



HAL
open science

Brisures de symétrie dans les Hamiltoniens de Heisenberg classiques et quantiques en deux dimensions

Jean-Christophe Domenge

► **To cite this version:**

Jean-Christophe Domenge. Brisures de symétrie dans les Hamiltoniens de Heisenberg classiques et quantiques en deux dimensions. Matière Condensée [cond-mat]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2005. Français. NNT : . tel-00010943

HAL Id: tel-00010943

<https://theses.hal.science/tel-00010943>

Submitted on 9 Nov 2005

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

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

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS 6

Spécialité

PHYSIQUE THÉORIQUE

présentée par **Jean-Christophe DOMENGE**

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

Brisures de symétrie
dans les modèles de Heisenberg
classiques et quantiques
en deux dimensions

soutenue le 21 septembre 2005 devant le jury composé de

MM. :	Peter	HOLDSWORTH	Rapporteurs
	Frédéric	MILA	
	Daniel	CABRA	Examineurs
	Vladimir	DOTSENKO	
	Claire	LHULLIER	
	Didier	POILBLANC	
	Philippe	SINDZINGRE	

Remerciements

Je tiens d'abord à remercier Peter Holdsworth et Frédéric Mila d'avoir accepté la charge de rapporteur, ainsi que Daniel Cabra, Vladimir Dotsenko, Didier Poilblanc et Philippe Sindzingre d'avoir bien voulu juger ce travail.

Je dois beaucoup à Claire Lhuillier qui m'a fait confiance en acceptant de diriger ma thèse. Parce que je la savais toujours disponible pour orienter et discuter mon travail, j'ai pu m'offrir le luxe de l'indépendance. Je n'oublie pas non plus son soutien aux moments cruciaux. Pour avoir usé et abusé du temps de Claire, je rends hommage à la patience de Daniel Lhuillier. Je vous remercie enfin tous les deux de m'avoir accueilli en Californie.

Je remercie Philippe Sindzingre de m'avoir mis le pied à l'étrier les tous premiers jours, et d'avoir sponsorisé les dernières heures de rédaction, la toute dernière nuit.

Ce travail doit beaucoup à Pascal Viot grâce à qui j'ai notamment découvert l'univers du jeu, des casinos et de Monte-Carlo en général. Merci.

Merci beaucoup à Laurent Pierre d'avoir effacé pour moi, avec élégance, les quelques obstacles mathématiques sur la route du *cuboc*, et d'avoir gentiment accepté de répondre quatre cent cinquante trois fois à la même question.

J'ai aussi eu beaucoup de plaisir à collaborer avec Andreas Laeuchli, dont je salue l'indulgence pour mon humour.

Je mesure la chance que j'ai eu de travailler au LPTMC ces trois années. J'ai ainsi largement profité de discussions édifiantes avec Bernard Bernu, Dominique Mouhanna, Gilles Tarjus, Grégoire Misguish, Philippe Lecheminant, Bertrand Delamotte, Ludovic Pricoupenko, Chitra, Martin-Luc Rosenberg et Patrick Azaria : qu'ils soient tous remerciés pour l'intérêt qu'ils ont porté à mon travail, pour leur disponibilité et pour leur enthousiasme.

J'ai eu beaucoup de plaisir à venir travailler au laboratoire pendant ces trois années, et je pourrais en remercier l'ensemble de l'annuaire du LPTMC : vous m'avez tous fait un accueil très chaleureux et ce travail vous doit également beaucoup. En plus des personnes déjà citées, j'aimerais en particulier remercier Jean-Claude Leicknam, Redha Mazighi, François Detcheverry, Jean-Marc Victor, Nicolas Sator, Michel Quaggetto, Bertrand Guillot, Jean-Marie Maillard, Martine Postic, Sylviane Carré et Sylvie Dalla.

Je remercie mes parents de m'avoir accompagné avec amour. Je vous dois tant. Bien qu'ils sachent déjà ce que j'en pense, je tiens là l'occasion de remercier mes amis d'avoir été, de près ou de loin, à mes côtés. Manu, Fred et Pierre : je sais ce que je vous dois. Merci à Laurent, Astrid, Benjamin, Anne-J, Anne-K, Capu, Marc, Olivier, Aude, Mathieu, Pauline, et aux Lyonnais Fanfan, Julien, Inès, Gaël, Sandrine et Grégoire. Je ne vous oublie pas.

Merci enfin à Anne... tu sais pourquoi.

Ce travail est dédié à mes parents, à Saskia, et à Anne.

Table des matières

Introduction	1
1 Cu-titmb : des spins 1/2 sur le réseau kagomé	5
2 Modèle de Heisenberg $J_1 - J_2$ classique sur le réseau kagomé	13
2.1 Un ordre de Néel à 12 sous-réseaux pour $J_1 < 0$ et $J_2/ J_1 > 1/3$	13
2.2 Symétries brisées dans la phase <i>cuboc</i>	19
2.2.1 Schéma de brisure	19
2.2.2 Brisure de symétrie chirale	20
2.3 Théorème de Mermin-Wagner	22
2.4 Le scénario Ising	24
2.5 La transition chirale est faiblement du premier ordre	26
2.5.1 Algorithme de Metropolis	26
2.5.2 Erreur statistique	27
2.5.3 Exposant dynamique - dynamique vitreuse	27
2.5.4 Premiers résultats	29
2.5.5 Algorithme de trempe parallèle	33
2.5.6 Effets de taille finie	36
2.5.7 Conclusion partielle	45
2.6 Défauts topologiques dans la phase <i>cuboc</i>	46
2.6.1 Espace topologique des paramètres d'ordre <i>cuboc</i>	46
2.6.2 Vortex de $SO(2)$ - Transition de Kosterlitz-Thouless	47
2.6.3 Vortex de $SO(3)$ - Transition de Kawamura-Miyashita?	50
2.6.4 Les vortex dans la phase <i>cuboc</i> : premiers résultats	53
2.7 Evolution avec $J_2/ J_1 $: vers un point critique?	58
3 Influence des fluctuations quantiques dans la phase <i>cuboc</i>	61
3.1 Brisure de $SO(3)$ à la Néel	61
3.2 Les diagonalisations exactes	64
3.3 Signature de l'ordre <i>cuboc</i>	64
3.4 Analyse des spectres	69
3.5 Approche semi-classique	76

3.6	Phase gappée pour $J_2/ J_1 = 5.0$	82
4	Ordre nématique pour des spins 1/2 sur le réseau carré	85
	Conclusion	91

Introduction

L'idée de frustration est souvent illustrée sur l'exemple de spins Ising S_1, S_2, S_3 aux sommets d'un triangle et couplés antiferromagnétiquement selon $E_{\Delta} = S_1S_2 + S_2S_3 + S_3S_1$. Ce système est frustré au sens où on ne peut minimiser simultanément l'énergie de chaque lien : le fondamental, de type uud , est six fois dégénéré et d'énergie $E_{\Delta}^{Ising}/3 = -1/3 > -1$. Sur cet exemple élémentaire, sans fluctuation, on voit déjà une signature de la frustration, *i.e.* la grande dégénérescence du fondamental, avec 6 états pour 2^3 états accessibles au total. Plus généralement, dans les systèmes frustrés avec fluctuations, quantiques et/ou thermiques, on trouve un grand nombre d'états de basse énergie.

On dégage en plus deux ingrédients importants :

- la nature des spins : sur un triangle l'effet de la frustration est moins important pour des spins classiques XY ou Heisenberg que pour des spin Ising. Pour des spins continus le fondamental est en effet une configuration plane avec les trois spins à $2\pi/3$: si l'énergie par lien n'est toujours pas minimale $E_{\Delta}^{XY-Heisenberg}/3 = -1/2 > -1$ on voit néanmoins que la continuité des degrés de liberté permet de gagner en énergie sur chaque lien par rapport aux spins Ising.
- la géométrie triangulaire de la cellule élémentaire. En effet pour des spins Ising aux sommets d'un carré il n'y a plus de frustration : les états de type $udud$ minimisent l'énergie des 4 liens simultanément, soit $E_{\square}^{Ising}/4 = -1$, *i.e.* l'énergie atteint maintenant sa borne inférieure. D'autre part le fondamental n'est plus que deux fois dégénéré, pour 2^4 états accessibles au total. A l'inverse des spins Ising ou continus sur un tétraèdre sont un autre exemple de système frustré.

Lorsqu'on assemble des cellules élémentaires en réseau, l'effet de la frustration dépend de manière essentielle de la façon dont sont connectées les cellules. Lorsqu'elles partagent un côté la connectivité du réseau est une contrainte forte sur les configurations de basse énergie.

Pour des spins Heisenberg classiques sur le réseau carré par exemple, le choix d'une configuration $udud$ sur une plaquette détermine complètement l'ordre de Néel colinéaire habituel sur le réseau entier qui est effectivement le fondamental à $T = 0$.

Sur le réseau triangulaire, le choix d'une configuration coplanaire à $2\pi/3$ sur un

triangle détermine de façon similaire un ordre de Néel à trois sous-réseaux, et de façon moins triviale cette configuration est également le fondamental à $T = 0$: bien que l'énergie par lien ne soit pas optimale la connectivité contraint les configurations de basse énergie et interdit en particulier à d'autres configurations, ordonnées ou non, de se développer.

La situation est différente lorsque les cellules ne partagent qu'un sommet, comme le réseau pyrochlore [64, 65], dans lequel les cellules sont des tétraèdres, le réseau damier, la version bidimensionnelle du pyrochlore, ou le réseau kagomé (Fig. 2.1). Dans tous ces cas le Hamiltonien se réécrit à une constante près comme la somme des spins de chaque plaquette α au carré

$$\mathcal{H} \propto \sum_{\alpha} \mathbf{S}_{\alpha}^2 \quad (1)$$

Il est clair que la connectivité est plus faible et donc le problème est moins contraint : en fait toutes les configurations vérifiant $\forall \alpha, \mathbf{S}_{\alpha} = \mathbf{0}$ minimisent (1). Sur le réseau kagomé par exemple, cette condition impose uniquement une structure locale plane à $2\pi/3$ pour les trois spins d'un triangle : l'orientation relative des plans des différents triangles n'est pas fixée par (1) et le modèle présente une dégénérescence locale continue à $T = 0$ [35, 14].

D'une manière générale la frustration accroît la densité d'états de basse énergie : le fondamental est le plus souvent dégénéré avec un grand nombre d'excitations de basse énergie [38]. La signature expérimentale d'un système frustré s'observe donc sur les propriétés de basse température comme on l'illustrera dans la section 1. Dans le cas de spins Heisenberg classiques sur le réseau kagomé les fluctuations thermiques sélectionnent les configurations coplanaires par un effet d'ordre par le désordre [35, 14, 78]. La présence d'ordre à longue portée dans les corrélations spin-spin n'est pas claire [35, 77] mais l'hélicité locale, définie pour les trois spins d'un triangle par

$$\boldsymbol{\zeta}_{\Delta} = \mathbf{S}_1 \wedge \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \wedge \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \wedge \mathbf{S}_1 \quad (2)$$

possède des corrélations nématiques $\langle (\boldsymbol{\zeta}_{\Delta}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\zeta}_{\Delta}(\mathbf{0}))^2 \rangle$ à longue portée dans la phase coplaire¹ et on parle alors de nématique de spin [2].

À température nulle il a été montré que les fluctuations quantiques pouvaient également sélectionner un ordre particulier parmi un ensemble d'états classiquement dégénérés [79, 21, 46]. Cependant l'ordre par le désordre à $T = 0$ est en compétition avec l'effet tunnel qui conduit le système dans une superposition d'états dégénérés plutôt que de sélectionner une configuration en particulier².

Sur le réseau kagomé l'approximation semi-classique donne une nappe de dispersion nulle sur l'ensemble de la zone de Brillouin [30], réminiscente de la

¹Une interaction Dzyaloshinsky-Moriya, même petite devant l'échange entre premiers voisins, sélectionne l'ordre de Néel à trois sous-réseaux $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ (Fig. 2.3) avec des corrélations ferromagnétiques dans l'hélicité $\langle \boldsymbol{\zeta}_{\Delta}(\mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\zeta}_{\Delta}(\mathbf{0}) \rangle$ [25].

²Toutefois le calcul de la contribution des instantons (*i.e.* dans la limite semi-classique) sur le réseau kagomé montre que la levée de dégénérescence est exactement nulle pour des spins 1/2 [24].

dégénérescence classique. Toutefois les approches de grand N [79] et l'approximation des ondes de spin [20] semblent montrer une sélection de l'ordre de Néel à trois sous-réseaux $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ par rapport à l'ordre $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ (Fig. 2.3).

Pour des spins 1/2 les fluctuations quantiques sont maximales et leur effet sur un système aussi dégénéré classiquement n'est pas trivial. En particulier la présence d'ordre dans le fondamental fait encore débat en dépit de son étude intensive depuis plus de 15 ans [13, 50, 96, 47, 92, 56], motivée en premier lieu par la modélisation du magnétisme de la deuxième couche d' 3He adsorbé sur du graphite [26].

S'il existe un ordre, le paramètre d'ordre n'a en tout cas pas encore été identifié : en accord avec les séries haute température [83] les échantillons de taille finie semblent présenter des corrélations de spin [95, 50], de dimère [50], d'hélicité et de chiralité scalaire³ [13] à courte portée. Ce modèle est donc souvent cité comme exemple d'une réalisation d'un état liquide de spin en dépit de caractéristiques spectrales très différentes du liquide RVB imaginé par Anderson [1] et dont un prototype "expérimental" a été mis en évidence par les diagonalisations exactes dans le modèle d'échange multiple sur le réseau triangulaire [60, 61, 52].

