la chaîne F-AF étudiée par la renormalisation à fort désordre dans l'espace réel (RSRG) dans l'annexe C.3. Par ailleurs, il a été montré en appliquant directement le RSRG au hamiltonien (5.1) de la chaîne frustrée désordonnée que ce système tombe dans la phase *large-spin* de la chaîne F-AF [91, 36]. Hoyos et Miranda ont étudié l'évolution de l'exposant dynamique  $z$  (défini dans l'annexe C.3) avec les distributions initiales de couplages et ont montré que le régime universel de la chaîne F-AF n'est jamais atteint dans la chaîne frustrée [36].

On a appliqué les règles de décimation décrites dans l'annexe C.1 à la chaîne frustrée avec des distributions de couplages uniformes et pour différentes valeurs de  $\lambda$  et  $\Delta/\beta$ . Pour les premières décimations, si  $\alpha_i$  est le lien le plus fort, les spins  $i$  et  $i+1$  sont décimés et les couplages renormalisés sont

$$\begin{aligned}
\tilde{J}_{i-1,i+2} &= \frac{(\alpha_{i-1} - \beta_i)(\alpha_{i+1} - \beta_{i+1})}{2\alpha_i} = \frac{(\beta_{i-1} + \lambda\eta_{i-1})(\beta_{i+2} + \lambda\eta_{i+1})}{2\alpha_i} \\
\tilde{J}_{i-2,i+2} &= \frac{\beta_{i-1}(\alpha_{i+1} - \beta_{i+1})}{2\alpha_i} = \frac{\beta_{i-1}(\beta_{i+2} + \lambda\eta_{i+1})}{2\alpha_i} \\
\tilde{J}_{i-1,i+3} &= \frac{(\alpha_{i-1} - \beta_i)\beta_{i+2}}{2\alpha_i} = \frac{(\beta_{i-1} + \lambda\eta_{i-1})\beta_{i+2}}{2\alpha_i} \\
\tilde{J}_{i-2,i+3} &= \frac{\beta_{i-1}\beta_{i+2}}{2\alpha_i}
\end{aligned} \tag{5.50}$$

Ainsi, pour  $\lambda = 0$ , on se retrouve avec quatre couplages dégénérés, implicitement remniscents de la dégénérescence des deux états de MG, ce qui rend la suite de la procédure

5. En effet, la forme asymptotique de la fonction d'Airy est donnée par

$$\text{Ai}(x) \underset{+\infty}{\sim} \frac{e^{-\frac{2}{3}x^{3/2}}}{2\sqrt{\pi}x^{1/4}}. \tag{5.49}$$

instable numériquement. Un petit  $\lambda \neq 0$  est suffisant pour lever la dégénérescence et faire converger le RSRG.

On a vérifié que pour tout  $\lambda \neq 0$ , la phase de spinons localisés que l'on a mise en évidence à faible désordre est continument connectée à la phase *large-spin* du RSRG. Comme le montre la figure 5.9, l'application numérique du RSRG engendre la formation de spins effectifs dont la taille moyenne  $\bar{S}$  et la densité  $n$  suivent une loi de puissance avec l'échelle d'énergie  $\Omega$  :

$$n \sim \Omega^{1/z} \quad \text{et} \quad \bar{S} \sim \Omega^{-1/2z} . \quad (5.51)$$

Les valeurs de l'exposant  $1/z$  obtenues pour différentes valeurs de  $\lambda$  et  $\Delta/\beta$  sont présentées dans le tableau suivant.

	$\lambda = 0.1$	$\lambda = 0.5$	$\lambda = 1$
$\Delta = \beta$	0.059	0.080	0.084
$\Delta = 1.5\beta$	0.107	0.110	0.109
$\Delta = 2\beta$	0.157	0.157	0.156

Ces résultats sommaires montrent que dans le régime  $\Delta > \beta$  où la chaîne initiale contient des couplages ferromagnétiques, l'exposant dynamique  $z$  ne semble plus dépendre de  $\lambda$ . On peut donc supposer que la phase désordonnée à  $\Delta > \beta$  de la ligne  $\lambda = 0$  est connectée à la phase *large-spin* à  $\lambda \neq 0$ . Enfin, il serait instructif de vérifier sur une réalisation du désordre donnée que le RSRG construit bien les domaines d'Imry-Ma observés en DMRG (tels que ceux de la figure 5.6).

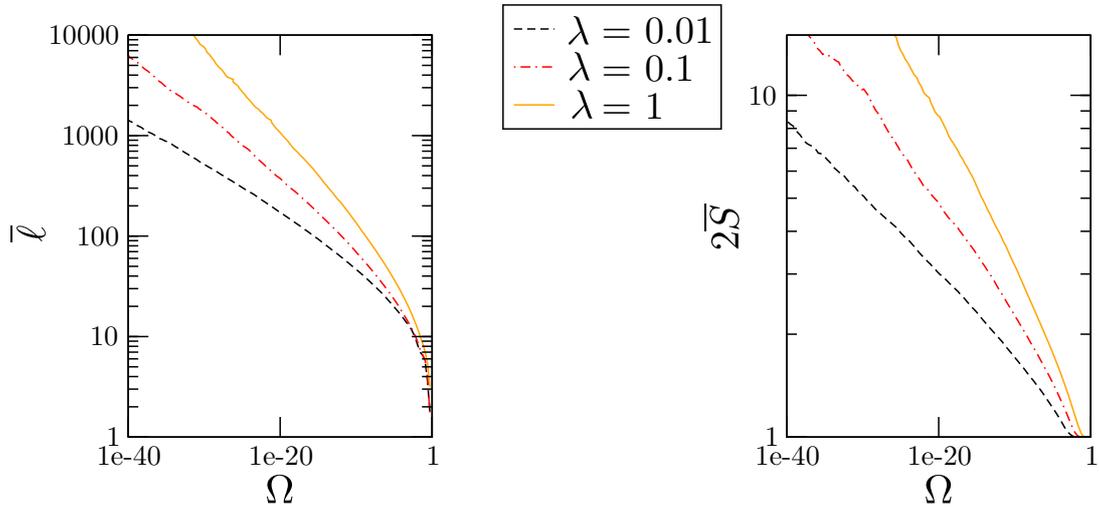


FIGURE 5.9 – Scaling de la distance moyenne entre spins effectifs  $\bar{\ell} = 1/n$  et du spin effectif moyen  $\bar{S}$  avec l'échelle d'énergie  $\Omega$  pour une chaîne initiale de  $10^6$  spins avec un désordre  $\Delta = \beta$ .



# Conclusion

Les expériences sur le composé  $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$  [44, 58, 42, 68] ont soulevé la question des effets de la frustration engendrée par des couplages aux seconds voisins le long des montants dans les échelles de spin  $1/2$ . Les effets de ces couplages sur une chaîne simple étaient déjà bien connus, à savoir l'existence d'une phase dimérisée et l'apparition de l'incommensurabilité dans les fonctions de corrélation. Cependant, l'application de la méthode variationnelle initialement proposée par Shastry et Sutherland [76] nous a permis de préciser ces résultats en calculant analytiquement la relation de dispersion autour du point Majumdar-Ghosh. Pour une chaîne impaire, on a ainsi mis en évidence l'apparition de l'incommensurabilité dans la relation de dispersion d'un spinon. Pour une chaîne paire, on a étudié la dispersion de l'état lié en dérivant précisément la condition de contact des deux spinons dans le secteur triplet.

Le modèle de l'échelle frustrée exhibe une transition de phase quantique entre deux phases gappées. On a montré que cette transition appartient à la classe d'universalité d'Ising en étudiant les lois d'échelle du paramètre d'ordre et de l'entropie d'intrication. Cette transition sépare une phase dimérisée de la phase RVB typique des échelles. Les excitations élémentaires de la phase dimérisée correspondent aux excitations à deux spinons d'une seule chaîne, mais la présence de la deuxième chaîne agit comme un terme de dimérisation explicite qui génère un potentiel attractif entre les spinons. La conséquence est la formation d'états liés dont on a calculé la relation de dispersion dans les secteurs singulet et triplet. Les excitations élémentaires de la phase RVB sont des triplets qui sautent de barreau en barreau et peuvent être décrites par une approximation de champ moyen.