Leur seul point commun est en effet l'absence de paramètre d'ordre local mais dans le scénario RVB il existe néanmoins une brisure de symétrie *topologique* signée par une dégénérescence 4 du fondamental sur les réseaux non bipartites. A cette mise en ordre topologique sont associées des excitations fractionnaires gappées, les *visons*, de spin nul [39, 75, 80, 81] et mises en évidence récemment sur un modèle de dimères quantiques [62].

Les diagonalisations exactes montrent au contraire un nombre exponentiel d'excitations singulettes $\sim 1.15^N$ proches du fondamental⁴ compatible uniquement avec une dispersion nulle des excitations élémentaires du liquide RVB, ce qui rappelle la nappe non dispersive des ondes de spin.

D'autre part les excitations magnétiques d'un liquide RVB sont elles aussi fractionnaires et gappées : ces *spinons* déconfinés portent un spin 1/2 et sont en interaction à longue portée avec les visons. Mais les diagonalisations exactes fournissent une estimation très faible du gap de spin, de l'ordre de 5% de la constante d'échange [92] : le scénario RVB, qui suppose l'existence d'un gap suffisamment fort pour légitimer la description en pavages de singulets, paraît alors discutable. De même les scénarios de VBC de grande maille (avec de étoiles résonnantes et une maille de 12 spins [86] ou avec des hexagones résonnants et une maille de 36 spins [74]) semblent peu probables et si on attend un grand nombre de singulets proches du fondamental les états compatibles avec les brisures de symétrie spatiales ne sont pas les plus bas.

Un scénario compatible avec la grande densité d'états singulets sous un gap de

³On définit la chiralité scalaire des trois spins d'un triangle par $\chi_{\Delta} = \mathbf{S}_1 \wedge \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3$.

⁴Cette densité d'états anormale se retrouve également dans les secteurs de plus haut spin et montre leur absence d'échelle d'énergie intrinsèque. Ce résultat est compatible avec la diffusion inélastique de neutrons sur le kagomé bicouche SCGO[69] et le calcul de la susceptibilité dynamique par DMFT [29].

spin faible, telle qu'observée sur les spectres à taille finie, est la proximité d'un point critique. A l'appui de cette version on note sur les spectres à taille finie qu'un échange J_2 entre seconds voisins de l'ordre du gap de spin conduit le système dans une phase ordonnée [47]. Dans ce scénario le gap de spin devrait se fermer à la limite thermodynamique et un J_2 infinitésimal ordonne le système : dans le diagramme de phase $J_1 - J_2$ le modèle de Heisenberg sur le réseau kagomé apparaît alors comme un point critique quantique.

Chapitre 1

Cu-titmb : des spins 1/2 sur le réseau kagomé

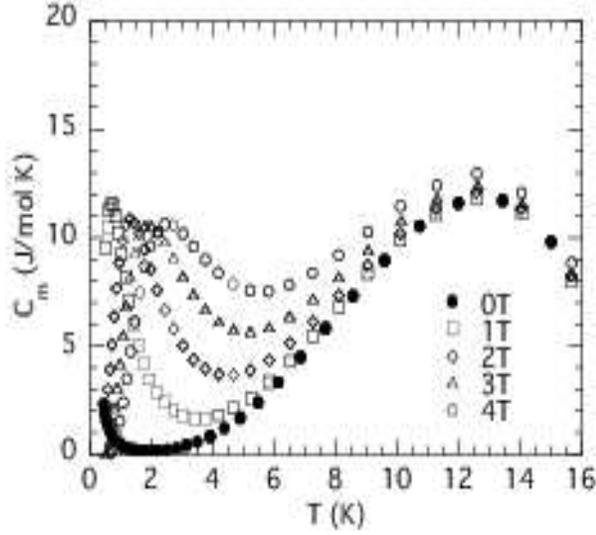
Plusieurs séries d'expériences ont été réalisées récemment sur $[\text{Cu}_3(\text{titmb})_2(\text{OCOCH}_3)_6] \cdot \text{H}_2\text{O}$, {titmb=1,3,5-tris(imidazol-1-ylmethyl)-2,4,6 trimethylbenzene} (noté Cu-titmb dans la suite) [34, 73]. Les propriétés magnétiques de ce composé organique sont entièrement dues aux ions Cu^{2+} , qui portent un spin 1/2, vivant sur des réseaux kagomé (Fig. 2.1) plans entre lesquels il n'y a pas de chemin d'échange [53].

La mesure du tenseur g montre que l'anisotropie d'échange est faible [53] et le Hamiltonien de Heisenberg avec échange entre plus proches voisins (1.1) est donc *à priori* un bon candidat pour une modélisation minimale des propriétés magnétiques de Cu-titmb.

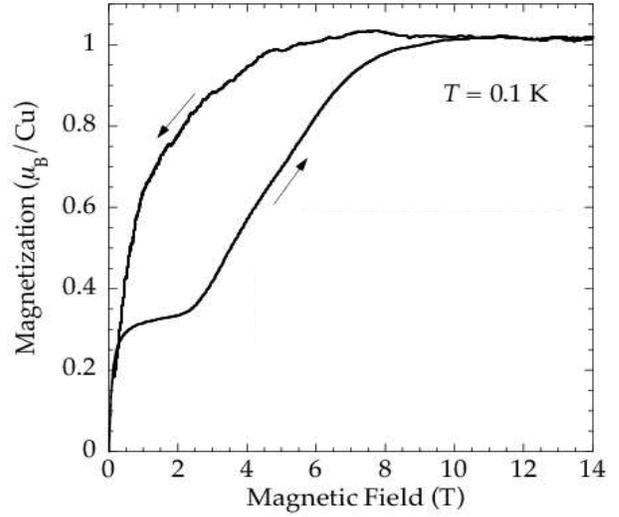
$$\mathcal{H}_1 = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.1)$$

Expérimentalement on retrouve en effet plusieurs caractéristiques du Hamiltonien (1.1) :

- La chaleur spécifique magnétique, *i.e.* obtenue en soustrayant la contribution du réseau, possède un pic à basse température (Fig. 1.1(a)) en accord avec les études numériques de (1.1) [27, 72, 82].
- La courbe d'aimantation (Fig. 1.1(b)) mesurée en champ pulsé à 100mK présente un plateau d'aimantation à 1/3 conforme à la prévision théorique [33, 10, 9].



(a)



(b)

FIG. 1.1 – Fig. 1.1(a) Chaleur spécifique magnétique de Cu-titmb *vs.* la température à différents champs magnétiques (Honda et al. [34]). Fig. 1.1(b) Courbes d'aimantation de Cu-titmb en champ pulsé à $T = 100mK$ (Narumi et al. [73]).

Ces résultats sont à contraster par les observations suivantes :

- Le pic de basse température de la chaleur spécifique s'élargit et se déplace vers les plus hautes températures avec le champ magnétique (Fig. 1.1(a)), tandis que numériquement la position du pic de basse température du Hamiltonien (1.1) est pratiquement indépendante du champ [82] : il y a bien des excitations magnétiques très proches du fondamental (comme nous l'avons remarqué plus haut, le gap de spin s'extrapole numériquement à $\Delta \sim J_1/20$) mais leur contribution est noyée dans celle du continuum non gappé de singulets qui contribue environ pour moitié à la chaleur spécifique à basse température.
- Sur la courbe d'aimantation le plateau n'apparaît que dans une certaine gamme de fréquences de pulse du champ magnétique (Fig. 1.2(a)) et à l'équilibre, *i.e.* en champ statique, le plateau disparaît tout à fait.

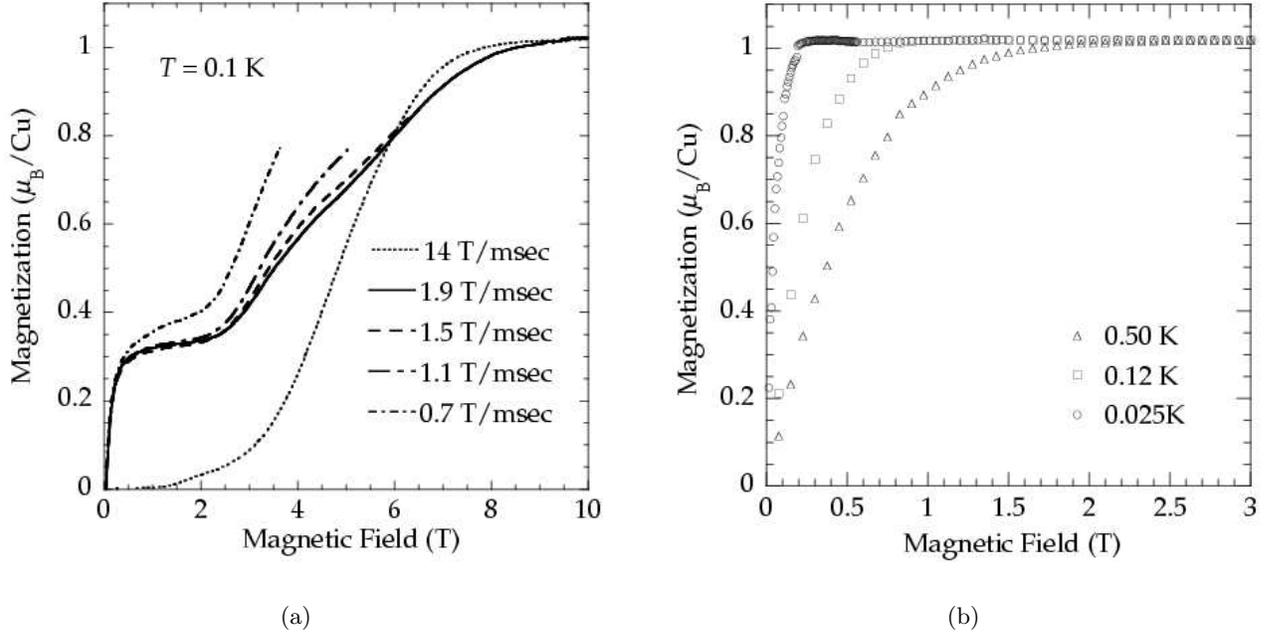


FIG. 1.2 – 1.2(a) Variation de la courbe d’aimantation en champ pulsé avec la fréquence à $T = 100mK$ (Narumi et al. [73]). 1.2(b) Courbes d’aimantation de Cu-titmb en champ statique (Narumi et al. [73]).

De façon plus quantitative les deux séries d’expériences permettent d’estimer la constante d’échange J_1 : la bosse de haute température de la chaleur spécifique correspond en effet à la variation rapide de l’entropie magnétique associée à la mise en ordre locale des spins. On l’attend donc à une température T_{max} de l’ordre de l’échelle d’énergie microscopique, soit J_1 : les séries haute température donnent $T_{max} \sim 2J_1/3$ [27] pour le Hamiltonien (1.1), soit $J_1 \sim 20K$ pour Cu-titmb (Fig. 1.1(a)).

D’autre part le champ de saturation B_{sat} mesure la polarisabilité l’échantillon et les diagonalisations exactes, par exemple, prédisent $B_{sat} \sim 3J_1$, soit $J_1 \sim 60K$ pour Cu-titmb en champ statique (Fig. 1.2(b)), un résultat incompatible de deux ordres de grandeur avec l’estimation précédente.

Les deux expériences montrent donc l’existence de deux échelles d’énergie bien distinctes dans Cu-titmb, dont le Hamiltonien (1.1) ne peut rendre compte à l’aide du seul paramètre J_1 .

Une modélisation minimale des propriétés magnétiques de Cu-titmb reproduit au moins ces deux échelles d’énergie et nécessite donc l’introduction d’un couplage supplémentaire.

Pour guider notre choix on peut remarquer que le rapport expérimental des deux échelles d'énergie contraint la forme du spectre d'un échantillon de Cu-titmb (Fig. 1.3) :

- La chaleur spécifique (magnétique) par spin C est liée à la largeur w de la distribution d'énergie par spin e (Fig. 1.3) par

$$w(T) \sim \sqrt{\langle e^2 \rangle_T - \langle e \rangle_T^2} = T\sqrt{k_B C/N}.$$

Les diagonalisations exactes montrent que la hauteur $C(T_{max})$ de la bosse haute température (typiquement une fraction de k_B) varie peu avec les différentes interactions d'échange envisagées : la position T_{max} de la bosse permet donc de comparer directement les largeurs de bande W de différents spectres exacts à taille N donnée, avec $W = w(T_{max}) = \mathcal{O}(k_B T_{max})$.

- D'autre part la courbe d'aimantation $m(B)$ s'obtient en minimisant l'énergie libre par spin $f(m) = e_0(m) - \frac{g\mu_B}{2}B$, avec $e_0(m)$ l'énergie par spin en champ nul du "fondamental" d'aimantation $m = S/S_{max} = 2S/N$ (Fig. 1.3). On obtient $B(m) = \frac{2}{g\mu_B}(\frac{\partial e_0}{\partial m})$ et le champ à saturation vaut donc

$$B_{sat} = \frac{2}{g\mu_B}(\frac{\partial e_0}{\partial m})_{m \rightarrow 1^-} = \mathcal{O}(e_{ferro}/g\mu_B)$$

avec $e_{ferro} = e_0(m = 1)$.

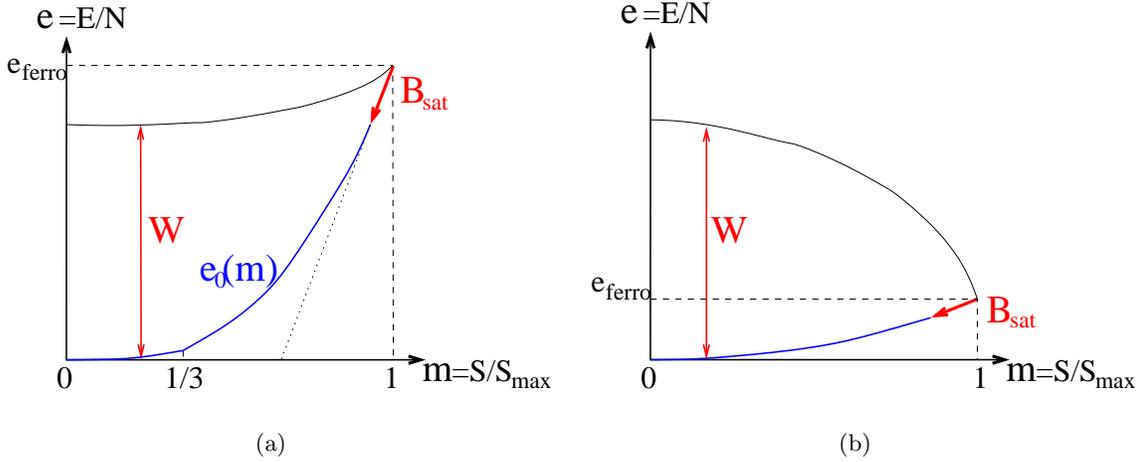


FIG. 1.3 – Allure de l'énergie par spin en fonction de l'aimantation $m = S/S_{max} = 2S/N$ pour le Hamiltonien (1.1) (Fig. 1.3(a)) et pour un échantillon de Cu-titmb (Fig. 1.3(b)), avec W la largeur de bande et B_{sat} le champ à saturation. Pour le Hamiltonien (1.1), le plateau à 1/3 est signé par la rupture de pente de $e_0(m)$ à cette aimantation.

Le rapport des deux échelles d'énergie $\theta = g\mu_B B_{sat}/k_B T_{max} = \mathcal{O}(e_{ferro}/W)$ contraint donc directement l'allure globale du spectre (Fig. 1.3) : les diagonalisations exactes permettent ainsi de déterminer les interactions d'échange à ajouter à (1.1) pour reproduire l'ordre de grandeur du rapport expérimental $\theta_{Cu-titmb} = 0.02$ ($\theta \sim 3J_1/(2/3J_1) = 4.5$ pour le Hamiltonien (1.1)). On teste en particulier l'influence d'interactions d'échange à plus longue portée ou à plus de deux spins, comme un échange cyclique à six spins autour d'un hexagone vide. En fait le très faible champ de saturation expérimental suggère la proximité de Cu-titmb avec une instabilité ferromagnétique (Fig. 1.2(b)).

On parvient à reproduire l'ordre la valeur expérimentale de θ en ajoutant un échange entre seconds voisins J_2 avec $J_1 J_2 < 0$: $J_1 < 0$ et $J_2/|J_1| \sim 0.3$, ou $J_2 < 0$ et $|J_2|/J_1 \sim 50$ conviennent. Dans les deux cas, comme on le verra dans la suite, le modèle est en effet très proche d'une transition ferro-antiferro (Fig. 2.5).

Cependant, dans les chaînes Cu-O le super-échange entre les ions Cu^{2+} via un atome d'oxygène est ferromagnétique lorsque l'angle de liaison $Cu - O - Cu$ est d'environ 90° [63]. On prendra donc la solution d'un échange J_1 ferromagnétique et l'ajustement de T_{max} et B_{sat} aux valeurs expérimentales donne $J_1 \sim -19K$ et $J_2 \sim 6K$.

Dans cette région du diagramme de phase $J_1 - J_2$ le fondamental n'est pas connu et son étude fera l'objet de la partie 2.1.

Avec ces couplages on obtient un double pic dans la chaleur spécifique et le pic de basse température se déplace légèrement vers les hautes températures avec le champ (Fig. 1.4), en accord qualitatif avec le résultat expérimental¹.

¹Le calcul de la chaleur spécifique requiert la connaissance de la densité d'états à toutes les énergies. Pour obtenir toutes les énergies propres du Hamiltonien, et non les extrémités du spectre uniquement, le nombre d'itérations Lanczos nécessaires est 2^N , la dimension de l'espace de Hilbert. Le calcul de la chaleur spécifique par diagonalisation exacte est donc limité aux (très) petits échantillons.

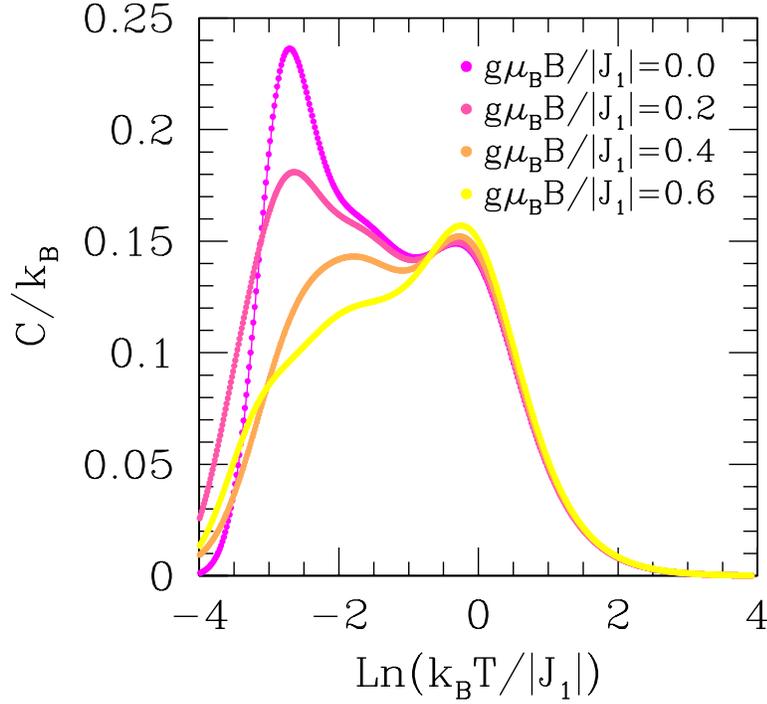


FIG. 1.4 – Chaleur spécifique par spin à différents champs magnétiques d’un échantillon de 12 spins pour $J_1 = -1$ et $J_2 = 0.5$ obtenue à partir du spectre exact complet. Le pic de basse température s’élargit et se déplace vers les hautes températures avec le champ.

On calcule d’autre part les courbes d’aimantation à partir des spectres exacts pour des échantillons de taille $N \leq 36$ spins : la largeur du plateau d’aimantation à $1/3$, qu’on écrit $B_+ - B_-$, est directement liée à la rupture de pente de la courbe $e_0(m)$ à $m = 1/3$ par $B_{\pm} = \frac{2}{g\mu_B} \left(\frac{\partial e_0}{\partial m} \right)_{m \rightarrow 1/3^{\pm}}$ ².

Les échantillons diagonalisés se séparent naturellement en deux groupes (Fig. 1.5) :

- Les échantillons de taille non multiple de six ($N=21$ et 27), qui n’ont aucun des trois milieux de côté (Fig. 2.2) dans leur première zone de Brillouin, frustrent le fondamental thermodynamique et présentent un plateau à $1/3$ de largeur finie.
- Les échantillons de taille multiple de six, qui ont un ou plusieurs milieux de côté dans leur première zone de Brillouin, sont plus stables. La largeur du plateau à $1/3$ pour ce groupe d’échantillons semble s’extrapoler à zéro.

²Pour un échantillon de taille N la discretisation naturelle de $m = 2S/N$ donne une courbe d’aimantation en escaliers et donc une largeur de plateau toujours finie. Pour atténuer cet effet de taille on effectue une régression séparée des deux portions $m \leq m_0$ et $m \geq m_0$ de la courbe $e_0(m)$, par deux polynômes, en autorisant une éventuelle rupture de pente en $m = m_0$. Pour tous les échantillons l’erreur de la régression est minimale pour une rupture de pente en $m_0 = 1/3$.

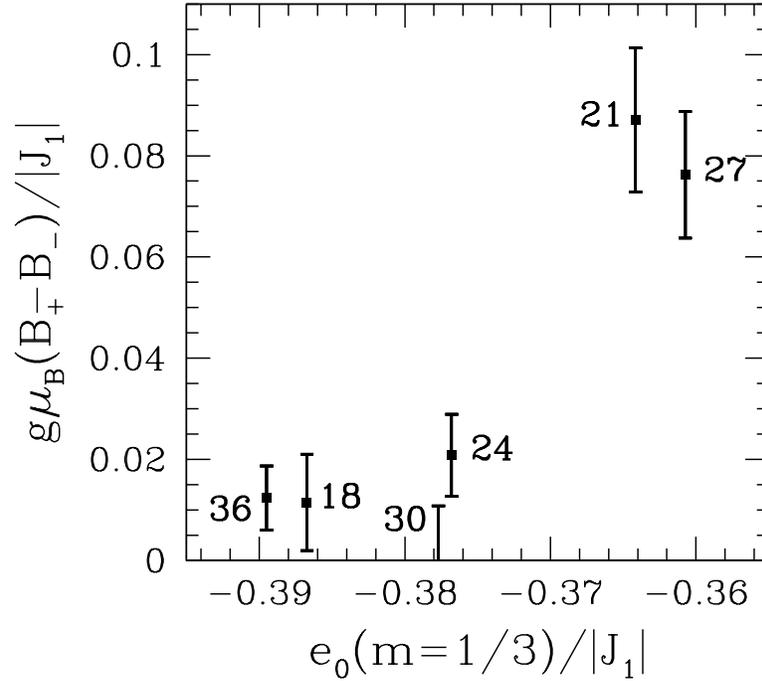


FIG. 1.5 – Largeur du plateau d’aimantation $1/3$ *vs.* l’énergie du fondamental par spin à cette aimantation. La largeur du plateau à $1/3$ est déterminée par la rupture de pente de la courbe $e_0(m)$ à $m = 1/3$. Les barres d’erreur sont données par les incertitudes sur les paramètres de régression.

L’absence probable de plateau à $1/3$ pour le fondamental thermodynamique est compatible avec l’observation expérimentale (Fig. 1.2(b)), et souligne déjà l’importance des milieux de côté dans le fondamental, ce qu’on montrera dans la partie 2.1.

De plus les échantillons impairs $N = 21$ et 27 suggèrent une interprétation pour l’apparition du plateau à $1/3$ en champ pulsé dans une gamme finie de fréquences (Fig. 1.2(a)).

Plateau transitoire à $1/3$ D’une manière générale la densité d’états de basse énergie est grande dans les systèmes frustrés, et la dynamique de relaxation vers l’équilibre peut être lente (Sec. 2.5.3) : en champ pulsé on n’observe la courbe d’aimantation d’équilibre que si la fréquence du champ est plus petite que toutes les fréquences caractéristiques de retour à l’équilibre : en général l’échantillon visite plutôt une succession d’états hors d’équilibre.

Dans une gamme finie de fréquence, ce sont les configurations de type *uud*, responsables du plateau à $1/3$ [51], qui sont sélectionnées (Fig. 1.2(a)).

On peut le comprendre en remarquant que parmi toutes les configurations d’aimantation $1/3$, les configurations *colinéaires uud* ont le plus grand bassin d’at-

traction pour les fluctuations, *i.e.* un grand nombre de fluctuations infinitésimales, quantiques ou thermiques, peut amener le système dans ces configurations et l'y laisser : par exemple, du fait de la colinéarité des spins, les configurations *uud* ne sont pas détruites par les fluctuations dans le plan perpendiculaire à l'axe des spins.

De plus, le fait que le plateau n'apparaisse que pour les échantillons impairs $N = 21$ et 27 , légèrement frustrés par les conditions limites périodiques, suggère que les configurations *uud* sont *métastables*, et fournit une interprétation simple du caractère transitoire du plateau.

On peut associer en effet deux temps caractéristiques aux configurations métastables *uud* :

- Le temps de relaxation τ_{relax} , qui dépend essentiellement de la courbure du fond du puits,
- Le temps de vie, *i.e.* le temps caractéristique d'échappement du puits, τ_{esc} qui dépend à la fois de la forme du puits métastable et de la barrière qui le sépare du puits d'équilibre.

Que le régime d'échappement soit classique (par activation thermique) ou quantique (par effet tunnel), τ_{esc} croît exponentiellement avec la hauteur des barrières d'énergie et en général $\tau_{esc} \gg \tau_{relax}$.

En champ pulsé à la fréquence Γ l'échantillon relaxe dans le puits métastable des configurations *uud* pendant un temps $\sim \Gamma^{-1}$. Le plateau à 1/3 n'est donc observable que pour $\tau_{relax} < \Gamma^{-1} < \tau_{esc}$.

On peut voir cette sélection des états *uud* par les fluctuations, et le blocage transitoire du système dans ces configurations très symétriques, comme un analogue dynamique de l'effet d'ordre par le désordre [89] valable strictement à l'équilibre thermodynamique.

Chapitre 2

Modèle de Heisenberg $J_1 - J_2$ classique sur le réseau kagomé

2.1 Un ordre de Néel à 12 sous-réseaux pour $J_1 < 0$ et $J_2/|J_1| > 1/3$

Comme on l'a noté plus haut le fondamental du modèle $J_1 - J_2$ dans la région de Cu-titmb reste à déterminer. C'est ce qu'on se propose de faire dans la suite : on considère le Hamiltonien de Heisenberg (2.1) avec échange entre premiers et deuxièmes voisins sur le réseau kagomé

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,k \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k \quad (2.1)$$

où J_1 et J_2 sont les constantes d'échange entre premiers et deuxièmes voisins respectivement (Fig. 2.1).