Outre l'existence de la phase dimérisée, la principale signature de la frustration est l'apparition dans les deux phases d'un régime où les fonctions de corrélation oscillent à un vecteur d'onde incommensurable. Le changement de régime peut être étudié en détail dans la phase RVB à l'aide de l'approximation de champ moyen. L'étude des singularités du facteur de structure dans le plan complexe du vecteur d'onde  $k$  montre que le changement de régime s'interprète comme une fusion de points de branchement en un pôle sur l'axe  $\text{Re}[k] = \pi$ . L'apparition de l'incommensurabilité dans l'espace réel correspond à la re-séparation du pôle en deux points de branchement avec  $\text{Re}[k] \neq \pi$ . Le comportement de la longueur de corrélation  $\xi_{\text{spin}} = \text{Im}[k]^{-1}$  est également singulier au changement de régime. Comme  $\xi_{\text{spin}}$  reste finie, l'incommensurabilité n'apparaît pas tout à fait au changement de régime dans le facteur de structure et la relation de dispersion.

Ce changement de régime est également mis en évidence par l'introduction d'impuretés non-magnétiques. Les oscillations incommensurables apparaissent dans le profil d'aimantation induit par une impureté et dans les interactions effectives entre impuretés. Le modèle effectif de basse énergie qui résulte de ces interactions fait apparaître une loi

de Curie modifiée à basse température avec un exposant non-universel  $2z\xi_{\text{spin}}$ , où  $z$  est la concentration en impuretés. Cet exposant ne semble pas rejoindre le régime universel observé dans la chaîne F-AF pour des distributions peu singulières. Si cette modification de la constante de Curie paraît difficile à observer expérimentalement, la courbe d'aimantation des impuretés montre une déviation importante par rapport à la fonction de Brillouin, qui semble être observée dans les expériences sur  $\text{BiCu}_2\text{PO}_6$ . L'étude de l'interaction effective montre que le gap s'ouvre un peu avant que la saturation des impuretés ne soit atteinte. L'effet de l'incommensurabilité sur la constante de Curie et la courbe de Brillouin modifiée semble faible mais reste encore à préciser. S'il est acquis que la renormalisation dans l'espace réel conduit à la même phase dans les deux régimes [4], la dépendance des exposants avec l'incommensurabilité n'a pas été étudiée en détail.

L'idée originale de l'étude du désordre dans la chaîne de Majumdar-Ghosh était de se ramener à un hamiltonien d'Anderson à une particule avec la méthode variationnelle pour mettre en évidence la localisation des spinons. Le problème s'est en fait révélé plus complexe, car le hamiltonien effectif à un spinon se sépare en deux termes : un terme type Anderson qui donne bien lieu à la localisation, mais aussi un terme de confinement aléatoire qui stabilise plusieurs spinons dans le fondamental. Cette étude donne une image de la phase à faible désordre particulièrement attrayante à la lumière de la renormalisation dans l'espace réel qui décrit bien le régime de fort désordre. Même si le choix de distributions uniformes n'est pas très pertinent expérimentalement, ce travail montre une approche différente des techniques habituelles et ouvre ainsi de nouvelles perspectives dans l'étude des systèmes de spins désordonnés.

# Annexe A

## Méthodes numériques

Il existe essentiellement trois types de méthodes numériques pour étudier le magnétisme quantique :

- les algorithmes de diagonalisation exacte, qui permettent de déterminer exactement les états de basse énergie mais se limitent aux petits systèmes,
- le groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG) qui n'est efficace que pour les systèmes unidimensionnels avec des conditions aux limites ouvertes,
- les méthodes de Monte-Carlo quantique qui permettent de calculer des observables à température finie, mais ne s'appliquent pas aux systèmes frustrés.

Seules les deux premières méthodes ont été utilisées dans cette thèse.

### A.1 Utilisation des symétries

L'étude des systèmes quantiques en général consiste essentiellement à diagonaliser le hamiltonien  $\hat{\mathcal{H}}$ . Ce problème, a priori simple à résoudre numériquement, est la principale difficulté de la physique à  $N$  corps, car la taille de l'espace de Hilbert croît exponentiellement avec le nombre de particules. Pour  $N$  spins  $1/2$  localisés, une base de l'espace de Hilbert est la famille des états  $|S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z\rangle$ , où  $\forall i, S_i^z = \pm\frac{1}{2}$  et la dimension est  $2^N$ . Cependant, le hamiltonien possède un certain nombre de symétries<sup>1</sup> et peut donc être diagonalisé par blocs, ce qui réduit considérablement la taille des matrices à diagonaliser.

Pour le hamiltonien d'Heisenberg, on utilise toujours la symétrie  $U(1)$  de rotation du spin autour de l'axe  $z$ . Le générateur des rotations d'axe  $z$  est la projection selon  $z$  de l'opérateur de spin total  $\hat{S}_{\text{tot}}^z$ . L'utilisation de cette symétrie est donc très simple, car les états  $|S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z\rangle$  sont déjà états propres de  $\hat{S}_{\text{tot}}^z$ .

En général, pour une symétrie quelconque, la construction d'une base d'états symétrisés n'est pas aussi simple. Prenons l'exemple de la symétrie discrète de translation dans la direction  $x$ , pour un système de longueur  $L$  avec des conditions aux limites périodiques selon  $x$ . Ce groupe est constitué des opérateurs  $\hat{T}_x$  (où  $x \in \mathbb{N}$ ) qui translatent un état de  $x$  sites. Ce groupe est généré par l'opérateur d'impulsion selon  $x$ ,  $\hat{p}$  : les opérateurs de translation s'écrivent  $\hat{T}_x = e^{i\hat{p}x}$ . Comme  $\hat{T}_L = e^{i\hat{p}L} = \hat{\mathbb{1}}$ , les valeurs propres de  $\hat{p}$  s'écrivent  $k = \frac{2\pi}{L}n$ , où  $n = 0, 1, \dots, L-1$ . On cherche à diagonaliser  $\hat{\mathcal{H}}$  dans le

---

1. Par symétrie, on entend ici un groupe (au sens mathématique) d'opérateurs qui laissent invariants le modèle, c'est-à-dire qui commutent avec le hamiltonien.

sous-espace propre associé à  $k$ . Pour cela, il faut construire une base de ce sous-espace et exprimer les éléments de  $\hat{\mathcal{H}}$  dans cette base. Soit  $|\psi\rangle$  un état quelconque, par exemple un état  $|S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z\rangle$ . On peut symétriser  $|\psi\rangle$  en appliquant l'opérateur de symétrisation

$$\hat{S}_k = \sum_{x=0}^{L-1} e^{ikx} \hat{T}_x . \quad (\text{A.1})$$

On obtient alors un état propre de  $\hat{p}$  à partir de  $|\psi\rangle$

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_k(\psi)}} \hat{S}_k |\psi\rangle , \quad (\text{A.2})$$

où

$$\mathcal{N}_k(\psi) = \langle \psi | \hat{S}_k^\dagger \hat{S}_k | \psi \rangle . \quad (\text{A.3})$$