On considère dans un premier temps la limite classique, *i.e.* $\hbar \rightarrow 0$ à $S\hbar$ fixé. Dans cette limite les valeurs propres de S_i^μ ($\mu = x, y, z$) forment un continuum borné dans $[-S\hbar, S\hbar]$, les trois composantes du spin commutent

$$[S_i^\mu, S_i^\nu] = j\hbar \epsilon^{\mu\nu\rho} S_i^\rho = \mathcal{O}(S\hbar^2) \rightarrow 0$$

et la norme du spin

$$\sqrt{\mathbf{S}_i^2} = \sqrt{S(S+1)\hbar^2} \rightarrow S\hbar.$$

Les spins sont alors des vecteurs de l'espace ordinaire de norme $S\hbar$ qu'on prendra égale à 1 dans toute la suite.

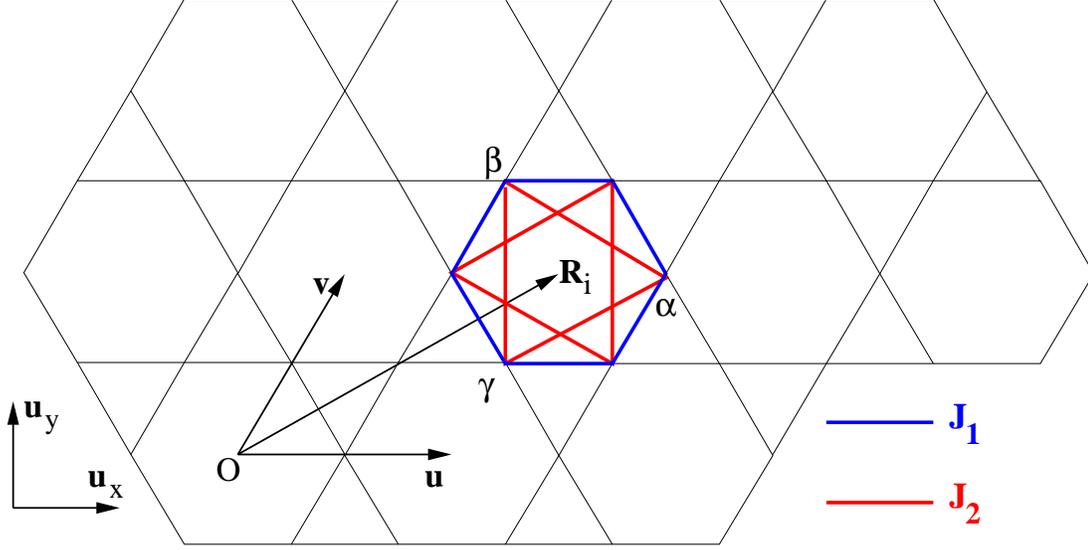


FIG. 2.1 – Interactions d'échange entre premiers et deuxièmes voisins sur le réseau de kagomé. \mathbf{u} et \mathbf{v} sont les vecteurs de base du réseau de Bravais. Dans la base orthonormée $(\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y)$, $\mathbf{u}=(2,0)$ et $\mathbf{v}=(1,\sqrt{3})$. Par translation de la maille hexagonale contenant les trois sites α, β, γ , les six échanges premiers voisins (en bleu) et les six échanges seconds voisins (en rouge), on obtient le réseau kagomé avec tous les échanges J_1 et J_2 .

On cherche la configuration classique qui minimise le Hamiltonien (2.1) : une première indication est donnée par la brisure de symétrie de translation dans le fondamental.

On passe pour cela dans l'espace de Fourier : le réseau de Bravais du kagomé est triangulaire de pas 2, avec 3 sites α, β, γ par maille (Fig. 2.1), et pour un échantillon de N sites on définit donc les $N/3$ composantes de Fourier $\mathbf{S}_{\mathbf{q}}^\mu$, $\mu = \alpha, \beta, \gamma$ indexant les trois types de sites :

$$\mathbf{S}_{\mathbf{q}}^\mu = \sqrt{\frac{3}{N}} \sum_{i=1}^{N/3} \mathbf{S}_i^\mu e^{-j\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i + \boldsymbol{\delta}_\mu)} \quad (2.2)$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{S}_i^\mu = \sqrt{\frac{3}{N}} \sum_{\mathbf{q} \in 1zB} \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^\mu e^{j\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_i + \boldsymbol{\delta}_\mu)} \quad (2.3)$$

où $\boldsymbol{\delta}_\alpha = \mathbf{u}/2$, $\boldsymbol{\delta}_\beta = (\mathbf{v} - \mathbf{u})/2$, et $\boldsymbol{\delta}_\gamma = -\mathbf{v}/2$, avec $\mathbf{u} = (2, 0)$ et $\mathbf{v} = (\sqrt{3}, 1)$ et $1zB$ est la première zone de Brillouin du réseau de Bravais triangulaire, *i.e.* un hexagone de côté $2\pi/3$ contenant $N/3$ vecteurs \mathbf{q} (Fig. 2.2).

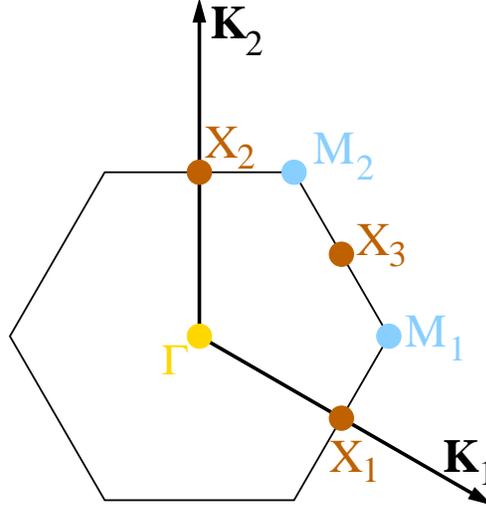


FIG. 2.2 – Première zone de Brillouin du réseau kagomé avec ses points de plus haute symétrie. On donne les composantes du centre de zone $\Gamma=(0,0)$, des deux coins de zone $M_1=(\frac{2}{3}, \frac{1}{3})$ et $M_2=(\frac{1}{3}, \frac{2}{3})$, et des trois milieux de côtés $X_1=(\frac{1}{2}, 0)$, $X_2=(0, \frac{1}{2})$, et $X_3=(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ dans la base ($\mathbf{K}_1=\frac{2\pi}{3}\mathbf{u}-\frac{\pi}{3}\mathbf{v}$, $\mathbf{K}_2=-\frac{\pi}{3}\mathbf{u}+\frac{2\pi}{3}\mathbf{v}$).

En substituant (2.3) dans (2.1) on obtient les composantes de Fourier de \mathcal{H} :

$$\mathcal{H}^{cl} = \sum_{\mathbf{q} \in 1zB} \mathcal{H}_{\mathbf{q}}^{cl} = \sum_{\mathbf{q} \in 1zB} \mathbf{V}_{\mathbf{q}}^+ \cdot \mathbf{M}_{\mathbf{q}} \cdot \mathbf{V}_{\mathbf{q}}$$

où

$$\mathbf{V}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^{\alpha} \\ \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^{\beta} \\ \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^{\gamma} \end{pmatrix} \text{ et } \mathbf{M}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} 0 & m_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) & m_{\alpha\gamma}(\mathbf{q}) \\ m_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) & 0 & m_{\beta\gamma}(\mathbf{q}) \\ m_{\alpha\gamma}(\mathbf{q}) & m_{\beta\gamma}(\mathbf{q}) & 0 \end{pmatrix}$$

avec $m_{\mu\nu}(\mathbf{q}) = J_1 \cos(2\mathbf{q} \cdot (\boldsymbol{\delta}_{\mu} + \boldsymbol{\delta}_{\nu})) + J_2 \cos(2\mathbf{q} \cdot (\boldsymbol{\delta}_{\mu} - \boldsymbol{\delta}_{\nu}))$.

L'expression analytique des valeurs propres de $\mathbf{M}_{\mathbf{q}}$ s'obtient de la formule de Cardan et donne trois nappes $\omega_{\mu}(\mathbf{q})$, $\mu = 1, 2, 3$.

Pour la nappe la plus basse ($\mu = 1$) on résout

$$\nabla_{\mathbf{q}} \omega_1(\mathbf{q}) = 0 \quad (2.4)$$

avec $\mathbf{q} \in 1zB$. On obtient ainsi le(s) mode(s) qui minimise(nt) \mathcal{H} pour des valeurs de J_1 et J_2 données.

Les solutions de (2.4) permettent de distinguer quatre régions dans l'espace des paramètres $J_1 - J_2$:

Pour $J_1 > 0$ et $J_2 > 0$

\mathcal{H} a un minimum deux fois dégénéré (provenant de deux nappes différentes) en $\mathbf{q} = \Gamma$ (Fig. 2.2) : le fondamental classique est invariant par toute translation

d'un vecteur du réseau de Bravais $\mathbf{R} = p\mathbf{u} + q\mathbf{v}$ où $(p, q) \in \mathbb{Z}^2$.

On en déduit que tous les hexagones sont équivalents et du fait des trois sites par maille du réseau kagomé on attend une structure à trois sous réseaux au maximum.

Une minimisation de \mathcal{H} dans l'espace direct¹ sur des échantillons de taille ≤ 1200 spins donne effectivement un ordre de Néel à trois sous réseaux orientés à 120° , noté état de Néel $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ dans la suite (Fig. 2.3).

On remarque que cette configuration "optimise" simultanément les liens antiferro entre premiers et seconds voisins, au sens où $J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j < 0$ pour toutes les paires de sites (i, j) en interaction.

Pour $J_1 > 0$ et $J_2 < 0$

\mathcal{H} a deux minima aux coins de zone \mathbf{M}_1 et \mathbf{M}_2 : le fondamental est invariant par toute translation de vecteur $\mathbf{R} = p(2\mathbf{u} - \mathbf{v}) + q(2\mathbf{v} - \mathbf{u})$ où $(p, q) \in \mathbb{Z}^2$.

On en déduit que la maille élémentaire contient neuf sites et on attend neuf sous réseaux ferro au maximum.

La minimisation de \mathcal{H} dans l'espace direct donne en fait une structure à trois sous réseaux à 120° comme pour le Néel $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, bien que la brisure des symétries du réseau soit différente (Fig. 2.3). Les côtés de la maille élémentaire étant plus longs d'un facteur $\sqrt{3}$ que le pas du Bravais, cet ordre de Néel est généralement noté $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$.

Là encore $J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j < 0$ pour toutes les paires de sites (i, j) en interaction.

Pour $J_1 < 0$ et $J_2 < -J_1/3$

\mathcal{H} a un minimum unique en $\mathbf{\Gamma}$ correspondant à l'ordre ferromagnétique invariant par translation.

¹Pour minimiser \mathcal{H} on part d'une configuration aléatoire et à chaque itération on aligne séquentiellement chacun des N spins de l'échantillon sur l'opposé de son champ local. Le critère d'arrêt est la stationnarité de l'énergie totale.

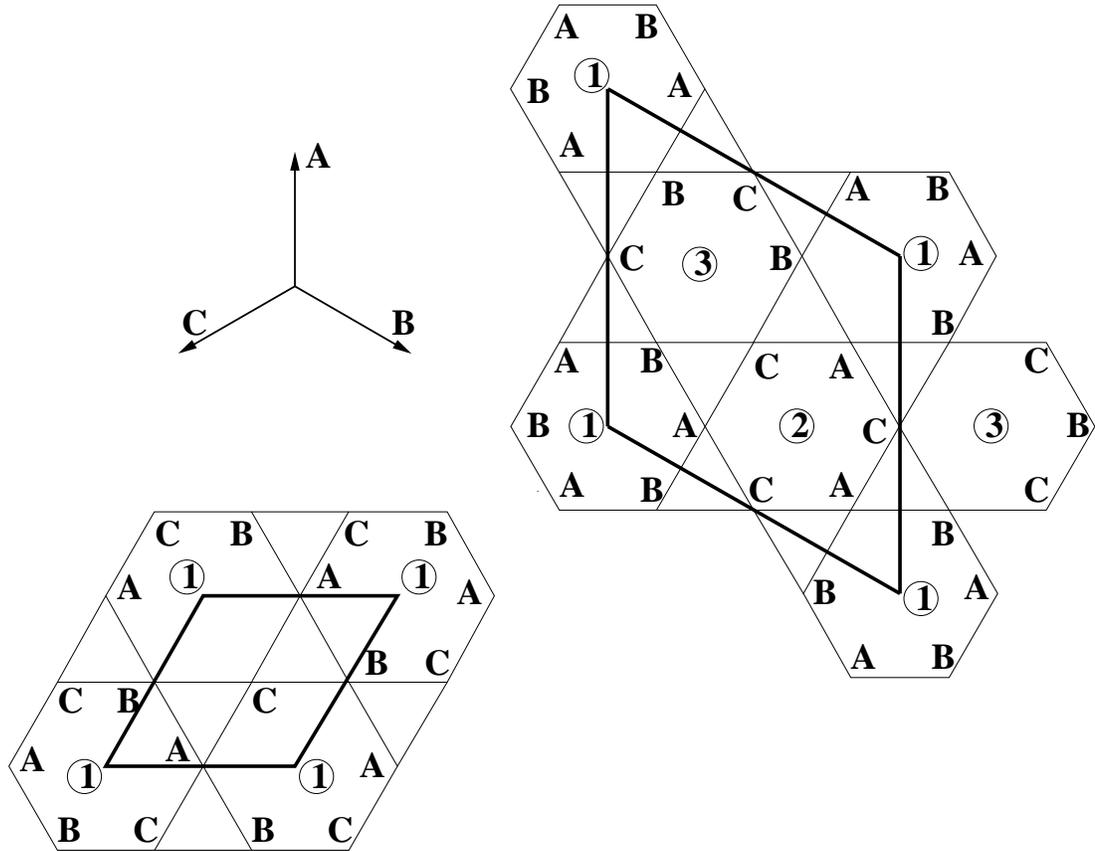


FIG. 2.3 – Les deux ordres de Néel classiques et leur maille élémentaire (trait gras) sur le réseau kagomé avec $J_1 > 0$: si $J_2 > 0$ (en bas à gauche) on obtient l’ordre de Néel $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ avec trois spins par maille (tous les hexagones sont identiques). Pour $J_2 < 0$ (en haut à droite) le Néel $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ a neuf spins par maille et il y a trois types d’hexagones.