On peut vérifier que  $|\psi_k\rangle$  est bien état propre de  $\hat{p}$  avec la valeur propre  $k$ . Comme les états  $|S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z\rangle$  se déduisent les uns des autres par application des opérateurs de translation, des  $|\psi\rangle$  différents peuvent donner le même  $|\psi_k\rangle$ . Le facteur  $\mathcal{N}_k(\psi)$  dépend de cette dégénérescence. En pratique, chaque état symétrisé  $|\psi_k\rangle$  est représenté par l'un de ses générateurs  $|\psi\rangle$ , appelé représentant. Les éléments de matrice de  $\hat{\mathcal{H}}$  dans le secteur  $k$  se déduisent des éléments de matrice dans la base des représentants :

$$\langle \psi'_k | \hat{\mathcal{H}} | \psi_k \rangle = \sqrt{\frac{\mathcal{N}_k(\psi)}{\mathcal{N}_k(\psi')}} \langle \psi' | \hat{\mathcal{H}} | \psi \rangle . \quad (\text{A.4})$$

Cette procédure de symétrisation de l'espace de Hilbert se généralise aux autres symétries. Les symétries utiles pour les modèles étudiés dans cette thèse sont résumées dans le tableau suivant.

symétrie	nombre quantique associé
rotation de spin d'axe $z$	$S_{\text{tot}}^z = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2}$
inversion de spin (dans le secteur $S_{\text{tot}}^z = 0$ )	parité du spin : $\pm 1$
translation selon $x$	$k_x = \frac{2\pi}{L} n$ , où $n = 0, 1, \dots, L-1$
translation selon $y$ (dans les échelles)	$k_y = 0, \pi$
réflexion par rapport au centre du réseau	$r = \pm 1$

## A.2 Algorithme de Lanczos

Il peut être utile de diagonaliser complètement le hamiltonien  $\mathcal{H}$ , si l'on souhaite calculer des grandeurs thermodynamiques notamment. En général, on s'intéresse plutôt aux excitations de basse énergie et la connaissance du fondamental et des premiers états excités est suffisante. L'algorithme de Lanczos est une méthode variationnelle qui permet de calculer rapidement les états de basse énergie : elle consiste à construire un sous-espace de l'espace de Hilbert et à diagonaliser la restriction du hamiltonien à ce sous-espace. On part d'un état  $|0\rangle$  aléatoire et on lui applique  $\mathcal{H}$ . On peut alors construire un état normalisé orthogonal à  $|0\rangle$

$$|1\rangle = \frac{1}{b_1} (\mathcal{H}|0\rangle - a_0|0\rangle) , \quad (\text{A.5})$$

en prenant

$$a_0 = \langle 0|\mathcal{H}|0\rangle \quad \text{et} \quad b_1 = \|\mathcal{H}|0\rangle - a_0|0\rangle\| . \quad (\text{A.6})$$

On construit ensuite un nouvel état

$$|2\rangle = \frac{1}{b_2} (\mathcal{H}|1\rangle - b_1|0\rangle - a_1|1\rangle) , \quad (\text{A.7})$$

où

$$a_1 = \langle 1|\mathcal{H}|1\rangle \quad \text{et} \quad b_2 = \|\mathcal{H}|1\rangle - b_1|0\rangle - a_1|1\rangle\| , \quad (\text{A.8})$$

de sorte que  $|2\rangle$  soit normalisé et orthogonal à  $|0\rangle$  et  $|1\rangle$ . En itérant cette construction, on construit une famille d'états orthonormale. À chaque étape, l'état  $|n+1\rangle$  est obtenu à partir des états  $|n\rangle$  et  $|n-1\rangle$  en appliquant la formule de récurrence

$$|n+1\rangle = \frac{1}{b_{n+1}} (\mathcal{H}|n\rangle - b_n|n-1\rangle - a_n|n\rangle) , \quad (\text{A.9})$$

où

$$a_n = \langle n|\mathcal{H}|n\rangle \quad \text{et} \quad b_{n+1} = \|\mathcal{H}|n\rangle - b_n|n-1\rangle - a_n|n\rangle\| , \quad (\text{A.10})$$

D'après l'équation (A.9), la restriction  $\mathcal{H}_n$  du hamiltonien au sous-espace engendré par les états  $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n\rangle$  prend une forme tridiagonale dans cette base

$$[\mathcal{H}_n] = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & & & \\ b_1 & a_1 & b_2 & \ddots & & \\ 0 & b_2 & \ddots & \ddots & 0 & \\ & \ddots & \ddots & a_{n-1} & b_n & \\ & & 0 & b_n & a_n & \end{pmatrix} . \quad (\text{A.11})$$

À chaque étape, on diagonalise la matrice  $[\mathcal{H}_n]$ , les premiers états propres variationnels convergent exponentiellement vers les états propre de basse énergie de  $\mathcal{H}$ .

## A.3 Groupe de renormalisation de la matrice densité

### A.3.1 Algorithme

Le groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG) est une méthode variationnelle, basée sur la renormalisation dans l'espace réel. À chaque étape, on fait croître le réseau, mais l'espace de Hilbert est tronqué afin de garder le même nombre de degrés de liberté.

**Croissance élémentaire du réseau** On suppose qu'à une certaine étape de l'algorithme, on a obtenu un système unidimensionnel, avec des conditions aux limites ouvertes. Ce système se décompose en deux blocs, PS à gauche et UMP à droite, et chaque bloc est décrit par une base de  $N_{\text{PS}}$  (respectivement  $N_{\text{UMP}}$ ) états  $|n_{\text{PS}}\rangle$  (respectivement  $|n_{\text{UMP}}\rangle$ ) déterminés à l'étape précédente. L'espace de Hilbert du système total est engendré par les états  $|n_{\text{PS}}\rangle \otimes |n_{\text{UMP}}\rangle$ . On fait alors croître le système en ajoutant un site à chaque bloc,

dans le *bulk* du système. Le site  $\bullet$  ajouté au bloc PS (respectivement UMP) possédant  $m$  degrés de liberté  $|\sigma\rangle$ ,<sup>2</sup> le bloc PS $\bullet$  (respectivement  $\bullet$ UMP) est décrit par la base des  $mN_{\text{PS}}$  (respectivement  $mN_{\text{UMP}}$ ) états  $|n_{\text{PS}}\rangle \otimes |\sigma_{\text{PS}}\rangle$  (respectivement  $|\sigma_{\text{UMP}}\rangle \otimes |n_{\text{UMP}}\rangle$ ). Le principe de la renormalisation est de tronquer cette base de PS $\bullet$ , c'est-à-dire de ne garder que  $N_{\text{PS}}$  états pour décrire ce nouveau bloc.

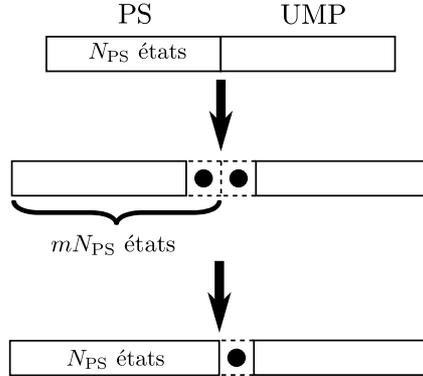


FIGURE A.1 – Etape élémentaire du DMRG : croissance du réseau puis troncation de l'espace de Hilbert.

**Troncation de l'espace de Hilbert** Pour décrire le bloc PS $\bullet$ , on choisit de ne garder que les  $N_{\text{PS}}$  états qui ont le plus de poids dans la matrice densité réduite de ce bloc  $\rho_{\text{PS}\bullet}$ . La matrice densité réduite du bloc PS $\bullet$  est définie comme la trace partielle sur les états du bloc  $\bullet$ UMP de la matrice densité  $\rho$  du système total PS $\bullet\bullet$ UMP :

$$\rho_{\text{PS}\bullet} = \text{Tr}_{\bullet\text{UMP}} [\rho] . \quad (\text{A.12})$$

où  $\rho = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$  avec  $|\psi_0\rangle$  est le fondamental (variationnel) du système PS $\bullet\bullet$ UMP.<sup>3</sup> À chaque étape, il faut donc déterminer le fondamental  $|\psi_0\rangle$  (à l'aide de l'algorithme de Lanczos par exemple) et les  $N_{\text{PS}}$  plus grandes valeurs propres  $\lambda_i$  de la matrice densité réduite  $\rho_{\text{PS}\bullet}$  ainsi que les vecteurs propres correspondants.