Pour $J_1 < 0$ et $J_2 > -J_1/3$

\mathcal{H} a trois minima dégénérés aux trois milieux de côté \mathbf{X}_1 , \mathbf{X}_2 et \mathbf{X}_3 : le fondamental est invariant par toute translation de vecteur $\mathbf{R} = p(2\mathbf{u}) + q(2\mathbf{v})$ où $(p, q) \in \mathbb{Z}^2$.

On en déduit que la maille élémentaire contient quatre hexagones et donc 12 sites : on attend 12 sous réseaux ferro au maximum.

C’est effectivement ce que l’on obtient en minimisant \mathcal{H} dans l’espace direct : les 12 sous-réseaux pointent vers les milieux des 12 arêtes d’un cube.

On peut aussi remarquer que les 6 spins d’un hexagone sont dans un même plan et orientés à $\pi/3$ (Fig. 2.4). Dans “l’espace des spins” les 4 plans définis ainsi sont orientés comme les quatre faces d’un tétraèdre.

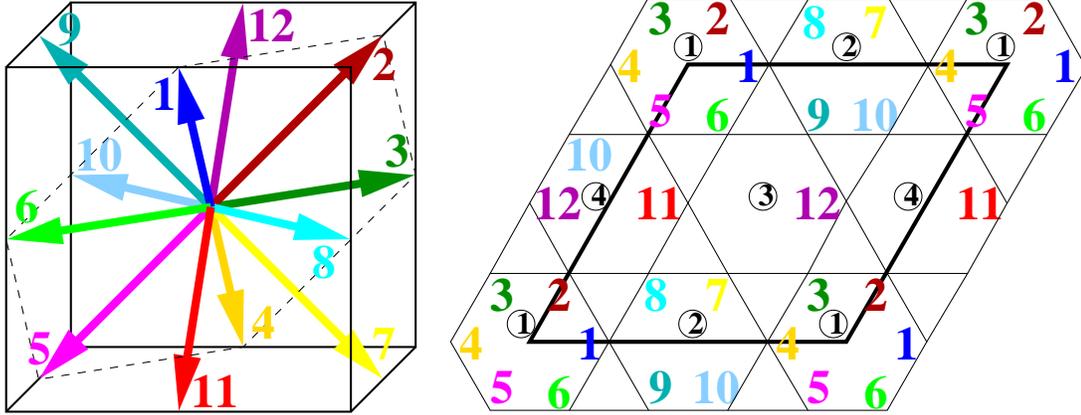


FIG. 2.4 – L'ordre de Néel à douze sous-réseaux sur le réseau kagomé avec $J_1 < 0$ et $J_2 > -J_1/3$. Les sites d'un même sous-réseau sont de même couleur et portent le même numéro. Les quatre hexagones non équivalents sont également numérotés. Les 6 spins de chaque hexagone sont dans un plan : on a représenté en pointillés le plan des spins 1 à 6 de l'hexagone 1.

Encore une fois les liens ferro et antiferro sont optimisés au sens où $J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j < 0$ pour toutes les paires de sites (i, j) en interaction.

Le polyèdre qui s'appuie sur les douze directions du paramètre d'ordre est appelé *cuboctaèdre* et on notera donc cet ordre de Néel de façon abrégée *cuboc*. L'ensemble de ces résultats est représenté dans le plan $J_1 - J_2$ (Fig. 2.5).

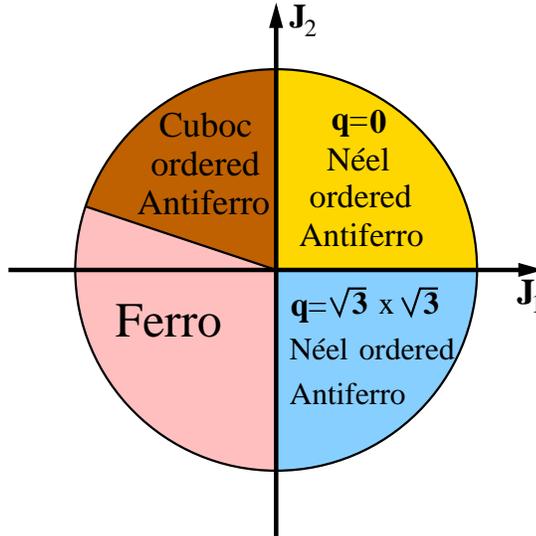


FIG. 2.5 – Diagramme de phase classique à température nulle du modèle de Heisenberg $J_1 - J_2$ (2.1) sur le réseau kagomé.

2.2 Symétries brisées dans la phase cuboc

En plus des phases déjà connues pour le modèle classique $J_1 - J_2$ (2.1) sur le réseau kagomé, nous avons trouvé à $T = 0$ un nouvel ordre de Néel à 12 sous réseaux qu'on décrit plus précisément.

2.2.1 Schéma de brisure

On commence par déterminer le groupe de symétrie du paramètre d'ordre, anticipant que la nature de la brisure de symétrie nous sera utile pour décrire le spectre du Hamiltonien quantique (Sec. 3.2).

Il est facile de se convaincre (Fig. 2.4) que le groupe de symétrie d'un cuboctaèdre est simplement le groupe du cube, soit $\mathcal{O}_h = \mathcal{O} \times \{Id, i\} = \{\mathcal{O}, \mathcal{O} \times i\}$, qui comprend les 24 isométries positives du groupe \mathcal{O} , et 24 isométries négatives, obtenues de $\mathcal{O} \times i$, avec Id l'identité et i l'inversion.

Le groupe \mathcal{O} contient, en plus de l'identité, six rotations C_4 et trois C_2 autour des axes perçant les centres de faces opposées (Fig. 2.6), huit C_3 autour des diagonales intérieures et six C_2 autour des axes liant les milieux des arêtes.

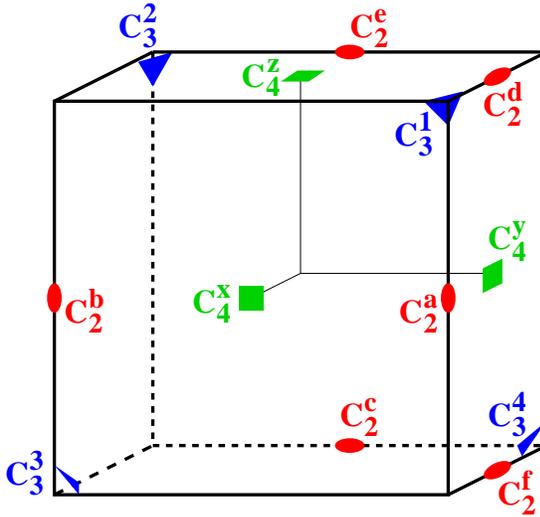


FIG. 2.6 – Les treize axes de symétrie du cube : on dénombre 3 axes quaternaires $C_4^{x,y,z}$ (en vert), 4 axes ternaires $C_3^{1,2,3,4}$ (en bleu) et 6 axes binaires $C_2^{a,b,c,d,e,f}$ (en rouge).

On souligne enfin que l'inversion s'applique aux spins (c'est le renversement du temps) et pour lever toute ambiguïté avec l'inversion dans l'espace réel, i sera appelé *spin-flip* dans la suite.

Le groupe de symétrie $O(3) = SO(3) \times \{Id, i\}$ du Hamiltonien classique est donc

brisé dans la phase *cuboc* selon

$$O(3) \rightarrow \mathcal{O}_h \quad (2.5)$$

2.2.2 Brisure de symétrie chirale

Attardons-nous maintenant sur l'opération de spin-flip : on reprend le paramètre d'ordre de la figure (2.4) et on lui applique i .

Après rotation globale on remarque que l'on a obtenu le cuboctaèdre image dans un miroir du cuboctaèdre de départ (Fig. 2.7) et donc aucune rotation globale ne permet de faire coïncider les labels des deux paramètres d'ordre, à l'image des deux formes énantiomères d'une molécule possédant un Carbone asymétrique.

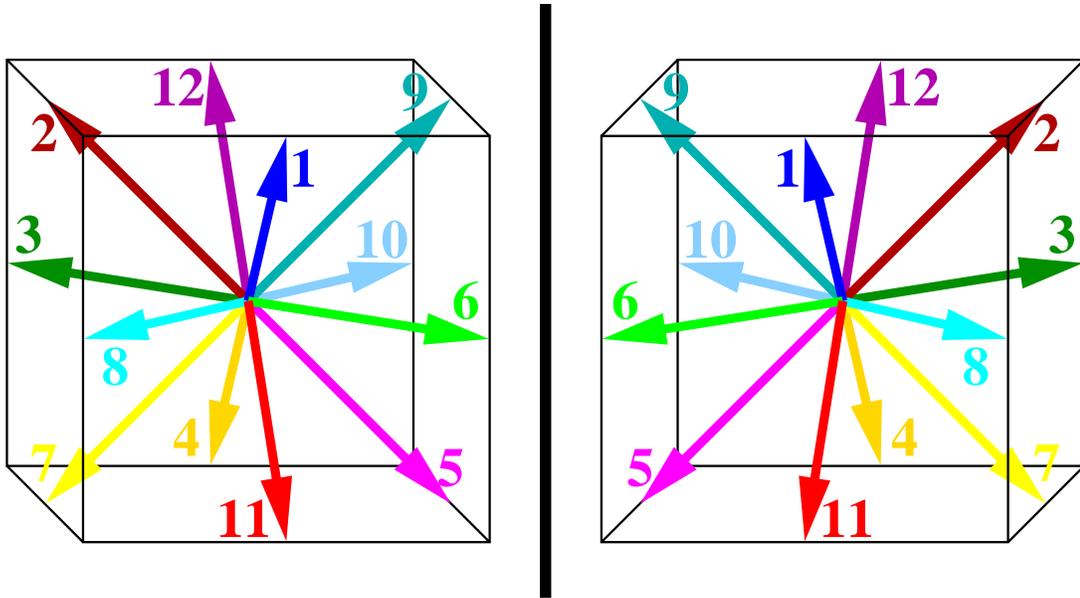


FIG. 2.7 – Un paramètre d'ordre et son image par spin-flip i : après rotation globale des 12 sous-réseaux on remarque que les deux objets sont images l'un de l'autre dans un miroir (repéré par un trait plein). Aucune rotation globale ne permet de superposer les deux paramètres d'ordre.

La conséquence directe est que l'ensemble des paramètres d'ordre *cuboc* se scinde naturellement en deux classes, le spin-flip seul autorisant le passage d'une classe à l'autre, comme dans le modèle d'Ising : en plus de la brisure de symétrie continue $SO(3) \rightarrow \mathcal{O}$, le spin-flip est donc à l'origine d'une brisure de symétrie ²

²Il est clair que la non-coplanarité des sous réseaux est ici essentielle. En fait, dans le cas d'un paramètre d'ordre planaire on peut toujours trouver une rotation globale des spins en dehors du plan équivalente au spin-flip, *i.e.* le spin-flip n'engendre *jamais* de brisure \mathbb{Z}_2 lorsque le paramètre d'ordre est planaire.

discrète, de type \mathbb{Z}_2 .

On construit maintenant le paramètre d'ordre, au sens de Landau, associé à la brisure de symétrie \mathbb{Z}_2 : l'analogie avec les formes énantiomères montre qu'un cuboctaèdre et son image dans un miroir sont les formes "droite" et "gauche" d'un solide tridimensionnel et donc c'est une chiralité qui différencie les deux images.

Considérons en effet la chiralité scalaire sur un triangle élémentaire Δ du réseau kagomé, *i.e.*

$$\sigma_{\Delta} = \sqrt{2} \mathbf{S}_i \wedge \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k \quad (2.6)$$

où (i, j, k) labellent les trois sites d'un triangle dans le sens des aiguilles d'une montre.

A $T = 0$, pour le paramètre d'ordre de la figure 2.4, on remarque (Fig. 2.8) que $\sigma_{\Delta} = +1$ (resp. -1) sur les triangles pointe en haut (resp. pointe en bas). D'autre part, le spin-flip échange trivialement les $+$ et les $-$ sur la figure 2.8, d'après (2.6)³.

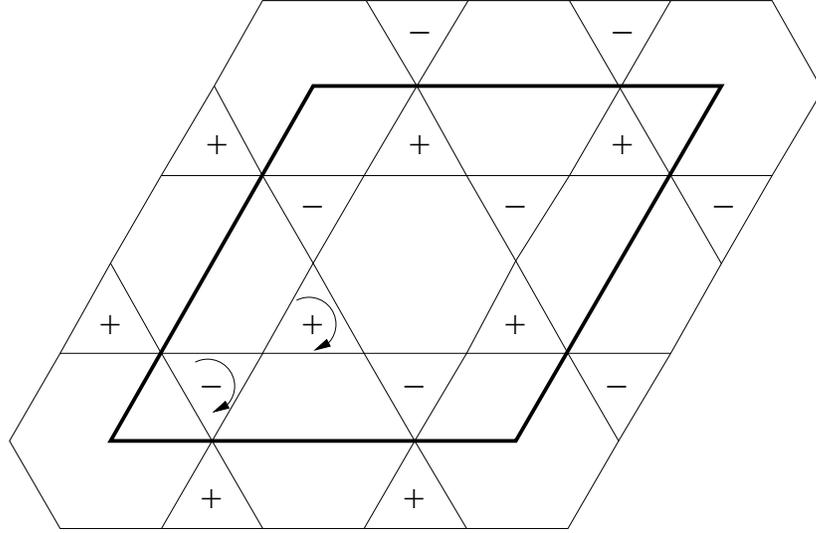


FIG. 2.8 – Chiralité scalaire σ_{Δ} calculée sur le paramètre d'ordre de la figure 2.4.

On définit donc naturellement la chiralité scalaire alternée

$$m_{\sigma} = \frac{3}{2N} \sum_{\Delta} (-1)^{\alpha_{\Delta}} \sigma_{\Delta}$$

³Poursuivant l'analogie avec le modèle d'Ising, on peut définir une variable locale réellement \mathbb{Z}_2 , *i.e.* même à $T > 0$, en définissant $\sigma_{\Delta} = \text{sign}(\mathbf{S}_i \wedge \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k)$. Avec cette définition on accroît cependant de manière artificielle les fluctuations de σ_{Δ} lorsque les trois spins sont quasiment planaires, *i.e.* lorsque $\mathbf{S}_i \wedge \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k \simeq 0$. On définit donc plutôt une variable \mathbb{Z}_2 molle $\sigma_{\Delta} \in [-1, +1]$, comme en (2.6).

où la somme s'étend sur les $2N/3$ triangles du réseau kagomé avec $\alpha_\Delta = 0$ (resp. 1) sur les triangles pointe en haut (resp. pointe en bas).

On a alors construit le paramètre d'ordre associé à la brisure de symétrie \mathbb{Z}_2 , qu'on appellera aussi brisure de symétrie chirale. Par analogie avec l'aimantation des sous-réseaux, qui est le paramètre d'ordre associé à la brisure de $SO(3)$, on appellera m_σ l'aimantation \mathbb{Z}_2 .

2.3 Théorème de Mermin-Wagner

Nous avons montré (Sec. 2.2) que les groupes $SO(3)$ et $\{Id, i\} \sim \mathbb{Z}_2$ étaient tout deux brisés dans la phase *cuboc* selon (2.5). Cependant $SO(3)$ est un groupe *continu* tandis que \mathbb{Z}_2 est *discret* et les brisures de ces deux types de symétrie sont de nature très différentes.

Qualitativement on peut comprendre qu'il soit fondamentalement plus difficile de briser une symétrie continue qu'une symétrie discrète, en abaissant la température par exemple.

Pour se fixer les idées on considère le Hamiltonien de Heisenberg ferromagnétique sur le réseau carré pour des spins à n composantes :

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j,$$

dont le groupe de symétrie est $O(n)$.

Pour $n = 1$ on retrouve le modèle d'Ising, prototype des systèmes à symétrie discrète (en l'occurrence la symétrie de spin-flip avec $O(1) = \mathbb{Z}_2$). A partir du fondamental ferromagnétique ordonné à $T = 0$ on construit les excitations à partir de flips de spins individuels et leur énergie vaut donc au moins l'énergie de retournement d'un spin dans son champ local⁴ : les excitations sont gappées avec un gap d'ordre J la constante d'échange. Cette échelle d'énergie microscopique fixe la température de transition de restauration de la symétrie \mathbb{Z}_2 du Hamiltonien à $T_c = \mathcal{O}(J)$.

Pour $n \geq 3$ le groupe de symétrie $O(n) = \mathbb{Z}_2 \times SO(n)$ du Hamiltonien est continu. La différence fondamentale avec le modèle d'Ising vient de ce qu'il n'existe plus d'échelle d'énergie typique des premières excitations autour du fondamental ordonné ferro à $T = 0$. En effet les rotations locales infinitésimales, moins brutales que le retournement d'un spin, sont maintenant autorisées. Plus précisément les excitations de plus basse énergie sont des ondes de spin de longueur d'onde $\lambda \sim L$,

⁴Plus précisément, retourner un spin seul dans une configuration ordonnée coûte une énergie $\delta E_{flip} = 2z = 8$, avec z le nombre de plus proches voisins sur le réseau carré. Lorsque la température augmente, le retournement d'un nombre croissant $n_{flip}(T)$ de spins isolés coûte une énergie $\Delta E = n_{flip}(T) \delta E_{flip} = \mathcal{O}(n_{flip}(T))$. Une solution qui peut être moins coûteuse en énergie consiste à agréger les défauts en domaines homogènes dans lesquels tous les spins sont retournés. Le coût en énergie d'un domaine unique contenant les $n_{flip}(T)$ défauts est en effet entièrement localisée à sa frontière et croît donc seulement comme sa surface $\Delta E_{domaine} = \mathcal{O}(\sqrt{n_{flip}(T)})$.

la taille linéaire du réseau : chaque spin dévie de sa direction d'équilibre d'un angle $\sim 1/L$. A la limite thermodynamique la déviation est nulle et donc ces excitations ne coûtent aucune énergie : ce sont les modes de Goldstone associés à la brisure de la symétrie continue $SO(n)$. Il y a donc des états excités accessibles dès les températures infinitésimales ce qui conduit à prédire que la restauration de la symétrie $SO(n)$, continue pour $n \geq 2$, peut avoir lieu dès $T = 0$ ⁵.

C'est donc l'existence d'excitations *non gappées*, *i.e.* les modes de Goldstone, qui différencie essentiellement la brisure d'une symétrie continue d'une brisure de symétrie discrète.

La figure 2.9 montre l'importance de ces fluctuations de grande longueur d'onde dans la restauration progressive de $SO(3)$ dans la phase *cuboc*.

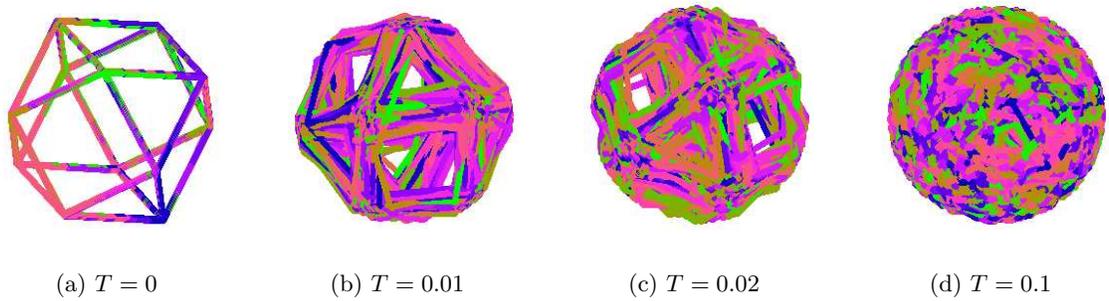


FIG. 2.9 – Instantané du paramètre d'ordre *cuboc* à différentes températures. L'échantillon simulé a une taille linéaire $L = 20$ pas du réseau de Bravais ($N = 3L^2 = 1200$ spins), avec $J_2/|J_1| = 0.5$. On prend la dernière configuration de la simulation et on regroupe les spins par groupes de 12 selon la maille de la phase *cuboc* (Fig. 2.4) : on trace ensuite le cuboctaèdre qui s'appuie sur les douze spins locaux avec une couleur qui dépend de la position de la maille sur le réseau. Pour référence on donne la configuration parfaitement ordonnée obtenue par minimisation directe du Hamiltonien à $T = 0$ (Fig. 2.9(a)). Les autres paramètres d'ordre sont obtenus par simulation Monte-Carlo .

La brisure de $SO(3)$ est plus complexe que dans le cas ferromagnétique puisque l'aimantation totale est nulle, même à $T = 0$. Cependant le raisonnement ci-dessus s'étend naturellement à la phase *cuboc* puisqu'il ne fait référence qu'au groupe brisé et non au paramètre d'ordre associé à la brisure : plutôt que d'observer la perturbation de l'alignement des spins dans le cas ferromagnétique, on s'intéresse donc simplement à la disparition de l'ordre *cuboc*⁶. A mesure que la température augmente (Fig. 2.9(a), 2.9(b) et 2.9(c)) on note la persistance d'un ordre *cu-*

⁵Le cas $n = 2$ est pathologique : puisque le système est critique à toute température $T < T_{KT}$, la température de la transition de Kosterlitz-Thouless, comme on le rappellera dans la section 2.6.2.

⁶En fait on définira un référentiel local (Sec. 3.5) dont l'axe \mathbf{z}_i au site i pointe dans la direction du spin local. Avec ce changement de jauge l'ordre *cuboc* est mappé sur un état ferromagnétique : on peut alors étendre sans modification la discussion du cas ferromagnétique à la phase *cuboc* .

boc local tandis que l'alignement des structures locales à 12 spins est de plus en plus perturbé, jusqu'à obtention d'une configuration invariante par rotation (Fig. 2.9(d)) : ce sont bien les fluctuations de grande longueur d'onde qui restaurent $SO(3)$ ⁷.

Le théorème de Mermin-Wagner [58, 22] prouve et généralise la conjecture précédente : pour un Hamiltonien à symétrie *continue* et dont les interactions sont à courte portée, qu'il soit classique ou quantique, la symétrie ne peut être brisée qu'à $T = 0$ en dimension $d \leq 2$.

En revanche le théorème ne dit rien des brisures des symétries *discrètes*, et pour cause : avec le modèle d'Ising évoqué plus haut nous avons un exemple de symétrie discrète brisée à température finie en dimension 2, mais le même modèle en dimension 1 ne s'ordonne qu'à température nulle.

Le rôle de la dimension Pour comprendre qualitativement l'apparition de la dimension du réseau dans le théorème de Mermin-Wagner on peut reprendre le modèle de Heisenberg ferromagnétique à symétrie $O(n)$: il est clair que plus la dimension du réseau (et donc sa connectivité) est grande, plus le champ local est important. A mesure que la dimension augmente les spins sont donc de plus en plus contraints et leurs fluctuations de plus en plus coûteuses : à la limite $d \rightarrow \infty$ on retrouve le champ moyen qui néglige complètement les fluctuations.

Plus quantitativement le modèle sigma non-linéaire donne à l'ordre d'une boucle une renormalisation de l'aimantation [8] de l'ordre de $1 - \sigma(T) \sim T \int \frac{dk}{\omega_k}$. La somme sur la première zone de Brillouin est dominée par la contribution des modes proches du mode de Goldstone $\omega_{\mathbf{k}=\mathbf{0}} = 0$, *i.e.* des modes $k \sim 1/L$ avec L la taille linéaire du réseau. Pour des ondes de spin se développant sur un fondamental ferromagnétique, $\omega_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}} \sim k^2$ et donc $1 - \sigma(T) \sim T \int k^{d-3} dk$ qui diverge à la limite thermodynamique en dimension $d \leq 2$ dès que $T > 0$: la basse dimensionalité accroît l'effet des fluctuations et on retrouve sur cet exemple l'absence de brisure de $SO(n)$ pour $n \geq 2$ à température finie en dimension $d \leq 2$.

2.4 Le scénario Ising

Reprenons le cas de la phase *cuboc* à $T = 0$ et augmentons la température : le théorème de Mermin-Wagner assure que les ondes de spin restaurent la symétrie $SO(3)$ dès les températures infinitésimales mais il ne dit rien de la brisure de symétrie chirale \mathbb{Z}_2 .

Cependant le scénario d'une transition continue dans la classe d'universalité du modèle d'Ising à deux dimensions émerge naturellement en remarquant qu'à température finie, une hypothèse raisonnable pour la transition chirale, le système est invariant sous $SO(3)$, d'après le théorème de Mermin-Wagner. La symétrie

⁷Le point critique associé à la brisure de $SO(3)$ n'est défini qu'à la limite thermodynamique. La persistance de l'ordre *cuboc* à $T > 0$ est un effet de taille *finie*.

chirale \mathbb{Z}_2 est la seule symétrie brisée à température finie, et la transition chirale est donc associée au même changement de symétrie que la transition critique du modèle d'Ising en deux dimensions.

A l'appui de ce scénario on trouve deux exemples de brisure de symétrie \mathbb{Z}_2 dans la classe Ising 2D pour des Hamiltoniens de Heisenberg :

- Dans le modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau carré pour $J_2 > J_1/2$ le fondamental à $T = 0$ est un ordre de Néel à quatre sous-réseaux correspondant aux deux milieux de côté dégénérés $\mathbf{q} = (0, \pi)$ et $(\pi, 0)$ [17]. On peut voir cet ordre comme deux configurations de Néel colinéaires habituelles entre seconds voisins. L'énergie ne dépend pas de l'angle entre les deux aimantations alternées et il existe donc une famille continue d'états fondamentaux dégénérés à $T = 0$. A basse température les fluctuations sélectionnent les configurations pour lesquelles les deux aimantations alternées sont colinéaires [32] : cette sélection entropique d'un ordre par le désordre [89] peut donner deux configurations colinéaires équivalentes du point de vue des fluctuations, correspondant à la sélection d'un des deux vecteurs d'onde dégénérés $\mathbf{q} = (0, \pi)$ ou $\mathbf{q} = (\pi, 0)$. La symétrie \mathbb{Z}_2 entre les deux vecteurs d'onde est restaurée à température finie par une transition continue dans la classe d'universalité du modèle d'Ising à deux dimensions [93, 16].
- Dans le modèle $J_1 - J_3$, toujours sur le réseau carré [54, 12], le fondamental a un ordre spiral incommensurable pour $J_3 > J_1/4$ associé à l'un des deux vecteurs d'onde (q, q) et $(q, -q)$, où $q = \pi$ pour $J_3 = J_1/4$ (on retrouve alors l'ordre de Néel colinéaire) et q décroît de façon monotone jusqu'à atteindre $\pi/2$ dans la limite $J_3/J_1 \rightarrow \infty$. En fait les spirales de vecteur d'onde (q, q) et $(q, -q)$ sont dégénérées à $T = 0$ et les fluctuations thermiques, ou quantiques [76], ne sélectionnent aucun des deux ordres. Encore une fois la symétrie \mathbb{Z}_2 entre les deux vecteurs d'onde est restaurée à température finie par une transition continue, très probablement dans la classe d'universalité Ising 2D [12].