On peut montrer que ce choix minimise la distance de  $|\psi_0\rangle$  à sa projection sur l'espace tronqué. L'erreur commise à chaque étape est mesurée par le poids rejeté

$$\varepsilon = 1 - \sum_{i=1}^{N_{\text{PS}}} \lambda_i . \quad (\text{A.14})$$

**Warm-up** En partant de deux sites  $\bullet\bullet$ , on itère cette procédure, jusqu'à atteindre un système de taille souhaitée (c'est la phase dite de *warm-up*). À chaque étape, on renormalise également les états du bloc  $\bullet$ UMP : on utilise la symétrie de réflexion par rapport

2. Pour des spins 1/2, on a simplement  $m = 2$  et  $|\sigma\rangle = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ .

3. Si l'on souhaite déterminer les premiers états  $|\psi_i\rangle$  avec les poids  $p_i$ , on considère la matrice densité d'un état mélange

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| . \quad (\text{A.13})$$

au centre du système, pour déduire les états de  $\bullet$ UMP des états de PS $\bullet$ . Le fondamental variationnel que l'on construit ainsi est encore assez loin du véritable fondamental. En effet, les états que l'on a gardés pour décrire les systèmes de petite taille ne sont pas forcément adaptés à la description d'un grand système.



FIGURE A.2 – Figure extraite de [71] : (a) Warm-up. (b) Sweep.

**Sweeps** Pour améliorer cette description, la phase de *warm-up* est suivie d'une phase de *sweeps*, durant laquelle on balaye le système en ajoutant un site au bloc PS et en retirant un site au bloc UMP, puis inversement. On optimise ainsi le choix des états pour chaque taille de bloc. En pratique, on réalise plusieurs *sweeps* en augmentant petit à petit le nombre d'états conservés. Les calculs DMRG de cette thèse ont été faits en gardant de 400 à 1000 états selon le système à décrire.

### A.3.2 Entropie d'intrication

L'entropie d'intrication du bloc de gauche PS avec le bloc de droite UMP est définie par

$$S_{\text{PS}} = -\text{Tr}_{\text{PS}} [\rho_{\text{PS}} \ln (\rho_{\text{PS}})] . \quad (\text{A.15})$$

Si le fondamental est un état séparable  $|\psi_0\rangle = |\psi_0^{(\text{PS})}\rangle \otimes |\psi_0^{(\text{UMP})}\rangle$ , alors  $\rho_{\text{PS}}$  n'a qu'une valeur propre non-nulle, égale à 1, et l'entropie d'intrication est nulle. De manière générale,  $S_{\text{PS}}$  mesure le degré d'intrication du bloc PS avec le bloc de droite UMP. Le critère de troncation des états du DMRG revient en fait à maximiser cette entropie d'intrication. L'entropie d'intrication augmente avec la taille du plus petit bloc, et donc avec la taille  $L$  du système si on coupe le système au milieu. Pour un système avec des corrélations à courte portée, elle tend vers une constante, mais pour un système critique avec des corrélations en loi de puissance, elle diverge en  $\ln L$ .



# Annexe B

## Bases d'états à liens de valence

On précise ici certains résultats qui permettent de mieux comprendre l'approche variationnelle des excitations élémentaires dans la chaîne de MG décrite dans le chapitre 2. On cherche à construire une base des différents secteurs de spins  $\{S_{\text{tot}}, S_{\text{tot}}^z\}$  pour un ensemble de  $N$  spins  $1/2$ .  $S_{\text{tot}}$  peut prendre les valeurs positives  $\frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2} - 2, \dots$  et  $S_{\text{tot}}^z$  les valeurs  $S_{\text{tot}}, S_{\text{tot}} - 1, \dots, -S_{\text{tot}}$ . Une base du secteur  $\{S_{\text{tot}}^z = M\}$  est obtenue en gardant les états avec  $\frac{N}{2} + M$  spins  $\uparrow$  et  $\frac{N}{2} - M$  spins  $\downarrow$ , d'où la dimension de ce secteur

$$\dim\{S_{\text{tot}}^z = M\} = \binom{N}{\frac{N}{2} + M}. \quad (\text{B.1})$$

La construction d'une base d'un secteur à  $S_{\text{tot}}$  fixé est plus délicate. Cependant, un secteur  $\{S_{\text{tot}}\}$  a la même contribution dans tous les secteurs  $\{S_{\text{tot}}^z = M\}$  avec  $-S_{\text{tot}} \leq M \leq S_{\text{tot}}$ . On en déduit la dimension des secteurs à  $S_{\text{tot}}$  et  $S_{\text{tot}}^z$  fixés :

$$\dim\{S_{\text{tot}} = S, S_{\text{tot}}^z = M\} = \dim\{S_{\text{tot}}^z = S\} - \dim\{S_{\text{tot}}^z = S + 1\}, \quad (\text{B.2})$$

indépendante de  $M$ .

### Secteur $S_{\text{tot}} = 0$

Un résultat bien connu est qu'une base de  $\{S_{\text{tot}} = 0\}$  est obtenue en ordonnant les  $N$  spins sur une chaîne ouverte et en considérant la famille  $\mathcal{B}_0$  des pavages de singulets au dessus de la chaîne, qui ne se croisent pas [74]. Ce résultat se démontre en deux étapes : on peut montrer que  $\mathcal{B}_0$  est génératrice d'une part, et qu'elle a la bonne dimension d'autre part.

Une famille génératrice de  $\{S_{\text{tot}} = 0\}$  est obtenue en prenant tous les pavages de singulets. Pour montrer que  $\mathcal{B}_0$  est génératrice, il suffit de montrer que tout pavage de singulets peut se décomposer sur  $\mathcal{B}_0$ . Considérons donc un état formé par pavage de singulets quelconque. Pour l'un des croisements de singulets, on peut décomposer cet état en utilisant la relation

$$|\dots \curvearrowright \dots\rangle = |\dots \dots \dots\rangle + |\dots \curvearrowleft \dots\rangle. \quad (\text{B.3})$$

On a ainsi décomposé l'état sur deux états avec un croisement de moins. En itérant cette décomposition, on peut décroiser tous les singulets et donc obtenir une décomposition sur  $\mathcal{B}_0$ .

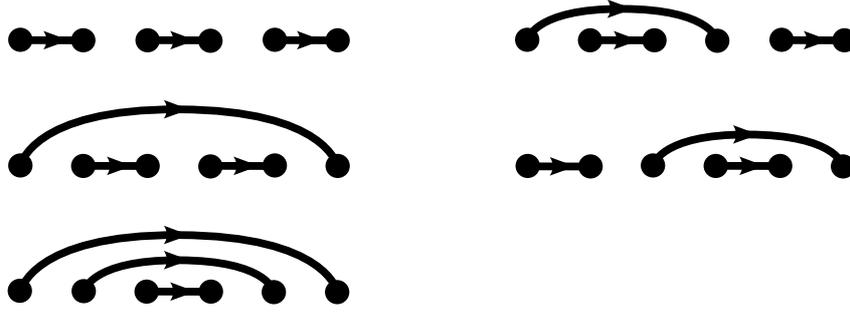


FIGURE B.1 – Base du secteur  $\{S_{\text{tot}} = 0\}$  pour six spins.

Par ailleurs, le nombre de pavages sans croisement pour  $N$  spins peut être vu comme le nombre d'expressions correctes que l'on peut former à l'aide de  $N/2$  paires de parenthèses  $()$ . Ce nombre est un nombre de Catalan

$$C_{\frac{N}{2}} = \frac{1}{\frac{N}{2} + 1} \binom{N}{\frac{N}{2}} = \binom{N}{\frac{N}{2}} - \binom{N}{\frac{N}{2} + 1}, \quad (\text{B.4})$$

qui d'après (B.2) est bien la dimension de  $\{S_{\text{tot}} = 0\}$ .