Dans ces deux exemples le scénario intuitif d'une transition Ising pour restaurer la symétrie \mathbb{Z}_2 est donc réalisé. Cependant, ce résultat n'est *à priori* pas du tout évident : le Hamiltonien de départ couple en effet les spins, et non les variables \mathbb{Z}_2 locales directement, et décrit à basse température une physique de basse énergie *non gappée*, à l'opposé du modèle d'Ising.

A la transition de restauration de la symétrie \mathbb{Z}_2 des modèles précédents il semble donc que l'on ait perdu toute trace des variables *continues* de spin utilisées pour définir les variables \mathbb{Z}_2 locales, au moins en ce qui concerne la physique aux longues distances. En particulier les couplages probablement engendrés par le flot de renormalisation entre les variables de spin et les variables \mathbb{Z}_2 locales sont tous non pertinents, et à l'approche asymptotique du point fixe le Hamiltonien effectif de basse énergie engendré par le flot est un simple Hamiltonien d'Ising à

deux dimensions dans les variables \mathbb{Z}_2 .

On se demande maintenant dans quelle mesure le scénario Ising décrit également la brisure de symétrie chirale dans la phase *cubic*.

2.5 La transition chirale est faiblement du premier ordre

On veut ici observer la restauration éventuelle de la symétrie chirale \mathbb{Z}_2 à température finie, et le cas échéant déterminer la nature de la transition. Le bon outil est la simulation Monte-Carlo dont on décrit brièvement l'algorithme de Metropolis.

2.5.1 Algorithme de Metropolis

Un spin est un vecteur unitaire représenté par deux variables (z, φ) avec $z \in [-1, 1]$ et $\varphi \in [0, 2\pi[$ (Fig. 2.10). A chaque itération Monte-Carlo on choisit

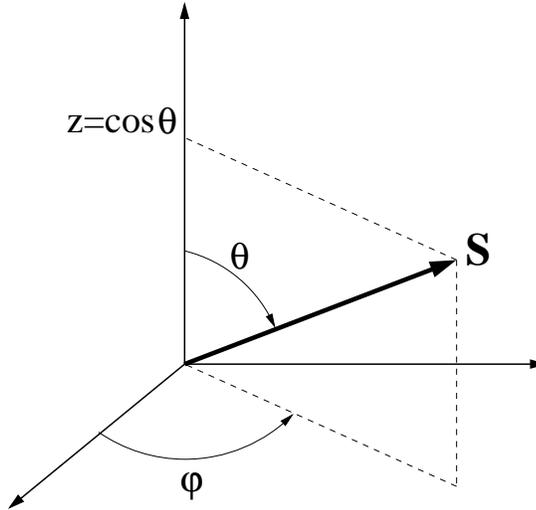


FIG. 2.10 – Paramétrisation d'un spin \mathbf{S} classique en variables (z, φ) . Si z et φ sont distribués uniformément dans $[-1, 1]$ et $[0, 2\pi[$ respectivement, alors \mathbf{S} est distribué uniformément sur la sphère unité.

un spin au hasard qu'on tourne de $(\delta z, \delta \varphi)$, où δz et $\delta \varphi$ sont tirés uniformément avec $|\delta z| \leq 2\sqrt{T}$ et $|\delta \varphi| \leq 2\pi\sqrt{T}$ ⁸ On calcule alors la variation de l'énergie to-

⁸L'équipartition de l'énergie appliquée au Hamiltonien $\propto \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ quadratique en z et φ permet en effet d'anticiper que les fluctuations des deux variables autour de leur valeur d'équilibre sont $\langle (\delta z)^2 \rangle \sim \langle (\delta \varphi)^2 \rangle \sim T$. Le choix de $\delta z, \delta \varphi \leq \sqrt{T}$ permet de limiter les sauts non pertinents dans l'espace des phases, *i.e.* associés à une probabilité d'acceptation très faible. En fait ce choix assure un taux d'acceptation quasiment indépendant de la température, ici de l'ordre de 20 à 30%, typiquement.

tale δE associée à ce mouvement local : on accepte la nouvelle configuration si $\delta E < 0$, ou avec une probabilité $e^{-\beta\delta E}$ si $\delta E > 0$.

2.5.2 Erreur statistique

À la limite d'un nombre *infini* d'itérations Metropolis l'ensemble des configurations de l'espace des phases est parcouru avec la distribution d'équilibre, *i.e.* la distribution de Boltzmann, et la moyenne thermodynamique d'une observable A (notée $\langle A \rangle$) est simplement sa moyenne sur les itérations successives (notée \overline{A}). Pour un nombre *fini* d'itérations l'erreur commise en identifiant les deux moyennes provient principalement de ce que deux configurations successives ne diffèrent que par la rotation locale d'un spin et sont donc très corrélées : il faut un nombre fini d'itérations pour décorrélérer une configuration donnée.

On estime que pour obtenir deux valeurs successives décorrélées d'une observable il faut qu'en moyenne chaque spin ait été tourné au moins une fois : on mesure donc les observables toutes les N itérations microscopiques ce qui constituera l'unité de temps Monte-Carlo, notée MCS dans la suite (Monte Carlo Step).

Si τ_A est le temps typique de relaxation⁹ de l'observable A alors l'erreur commise en confondant la moyennes statistique sur N_{MCS} itérations avec la moyenne thermodynamique est [88]

$$(\overline{A} - \langle A \rangle)^2 \sim \frac{2\tau_A}{N_{MCS}} (\overline{A^2} - \overline{A}^2)$$

pour $N_{MCS} \gg \tau_A$, *i.e.* tout se passe comme si on moyennait sur un nombre effectif de configurations indépendantes $N_{MCS}/2\tau_A < N_{MCS}$.

En pratique on s'assure que $N_{MCS} \gg \tau$, où τ est le temps de relaxation de l'observable la plus lente, en général le paramètre d'ordre de la transition.

Une simulation Monte-Carlo typique commence pour nous par 2 à 3 τ itérations pendant lesquelles aucune mesure n'est effectuée puisque les configurations sont encore très corrélées à la configuration de départ arbitraire.

Après cette thermalisation on estime qu'on a obtenu une configuration d'équilibre des spins : les itérations suivantes échantillonnent l'espace des phases autour de la région d'équilibre, *i.e.* dans les régions qui donnent la contribution dominante aux moyennes thermodynamiques des observables.

Les mesures proprement dites sont ensuite effectuées sur 10 à 100 τ itérations selon la taille de l'échantillon.

2.5.3 Exosant dynamique - dynamique vitreuse

Prenons le modèle d'Ising à deux dimensions : à la température T les spins Ising sont corrélés sur toutes les échelles de longueur $\leq \xi(T)$. Pour obtenir deux

⁹Plus précisément, si pour une distribution gaussienne de A , *i.e.* loin des transitions critiques, la décorrélation de A est exponentielle et $\overline{A_i A_{i+\Delta}} - \overline{A}^2 \sim \exp(-\Delta/\tau_A)$.

valeurs statistiquement décorréelées de l'aimantation totale il faut donc flipper des clusters de taille $\sim \xi(T)$ qui diverge à la transition : il faut donc un temps infiniment long à la limite thermodynamique pour décorréler deux mesures successives du paramètre d'ordre à la transition. En général, pour une transition du deuxième ordre, le temps de relaxation τ du paramètre d'ordre diverge comme $\tau \sim \xi^z$ à la transition, avec z l'exposant critique dynamique ($z = 2$ pour le modèle d'Ising en dimension 2), c'est le phénomène de ralentissement critique.

Pour estimer τ dans la phase *cuboc*, on mesure la relaxation du paramètre d'ordre de la transition, *i.e.* la chiralité scalaire m_σ (Fig. 2.11).

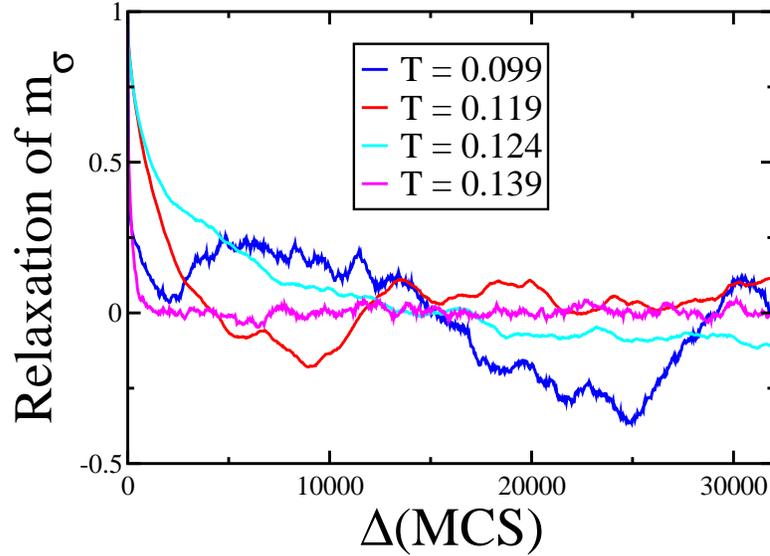


FIG. 2.11 – Relaxation de la chiralité scalaire la température de transition est estimée à $T_0 \simeq 0.12$ sur cet échantillon.

On distingue nettement deux comportements : aux températures $T \lesssim T_0 \simeq 0.12$ la relaxation est très lente et la chiralité scalaire moyenne décorrèle sur des échelles de temps $\tau \sim 30000$ MCS, tandis qu'à plus haute température le paramètre décorrèle typiquement sur $\tau \sim 1$ MCS.

Bien que l'on ne mesure pas directement la décorrélation des spins, la très lente relaxation de la chiralité à basse température est clairement réminiscente de la relaxation lente des spins, *i.e.* de la grande densité d'états de basse énergie commune aux systèmes frustrés : à basse température la contribution dominante à la fonction de partition provient alors d'une région *étendue* de l'espace des phases, que la marche aléatoire de Metropolis met du temps (Monte-Carlo) à parcourir. À $T = 0.099$ par exemple, on distingue trois fréquences d'oscillation dans la courbe de relaxation, *i.e.* trois échelles de temps de relaxation, qui rappellent la relaxation lente des verres de spin.

On parle d'ailleurs de relaxation vitreuse pour les spins frustrés, ce qui paraît

légitime dans la phase *cuboc* à basse température puisqu'on mesure un exposant dynamique $z \simeq 4.5$ très éloigné du modèle d'Ising et plus proche des verres de spins ($z \sim 6 - 7$).

La comparaison s'arrête là puisque la relaxation lente dans les verres est liée au désordre d'interaction qui désordonne le paysage d'énergie. Dans les systèmes de spins frustrés, comme dans la phase *cuboc*, il n'y a en revanche aucun désordre : c'est la frustration elle-même qui amène un grand nombre d'excitations à des énergies proches de celle du fondamental.

2.5.4 Premiers résultats

On mesure l'énergie et la chiralité scalaire à chaque itération puis on calcule les deux premiers moments des distributions obtenues, soit l'énergie moyenne par spin $\langle e \rangle$ et la chaleur spécifique par spin

$$C/k_B = \frac{N}{(k_B T)^2} (\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2),$$

la chiralité scalaire moyenne par triangle¹⁰ $\langle |m_\sigma| \rangle$ et la susceptibilité chirale par triangle

$$k_B \chi_\sigma = \frac{2N}{3T} (\langle m_\sigma^2 \rangle - \langle |m_\sigma| \rangle^2).$$

On présente sur la figure 2.12 les résultats pour un échantillon de taille linéaire $L = 16$

(soit $N = 3L^2 = 768$ spins) avec $J_1 = -1$ et $J_2 = 0.38$. L'échantillon a été thermalisé durant $2^{19} \simeq 5.10^5$ MCS, puis les moyennes ont été calculées sur $2^{21} \simeq 2.10^6$ MCS.

¹⁰Il est clair que la brisure spontanée de \mathbb{Z}_2 n'a lieu qu'à la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$: à taille finie l'ergodicité ne peut être brisée puisqu'on peut passer d'une configuration de chiralité $m_\sigma = 1$ à une configuration $m_\sigma = -1$ en un nombre fini d'itérations. On en déduit qu'à $T < T_0$ la température de transition, et en champ nul, $\langle m_\sigma \rangle_N = 0$ et la bonne grandeur à calculer, *i.e.* celle qui prend une valeur finie lorsque \mathbb{Z}_2 est brisé, est plutôt $\langle |m_\sigma| \rangle_N \neq 0$ qui converge vers le paramètre d'ordre à la limite thermodynamique $\lim_{N \rightarrow \infty} \langle |m_\sigma| \rangle_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle m_\sigma \rangle_N$. On note que $\langle |m_\sigma| \rangle_N \neq 0$ même dans la phase haute température : on somme en effet les fluctuations autour de $\langle m_\sigma \rangle_N = 0$ et donc $\langle |m_\sigma| \rangle_N \sim \sqrt{\langle m_\sigma^2 \rangle_N} \neq 0$.