On a ainsi montré que la famille  $\mathcal{B}_0$  des pavages de singulets qui ne se croisent pas, est une base du secteur singulet  $\{S_{\text{tot}} = 0\}$ . On a considéré une chaîne ouverte, mais on peut également fermer la chaîne et considérer les pavages de singulets à l'intérieur de la chaîne.

### Secteur $S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}$

En utilisant le résultat précédent, on va construire une base des secteurs  $\{S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}, S_{\text{tot}}^z = \pm \frac{1}{2}\}$ . On place les spins sur une chaîne ouverte de longueur  $N$  impaire. Pour construire une famille génératrice de  $\{S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}, S_{\text{tot}}^z = \frac{1}{2}\}$ , on peut choisir un spin  $\uparrow$  (qu'on appelle spinon) et mettre les  $N - 1$  spins restants dans un état  $S_{\text{tot}} = 0$ . Comme on connaît une base de  $\{S_{\text{tot}} = 0\}$ , on construit ainsi une famille génératrice de  $\{S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}, S_{\text{tot}}^z = \frac{1}{2}\}$  de cardinal

$$NC_{\frac{N-1}{2}} = \frac{N+3}{4} \dim\{S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}, S_{\text{tot}}^z = \frac{1}{2}\}. \quad (\text{B.5})$$

Cette famille est donc sur-complète. Une base de  $\{S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}, S_{\text{tot}}^z = \frac{1}{2}\}$  est obtenue en ne gardant que les états où aucun singulet ne passe au dessus du spinon. Remarquons que le spinon est alors restreint à un sous-réseau car il doit y avoir un nombre pair de sites de part et d'autre du spinon. De plus, la coupure dans la chaîne a maintenant son importance car il faut pouvoir définir la gauche et la droite du spinon. On note  $\mathcal{B}_1$  la famille des états à un spinon et un pavage de singulets qui ne se croisent pas et qui ne passent pas au-dessus du spinon.

Montrons que la famille  $\mathcal{B}_1$  est génératrice. Soit un état avec un spin  $\uparrow$  sur un site quelconque et les autres spins dans un état singulet, qu'on peut supposer être dans  $\mathcal{B}_0$ . Considérons le premier singulet au-dessus du spinon. On peut décomposer cet état de la manière suivante :

$$|\dots \uparrow \downarrow \dots\rangle = |\dots \uparrow \dots \downarrow \dots\rangle + |\dots \downarrow \dots \uparrow \dots\rangle. \quad (\text{B.6})$$

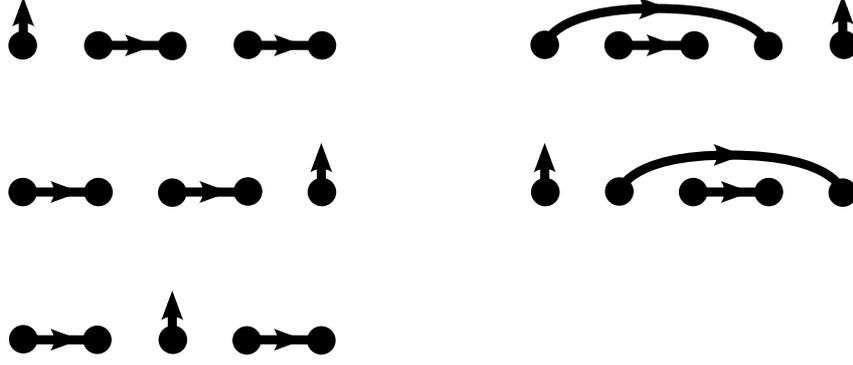


FIGURE B.2 – Base du secteur  $\{S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}, S_{\text{tot}}^z = \frac{1}{2}\}$ , pour cinq spins.

En itérant cette décomposition, on peut décomposer n'importe quel état de  $\{S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}, S_{\text{tot}}^z = \frac{1}{2}\}$  sur la famille  $\mathcal{B}_1$ .

Calculons maintenant le cardinal de  $\mathcal{B}_1$  :

$$\text{card } \mathcal{B}_1 = \sum_{p=0}^n C_p C_{n-p}, \quad (\text{B.7})$$

où  $n = \frac{N-1}{2}$  et  $C_n$  est le nombre de Catalan défini par la formule (B.4). Or les nombres de Catalan vérifient la relation de récurrence :

$$\sum_{p=0}^n C_p C_{n-p} = C_{n+1}. \quad (\text{B.8})$$

On en déduit

$$\text{card } \mathcal{B}_1 = \dim\{S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}, S_{\text{tot}}^z = \frac{1}{2}\}. \quad (\text{B.9})$$

Ainsi, la famille  $\mathcal{B}_1$  est bien une base du secteur  $\{S_{\text{tot}} = \frac{1}{2}, S_{\text{tot}}^z = \frac{1}{2}\}$ .

## Secteur $S_{\text{tot}}$ quelconque

Par récurrence, on peut construire une base, non-orthogonale, de chaque secteur  $\{S_{\text{tot}} = S, S_{\text{tot}}^z = S\}$ . Il suffit de considérer  $2S$  spinons  $\uparrow$  et de mettre les autres spins dans un produit de singulets qui ne se croisent pas et qui ne passent pas au-dessus d'un spinon.<sup>1</sup> On peut généraliser le résultat à  $\{S_{\text{tot}} = S, S_{\text{tot}}^z = M\}$  : il faut alors mettre les  $2S$  spinons dans l'état à  $2S$  spins de spin total  $S_{\text{tot}} = S$  et de projection  $S_{\text{tot}}^z = M$ .

1. Le spinon le plus à gauche est alors restreint au sous-réseau  $A$ , le suivant au sous-réseau  $B$ , le troisième au sous-réseau  $A$ , etc.

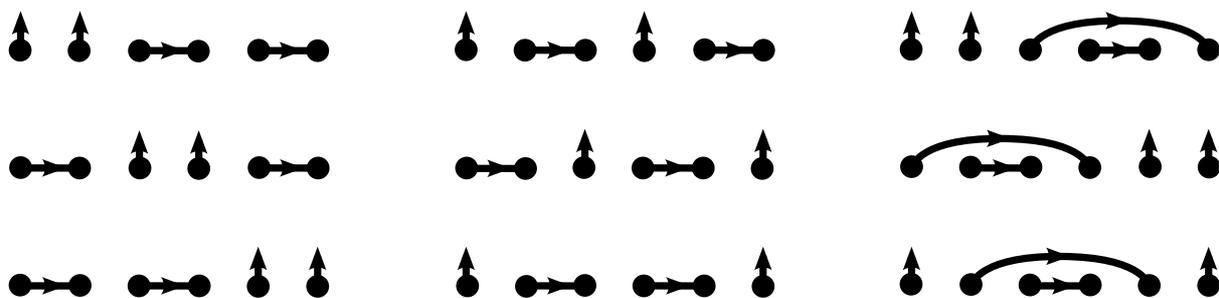


FIGURE B.3 – Base du secteur  $\{S_{\text{tot}} = 1, S_{\text{tot}}^z = 1\}$  pour six spins.

# Annexe C

## Renormalisation dans l'espace réel à fort désordre

Dans un système fortement désordonné, les hétérogénéités spatiales génèrent des fluctuations dans les énergies des différents degrés de liberté. La méthode introduite par Ma-Dasgupta-Hu [53] pour décrire les chaînes de spins désordonnées consiste à renormaliser le système en considérant les degrés de liberté avec le plus grand gap comme gelés dans leur état fondamental. Autrement dit, on suppose que les fluctuations thermiques et quantiques sont négligeables par rapport aux fluctuations du désordre. On peut distinguer trois cas selon l'évolution de l'amplitude relative du désordre au fur et à mesure que l'on abaisse l'échelle d'énergie :

- si cette amplitude diverge, on parle de point fixe de désordre infini ;
- si elle tend vers une constante, on parle de point fixe de désordre fini ;
- si elle tend vers zéro, on parle de point fixe pur.

Pour une revue générale des applications de cette méthode, on pourra se référer à [38]. On détaille ici son application aux systèmes de spins unidimensionnels.

### C.1 Règles de décimation

On considère un système de spins quelconques avec des couplages de Heisenberg aléatoires. Comment en pratique décime-t-on le degré de liberté de plus grand gap ? Isolons un lien qui couple deux spins  $\mathbf{S}_1$  et  $\mathbf{S}_2$  avec un constante de couplage  $J_{12}$ . Le gap sur ce lien isolé  $\Delta_{12}$  entre le fondamental et le premier état excité est donné par

$$\Delta_{12} = \begin{cases} -J_{12}(S_1 + S_2) & \text{si } J_{12} < 0 , \\ J_{12} (|S_1 - S_2| + 1) & \text{si } J_{12} > 0 . \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

On choisit de décimer le lien qui possède le plus grand gap  $\Omega$ , en gelant ce lien dans son secteur de spin  $S$  de plus basse énergie. On a

$$S = \begin{cases} S_1 + S_2 & \text{si } J_{12} < 0 , \\ |S_1 - S_2| & \text{si } J_{12} > 0 . \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

Le système est alors renormalisé selon les règles suivantes.

1. Si  $S \neq 0$ , le lien est remplacé par un spin effectif  $\tilde{\mathbf{S}}$ . Prenons un spin  $\mathbf{S}_i$  qui était lié à  $\mathbf{S}_1$  ou  $\mathbf{S}_2$ . L'ancien hamiltonien entre ces trois spins

$$\mathcal{H} = J_{12}\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + J_{i1}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_1 + J_{i2}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_2 \quad (\text{C.3})$$

est remplacé par le hamiltonien effectif

$$\tilde{\mathcal{H}} = \tilde{J}_i \mathbf{S}_i \cdot \tilde{\mathbf{S}}, \quad (\text{C.4})$$

en prenant le développement au premier ordre en  $\Delta_{i1}, \Delta_{i2}/\Omega$  de la théorie des perturbations sur le sous-espace  $S$  de  $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$ . On obtient alors<sup>1</sup>

$$\tilde{J}_i = \frac{S(S+1) + S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)}{2S(S+1)} J_{i1} + \frac{S(S+1) + S_2(S_2+1) - S_1(S_1+1)}{2S(S+1)} J_{i2}. \quad (\text{C.5})$$

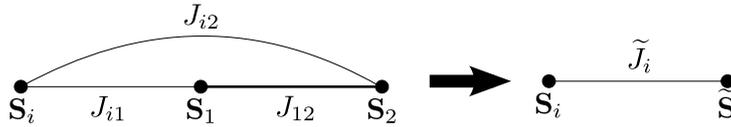


FIGURE C.1 – Règle 1 : formation d'un spin effectif.

2. Si  $S = 0$ , les deux spins sont décimés. Dans ce cas, il faut renormaliser les couplages entre tous les spins qui étaient liés à  $\mathbf{S}_1$  ou  $\mathbf{S}_2$ . Pour une paire  $\mathbf{S}_i, \mathbf{S}_j$ , l'ancien hamiltonien

$$\mathcal{H} = J_{12}\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + J_{i1}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_1 + J_{i2}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_2 + J_{1j}\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_j + J_{2j}\mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_j + J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (\text{C.6})$$

est remplacé par le hamiltonien effectif

$$\tilde{\mathcal{H}} = \tilde{J}_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (\text{C.7})$$

en prenant pour  $\tilde{J}_{ij}$  le développement au deuxième ordre de la théorie des perturbations, soit

$$\tilde{J}_{ij} = J_{ij} + \frac{2}{3} S_1(S_1+1) \frac{(J_{i1} - J_{i2})(J_{2j} - J_{1j})}{J_{12}}. \quad (\text{C.8})$$

A priori, la topologie du réseau n'est pas conservée au cours de la renormalisation, sauf dans le cas d'une chaîne avec uniquement des couplages aux premiers voisins. Cependant pour un système unidimensionnel avec des interactions initiales à courte portée, les couplages au-delà des premiers voisins disparaissent<sup>2</sup> au cours de la renormalisation.

1. Le calcul est détaillé dans la référence [86].

2. En pratique, on fixe un *cut-off* en énergie en dessous duquel les couplages sont pris égaux à zero.

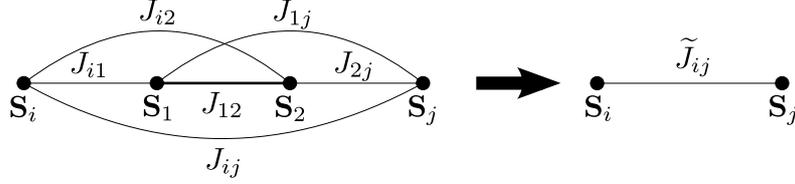


FIGURE C.2 – Règle 2 : décimation d'un singulet.

## C.2 Chaîne antiferromagnétique aléatoire

Le premier système auquel cette procédure de décimation a été appliquée est la chaîne antiferromagnétique avec uniquement des couplages aux premiers voisins, tous distribués selon une même loi<sup>3</sup> [53, 19, 26]. Dans ce cas, seule la règle 2 est utilisée : à chaque étape on décime les deux spins voisins  $\mathbf{S}_i$  et  $\mathbf{S}_{i+1}$  avec le plus fort couplage  $\Omega$  et on introduit un couplage entre les spins  $\mathbf{S}_{i-1}$  et  $\mathbf{S}_{i+2}$  selon l'équation (C.8) qui devient

$$\tilde{J}_{i-1,i+2} = \frac{J_{i-1,i}J_{i+1,i+2}}{2\Omega}. \quad (\text{C.9})$$

La distribution des gaps à l'échelle d'énergie  $\Omega$  est simplement la distribution des couplages  $p(J, \Omega)$ , qui vérifie alors l'équation

$$\frac{\partial p}{\partial \Omega}(J, \Omega) = -p(\Omega, \Omega) \iint p(J_1, \Omega) dJ_1 p(J_2, \Omega) dJ_2 \delta\left(J - \frac{J_1 J_2}{2\Omega}\right). \quad (\text{C.10})$$

Fisher a montré que cette équation possède un point fixe de désordre infini

$$p(J, \Omega) = \frac{\alpha(\Omega)}{\Omega} \left(\frac{\Omega}{J}\right)^{1-\alpha(\Omega)} \Theta(\Omega - J), \quad (\text{C.11})$$

où  $\alpha(\Omega) = -1/\ln \Omega$  et  $\Theta$  est la fonction de Heaviside. La phase correspondante est la phase dite de singlets aléatoires (*random-singlet phase*) : à température nulle, les spins sont couplés deux à deux dans un état singulet à des distances arbitrairement grandes. À basse énergie, le comportement de la densité de spins non-appariés  $n$  avec l'échelle d'énergie  $\Omega$  est donné par

$$\frac{dn}{d\Omega} = 2np(\Omega, \Omega), \quad (\text{C.12})$$

soit  $n \sim \alpha(\Omega)^2$ . Ces spins sont essentiellement libres et contribuent à la susceptibilité magnétique sous forme d'une loi de Curie

$$\chi(T) \sim \frac{n(T)}{T} \sim \frac{1}{T(\ln T)^2}, \quad (\text{C.13})$$

qui diverge à basse température.

---

3. Si la distribution est différente pour les liens pairs et impairs, il a été montré que le système appartient à une classe d'universalité différente correspondant à une phase de Griffiths [37]

### C.3 Chaîne ferromagnétique et antiferromagnétique aléatoire

Dans cette partie, on considère toujours une chaîne avec des couplages aléatoires aux premiers voisins, mais avec une certaine proportion de couplages ferromagnétiques. Ce modèle a été étudié par Westerberg et al. [85, 86]. Les couplages ferromagnétiques génèrent des spins supérieurs à  $1/2$ , par la règle 1. Les simulations numériques montrent que le spin moyen  $\bar{S}$  croît en loi de puissance au fur et à mesure que  $\Omega$  diminue. La fraction de liens ferromagnétiques tend vers une constante  $x \neq 0$  et les distributions des gaps  $p_F(\Delta, \Omega)$  et  $p_{AF}(\Delta, \Omega)$  sur les liens ferromagnétiques et antiferromagnétiques convergent vers des lois de puissance

$$\begin{aligned} p_F(\Delta, \Omega) &= \frac{\alpha_F}{\Omega} \left( \frac{\Omega}{\Delta} \right)^{1-\alpha_F} \Theta(\Omega - \Delta) , \\ p_{AF}(\Delta, \Omega) &= \frac{\alpha_{AF}}{\Omega} \left( \frac{\Omega}{\Delta} \right)^{1-\alpha_{AF}} \Theta(\Omega - \Delta) . \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

Il s'agit d'un point fixe de désordre fini. À basse énergie, le système est décrit par des amas qui se comportent comme des grands spins faiblement couplés ; cette phase est appelée *large-spin phase*. Comme on forme des spins de plus en plus grands, seule la règle 1 est utilisée asymptotiquement. La densité  $n$  de spins restant à l'énergie  $\Omega$  est alors donnée par

$$\frac{dn}{d\Omega} = n [xp_F(\Omega, \Omega) + (1-x)p_{AF}(\Omega, \Omega)] , \quad (\text{C.15})$$

soit  $n \sim \Omega^{1/z}$ , où  $z = [x\alpha_F + (1-x)\alpha_{AF}]^{-1}$  est appelé exposant dynamique. Cet exposant n'est pas universel : il dépend de la distribution initiale des gaps. Cependant, pour des distributions initiales moins singulières que  $1/\Delta^{0.7}$ , les simulations numériques prédisent un point fixe universel avec  $1/z \simeq 0.44$  [86]. Comme chaque étape consiste à additionner ou soustraire aléatoirement deux spins voisins, la taille des spins effectifs suit une marche aléatoire. Par conséquent, le spin carré moyen est  $\bar{S}^2 = 1/4n$  et le spin moyen se comporte comme

$$\bar{S} \sim \frac{1}{\sqrt{n}} \sim \Omega^{-\frac{1}{2z}} . \quad (\text{C.16})$$

Chaque spin effectif contribue à la susceptibilité magnétique selon une loi de Curie, d'où le comportement de la susceptibilité à basse température [27, 28] :

$$\chi(T) = \frac{n}{T} \frac{\overline{S(S+1)}}{3} = \frac{1}{T} \left( \frac{1}{12} + KT^{\frac{1}{2z}} \right) , \quad (\text{C.17})$$

où  $K$  est une constante.

# Bonus track

Si la physique est intéressante, les physiciens le sont encore plus. Aussi cette thèse ne serait pas complète<sup>4</sup> sans quelques remerciements. Tout d'abord, je remercie mon coach Gui Roux pour son encadrement exemplaire, mais aussi pour son amitié. Il a su me laisser la liberté dont j'avais besoin dans les moments fructueux, et me guider davantage dans les moments plus difficiles. Cette thèse doit également beaucoup à Nicolas Lafflorence, qui est à l'origine du projet sur les échelles et avec qui j'ai eu le plaisir de collaborer. Je suis très reconnaissant aux membres de mon jury d'avoir pris la peine d'étudier mes travaux. Merci notamment à Cécile Monthus et Matthieu Mambrini qui m'ont tous deux éclairé sur leurs sujets de prédilection respectifs, à savoir la renormalisation à fort désordre et les bases d'états à liens de valence. Je remercie tous les membres du LPTMS, en particulier le directeur Emmanuel Trizac, Claudine Le Vaou et Thierry Jolicoeur, qui a été mon directeur de thèse administratif pendant deux ans et huit mois. J'ai aussi beaucoup apprécié d'enseigner à l'université Paris-Sud, à tel point que j'ai décidé d'en faire mon métier. C'est pourquoi je tiens à remercier tous les gens qui m'ont confié des enseignements.

Mais surtout, je remercie tous les thésards (et assimilés...) que j'ai côtoyés, ici et ailleurs. Andrey, Antoine<sup>5</sup>, François, Matthieu, sémillant philosophe qui, hélas, nous a quittés trop tôt, Pierre-Elie, magnifique illustration de la phase *porc-épic* du diagramme de phase du cheveux [69], Simon, Soupe-au-lait, le meilleur<sup>6</sup> partenaire de tennis que j'ai eu pendant ces trois ans, Siiilvia, Yassar, et tous les autres. Merci de m'avoir fait autant rigoler. Si ces trois années ont été aussi enrichissantes, c'est largement grâce à vous. Ce manuscrit est pour vous, même si cette page est probablement la seule que vous lirez, et encore, si vous la trouvez.

Enfin, je remercie Cécile et Jeanne qui, jour après jour, donnent un sens à ma vie.

---

4. Je ne trompe personne, cette thèse est loin d'être complète avec ou sans remerciements...

5. Je crois qu'Antoine est bel et bien un thésard du LPTMS. Après tout, je l'ai plus vu au labo que Jason.

6. et pour ainsi dire le seul...



# Bibliographie

- [1] F. Abraham, M. Ketatni, G. Mairesse, and B. Mernari, ChemInform **25**, no (1994).
- [2] I. Affleck and E. H. Lieb, letters in mathematical physics **12**, 57 (1986).
- [3] L. K. Alexander *et al.*, Phys. Rev. B **81**, 054438 (2010).
- [4] E. C. Andrade and M. Vojta, EPL (Europhysics Letters) **97**, 37007 (2012).
- [5] A. Auerbach, *Interacting electrons and quantum magnetism* (Springer Verlag, 1994).
- [6] M. Azuma, Y. Fujishiro, M. Takano, M. Nohara, and H. Takagi, Phys. Rev. B **55**, R8658 (1997).
- [7] M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, and Y. Kitaoka, Phys. Rev. Lett. **73**, 3463 (1994).
- [8] T. Barnes, Phys. Rev. B **67**, 024412 (2003).
- [9] T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera, and E. S. Swanson, Phys. Rev. B **47**, 3196 (1993).
- [10] J. Bobroff *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**, 047201 (2009).
- [11] S. Brehmer, A. Kolezhuk, H. Mikeska, and U. Neugebauer, Journal of Physics : Condensed Matter **10**, 1103 (1998).
- [12] T. M. R. Byrnes, M. T. Murphy, and O. P. Sushkov, Phys. Rev. B **60**, 4057 (1999).
- [13] P. Calabrese and J. Cardy, Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment **2004**, P06002 (2004).
- [14] J. Cardy and P. Calabrese, Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment **2010**, P04023 (2010).
- [15] F. Casola *et al.*, preprint arXiv :1211.5522 (2012).
- [16] F. Casola *et al.*, Phys. Rev. Lett. **105**, 067203 (2010).
- [17] R. Chitra, S. Pati, H. R. Krishnamurthy, D. Sen, and S. Ramasesha, Phys. Rev. B **52**, 6581 (1995).
- [18] E. Dagotto, Reports on Progress in Physics **62**, 1525 (1999).
- [19] C. Dasgupta and S. Ma, Phys. Rev. B **22**, 1305 (1980).
- [20] A. Deschner and E. S. Sørensen, Phys. Rev. B **87**, 094415 (2013).
- [21] R. L. Doretto and M. Vojta, Phys. Rev. B **80**, 024411 (2009).
- [22] F. J. Dyson, Phys. Rev. **92**, 1331 (1953).
- [23] S. Eggert, I. Affleck, and M. Takahashi, Phys. Rev. Lett. **73**, 332 (1994).
- [24] V. J. Emery and C. Noguera, Phys. Rev. Lett. **60**, 631 (1988).

- [25] P. Fazekas, *Lecture notes on electron correlation and magnetism* Vol. 24 (World scientific Singapore, 1999).
- [26] D. S. Fisher, Phys. Rev. B **50**, 3799 (1994).
- [27] B. Frischmuth and M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. **79**, 147 (1997).
- [28] B. Frischmuth, M. Sigrist, B. Ammon, and M. Troyer, Phys. Rev. B **60**, 3388 (1999).
- [29] T. Giamarchi, *Quantum Physics in one Dimension* International series of monographs on physics Vol. 121 (Oxford University Press, Oxford, UK, 2004).
- [30] O. Golinelli, T. Jolicoeur, and E. Sørensen, The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems **11**, 199 (1999).
- [31] S. Gopalan, T. M. Rice, and M. Sigrist, Phys. Rev. B **49**, 8901 (1994).
- [32] M. Greven, R. J. Birgeneau, and U. J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **77**, 1865 (1996).
- [33] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. B **25**, 4925 (1982).
- [34] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **50**, 1153 (1983).
- [35] M. Hase, I. Terasaki, and K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **70**, 3651 (1993).
- [36] J. A. Hoyos and E. Miranda, Phys. Rev. B **69**, 214411 (2004).
- [37] R. A. Hyman, K. Yang, R. N. Bhatt, and S. M. Girvin, Phys. Rev. Lett. **76**, 839 (1996).
- [38] F. Iglói and C. Monthus, Physics Reports **412**, 277 (2005).
- [39] Y. Imry and S. Ma, Phys. Rev. Lett. **35**, 1399 (1975).
- [40] K. Ishida *et al.*, Journal of the Physical Society of Japan **63**, 3222 (1994).
- [41] D. C. Johnston *et al.*, Phys. Rev. B **61**, 9558 (2000).
- [42] Y. Kohama *et al.*, Phys. Rev. Lett. **109**, 167204 (2012).
- [43] K. Kojima *et al.*, Phys. Rev. Lett. **74**, 2812 (1995).
- [44] B. Koteswararao, S. Salunke, A. V. Mahajan, I. Dasgupta, and J. Bobroff, Phys. Rev. B **76**, 052402 (2007).
- [45] S. Laroche and M. Greven, Phys. Rev. B **69**, 092408 (2004).
- [46] A. Lavarélo and G. Roux, Phys. Rev. Lett. **110**, 087204 (2013).
- [47] A. Lavarélo, G. Roux, and N. Laflorencie, Phys. Rev. B **84**, 144407 (2011).
- [48] P. Lecheminant and E. Orignac, Phys. Rev. B **65**, 174406 (2002).
- [49] E. Lieb and D. Mattis, Journal of Mathematical Physics **3**, 749 (1962).
- [50] E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, Annals of Physics **16**, 407 (1961).
- [51] I. M. Lifshitz, Soviet Physics Uspekhi **7**, 549 (1965).
- [52] J.-M. Luck, *Systèmes désordonnés unidimensionnels* (Aléa-Saclay, 1992).
- [53] S. Ma, C. Dasgupta, and C. Hu, Phys. Rev. Lett. **43**, 1434 (1979).
- [54] C. K. Majumdar and D. K. Ghosh, Journal of Mathematical Physics **10**, 1388 (1969).
- [55] C. K. Majumdar and D. K. Ghosh, Journal of Mathematical Physics **10**, 1399 (1969).
- [56] W. Marshall, Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **232**, 48 (1955).

- [57] M. Matsuda *et al.*, Phys. Rev. B **55**, R11953 (1997).
- [58] O. Mentré *et al.*, Phys. Rev. B **80**, 180413 (2009).
- [59] O. Mentré *et al.*, Journal of the American Chemical Society **128**, 10857 (2006).
- [60] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [61] H.-J. Mikeska, U. Neugebauer, and U. Schollwöck, Phys. Rev. B **55**, 2955 (1997).
- [62] E. Miranda, Brazilian Journal of Physics **33**, 3 (2003).
- [63] N. Motoyama, H. Eisaki, and S. Uchida, Phys. Rev. Lett. **76**, 3212 (1996).
- [64] A. A. Nersesyan and A. M. Tsvelik, Phys. Rev. Lett. **78**, 3939 (1997).
- [65] K. Nomura, Journal of the Physical Society of Japan **72**, 476 (2003).
- [66] J. Oitmaa, R. R. P. Singh, and W. Zheng, Phys. Rev. B **54**, 1009 (1996).
- [67] K. Okamoto and K. Nomura, Physics Letters A **169**, 433 (1992).
- [68] K. Plumb *et al.*, preprint arXiv :1301.5324 (2013).
- [69] Y. Pomeau and B. Audoly, Reflets de la Physique n°**26**, 10 (2011).
- [70] J. Riera and A. Dobry, Phys. Rev. B **51**, 16098 (1995).
- [71] G. Roux, *Echelles de spins dopées sous champ magnétique*, PhD thesis, Université Paul Sabatier-Toulouse III, (2007).
- [72] E. Sørensen, I. Affleck, D. Augier, and D. Poilblanc, Phys. Rev. B **58**, R14701 (1998).
- [73] S. Sachdev and R. N. Bhatt, Phys. Rev. B **41**, 9323 (1990).
- [74] R. Saito, Journal of the Physical Society of Japan **59**, 482 (1990).
- [75] U. Schollwöck, T. Jolicœur, and T. Garel, Phys. Rev. B **53**, 3304 (1996).
- [76] B. S. Shastry and B. Sutherland, Phys. Rev. Lett. **47**, 964 (1981).
- [77] D. G. Shelton, A. A. Nersesyan, and A. M. Tsvelik, Phys. Rev. B **53**, 8521 (1996).
- [78] M. Sigrist and A. Furusaki, Journal of the Physical Society of Japan **65**, 2385 (1996).
- [79] D. A. Tennant, T. G. Perring, R. A. Cowley, and S. E. Nagler, Phys. Rev. Lett. **70**, 4003 (1993).
- [80] K. Trinh, S. Haas, R. Yu, and T. Roscilde, Phys. Rev. B **85**, 035134 (2012).
- [81] M. Troyer, H. Tsunetsugu, and D. Würtz, Phys. Rev. B **50**, 13515 (1994).
- [82] A. A. Tsirlin *et al.*, Phys. Rev. B **82**, 144426 (2010).
- [83] G. S. Uhrig, F. Schoenfeld, M. Laukamp, and E. Dagotto, The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems **7**, 67 (1999).
- [84] T. Vekua and A. Honecker, Phys. Rev. B **73**, 214427 (2006).
- [85] E. Westerberg, A. Furusaki, M. Sigrist, and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **75**, 4302 (1995).
- [86] E. Westerberg, A. Furusaki, M. Sigrist, and P. A. Lee, Phys. Rev. B **55**, 12578 (1997).
- [87] S. R. White, R. M. Noack, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **73**, 886 (1994).
- [88] S. R. White and I. Affleck, Phys. Rev. B **54**, 9862 (1996).
- [89] T. Yamada, Progress of Theoretical Physics **41**, 880 (1969).

- [90] K. Yang, R. A. Hyman, R. N. Bhatt, and S. M. Girvin, *Journal of Applied Physics* **79**, 5096 (1996).
- [91] E. Yusuf and K. Yang, *Phys. Rev. B* **68**, 024425 (2003).
- [92] I. A. Zaliznyak *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 087202 (2004).
- [93] W. Zheng, C. J. Hamer, R. R. P. Singh, S. Trebst, and H. Monien, *Phys. Rev. B* **63**, 144411 (2001).
- [94] J. des Cloizeaux and J. J. Pearson, *Phys. Rev.* **128**, 2131 (1962).