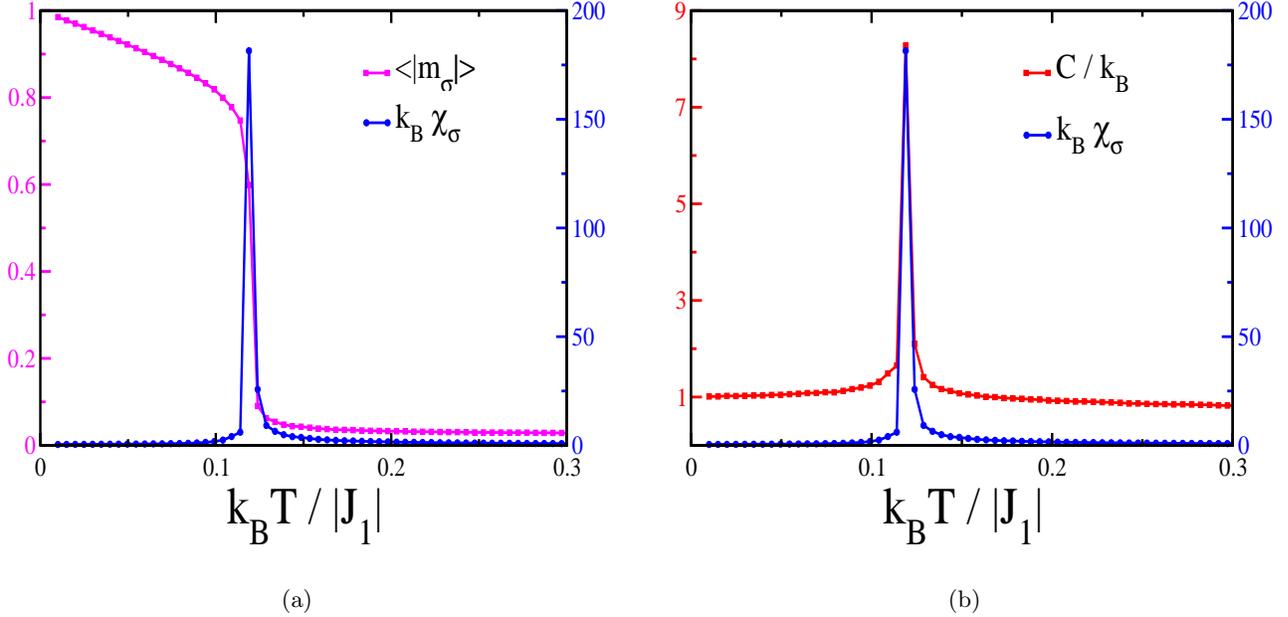


FIG. 2.12 – Simulation Monte-Carlo pour un échantillon de taille linéaire $L = 16$ avec conditions aux limites périodiques, pour $J_2/|J_1| = 0.38$. La température de transition est estimée à $k_B T_0/|J_1| \simeq 0.12$.

A basse température $\langle |m_\sigma| \rangle$ est saturée (Fig. 2.12(a)) ce qui confirme que la symétrie *discrète* chirale est brisée à température finie. De façon cohérente la susceptibilité chirale χ_σ est nulle à basse température : les excitations de chiralité sont gappées comme les excitations du modèle d’Ising à deux dimensions.

D’autre part la chaleur spécifique $C/k_B \rightarrow 1$ lorsque $T \rightarrow 0$ comme prévu pour un modèle $O(3)$. Cette valeur *finie* est réminiscente de la densité *finie* d’états de basse énergie, *i.e.* d’excitations non gappées, comme prévu pour un Hamiltonien de Heisenberg classique.

A mesure que la température augmente, $\langle |m_\sigma| \rangle$ diminue quasiment linéairement d’environ 20% avant d’être brutalement tuée à $T_0 \simeq 0.12|J_1|/k_B$, sans toutefois s’annuler complètement, comme on s’y attendait. A cette même température la susceptibilité associée χ_σ (Fig. 2.12(a)) ainsi que la chaleur spécifique C sont piquées (Fig. 2.12(b)) : il y a bien une transition de restauration de la symétrie chirale à température finie.

Cumulants de Binder Le caractère continu ou discontinu de l’annulation approximative de $\langle |m_\sigma| \rangle$, selon que la transition est du premier ou du second ordre, est évidemment mal défini à taille finie et avec un nombre fini de températures. Une indication sur la nature de la transition chirale est cependant fournie par le moment d’ordre 4 de la distribution d’aimantation.

On définit ainsi le cumulante de Binder¹¹ [44] pour l'aimantation \mathbb{Z}_2

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m_\sigma^4 \rangle}{3 \langle m_\sigma^2 \rangle^2}.$$

Assez loin des transitions, et si le nombre d'itérations N_{MCS} est suffisant, le théorème central limite assure que la distribution normalisée des mesures de $|m_\sigma|$ est gaussienne autour de sa valeur moyenne $\langle |m_\sigma| \rangle$ et de variance $\langle (\Delta|m_\sigma|)^2 \rangle = \frac{3}{2N} k_B T \chi_\sigma$:

$$\mathcal{P}(|m_\sigma|) = \sqrt{\frac{N}{3\pi k_B T \chi_\sigma}} e^{-\frac{N}{3k_B T \chi_\sigma} (|m_\sigma| - \langle |m_\sigma| \rangle)^2}.$$

On en déduit

$$U_4(T) = \frac{2}{3} \frac{\langle |m_\sigma| \rangle^4}{(\langle |m_\sigma| \rangle^2 + \frac{3}{2N} k_B T \chi_\sigma)^2}, \quad (2.7)$$

et donc $0 \leq U_4(T) \leq 2/3$.

Dans la phase ordonnée, $\chi_\sigma \rightarrow 0$ et $\langle |m_\sigma| \rangle = m_0 \neq 0$, dont on déduit $U_4(T < T_0) = 2/3$, tandis que dans la phase haute température $\langle |m_\sigma| \rangle \simeq 0$ donne $U_4(T > T_0) \simeq 0$.

Si la transition chirale est du second ordre, on passe d'une distribution limite à l'autre par une distribution élargie non gaussienne : en admettant que l'on puisse écrire formellement cette distribution comme une gaussienne de largeur infinie (χ_σ diverge), et donc utiliser (2.7), on voit que le cumulante de Binder pour l'aimantation \mathbb{Z}_2 chute de 2/3 à 0 à la transition, en restant circonscrit entre ces deux valeurs limites.

Si maintenant la transition est du premier ordre, les phases ordonnée et désordonnée coexistent à la transition : la distribution des mesures de $|m_\sigma|$ présente deux pics à la transition, l'un centré en $\langle |m_\sigma| \rangle = m_0 \neq 0$ et l'autre en $\langle |m_\sigma| \rangle \simeq 0$ et on ne peut plus utiliser (2.7).

Considérons pour simplifier la distribution thermodynamique en remplaçant les gaussiennes par des distributions delta, et notons p le poids de la distribution de la phase désordonnée, centrée en première approximation en $\langle |m_\sigma| \rangle = 0$.

A la transition $\mathcal{P}(|m_\sigma|) = p \delta(|m_\sigma|) + (1-p) \delta(|m_\sigma| - m_0)$ et donc $U_4(T = T_0) = \frac{2}{3} (1 - \frac{p}{2(1-p)})$. A $T \simeq T_0$, le poids p varie entre 0 et 1 et donc $U_4 \in]-\infty, 2/3]$.

De façon plus réaliste, pour une distribution gaussienne doublement piquée on s'attend donc à ce que U_4 passe de 2/3 à 0 de manière violente, en prenant notamment des valeurs négatives.

¹¹Historiquement le calcul du cumulante de Binder est motivé par l'étude des effets de taille finie à une transition du second ordre : à taille finie L le cumulante est directement une fonction d'échelle $U_4(L, T) = \mathcal{U}_4(L/\xi(T)) = \tilde{\mathcal{U}}_4(|t|L^{1/\nu})$, avec $|t| = |(T - T_c)/T_c|$ et ν l'exposant critique de la longueur de corrélation. En particulier les courbes obtenues à différentes tailles se coupent en T_c à la valeur universelle $\tilde{\mathcal{U}}_4(0)$.

Les premiers résultats semblent plutôt compatibles avec l'hypothèse d'une transition chirale du premier ordre dans la phase *cuboc* à $J_2 = 0.38|J_1|$ (Fig. 2.13) puisque le cumulants de Binder pour l'aimantation \mathbb{Z}_2 devient en effet négatif à la température T_0 .

Une indication supplémentaire est fournie par le cumulants de Binder pour l'énergie

$$V_4 = 1 - \frac{\langle e^4 \rangle}{3 \langle e^2 \rangle^2}.$$

Dans les deux phases la distribution d'énergie est gaussienne centrée en $\langle e \rangle \neq 0$ et de variance $\frac{1}{N}k_B T^2 C \rightarrow 0$. Par analogie avec (2.7) on en déduit que $V_4(T < T_0) = V_4(T > T_0) = 2/3$.

Si la transition chirale est du premier ordre le cumulants de Binder pour l'énergie est minimum à la transition : la distribution d'énergie a deux pics en e_1 et e_2 , les énergies par spin des deux phases à T_0 , et en première approximation

$\mathcal{P}(e) = q \delta(e - e_1) + (1 - q) \delta(e - e_2)$ avec q le poids de la phase 1. En minimisant par rapport à q on trouve $V_4(T_0) = \frac{2}{3} \left(1 - \frac{(e_1/e_2 - e_2/e_1)^2}{8}\right)$.

En revanche, si la transition est critique alors $e_1 = e_2$ et donc V_4 vaut $2/3$ à toute température, même à la transition.

Le résultat de la simulation montre que $V_4(T_0)$ ne diffère quasiment pas de $2/3$, ce qui semble plutôt compatible avec une transition critique ou bien *faiblement* du pre

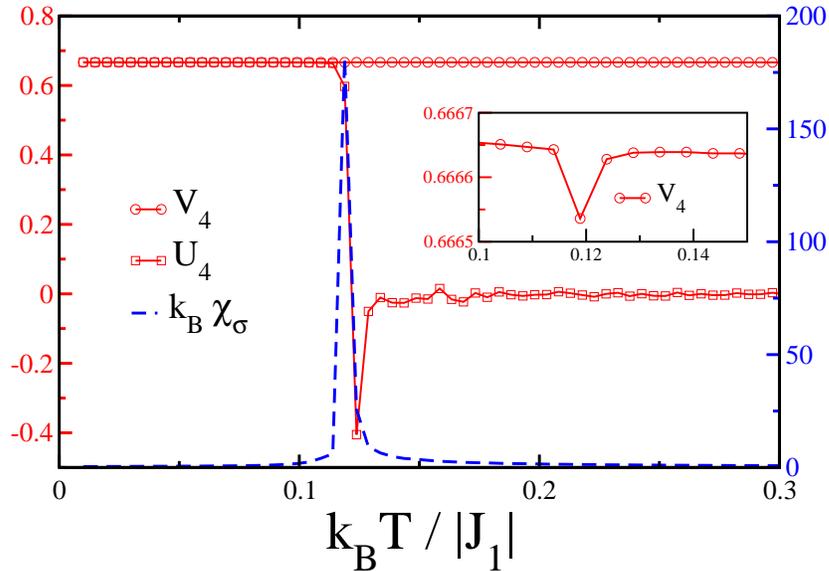


FIG. 2.13 – Cumulants de Binder U_4 (carrés pleins) et V_4 (cercles vides) vs. température pour le même échantillon que sur la figure 2.12. On représente également la susceptibilité chirale χ_σ (pointillés bleus).

Le signal donné par les moments d'ordre 4 des distributions d'énergie et de chiralité scalaire est donc peu concluant. C'est évidemment l'étude des effets de taille sur ces quantités qui permettra de décider entre une transition critique ou faiblement du premier ordre.

Anticipant sur le résultat on commence toutefois par adopter un algorithme Monte-Carlo plus approprié à la simulation d'un échantillon proche d'une transition du premier ordre.

La nécessité d'un tel algorithme est déjà visible sur l'évolution du cumulatif de Binder U_4 avec la température : les oscillations de $U_4(T)$ pour $T \gtrsim T_0$ montrent que la distribution des mesures de $|m_\sigma|$ est peu convergée à ces températures.

L'augmentation du nombre d'itérations N_{MCS} est une solution pour les petits échantillons mais à plus grande taille le temps de calcul devient prohibitif, et motive l'introduction du nouvel algorithme.

2.5.5 Algorithme de trempe parallèle

Transition du premier ordre - métastabilité Si la transition chirale est du premier ordre alors l'énergie de création d'une interface entre les deux phases, de chiralité ordonnée et désordonnée, est *finie* à la transition. La longueur de corrélation chirale $\xi_{\mathbb{Z}_2}(T)$, qu'on définira plus loin (Sec. 2.5.6), est de l'ordre de la taille typique des domaines de chaque phase : elle est contrôlée par la tension de surface, qui est *finie* à la transition, et $\xi_{\mathbb{Z}_2}$ ne diverge donc pas à la température de transition T_0 .

Dans ce scénario les deux phases coexistent à la température de transition T_0 , et le profil d'énergie libre $F(E, T_0)$ présente donc deux minima en E_1 et $E_2 > E_1$, les énergies des phases ordonnée et désordonnée, respectivement. Un échantillon à T_0 relaxe dans un puits du profil ou dans l'autre selon que la transition est approchée depuis $T < T_0$ ou $T > T_0$, *i.e.* $E(T \rightarrow T_0^-) = E_1$ et $E(T \rightarrow T_0^+) = E_2$: l'énergie $E(T)$ présente donc une discontinuité à T_0 de hauteur

$C_{lat} = E_2 - E_1 = T_0(S_2 - S_1) > 0$ la chaleur latente, avec $S_2 - S_1$ le saut d'entropie. Le même raisonnement s'applique au profil $F(m_\sigma, T)$ et on attend donc également une discontinuité de la chiralité scalaire à T_0 .

La discontinuité des dérivées premières de l'énergie libre $F(T)$ signe donc une transition du premier ordre. Elle est cependant mesurée à l'équilibre thermodynamique dont l'établissement peut être long, ce qui est d'une importance cruciale pour les simulations Monte-Carlo .

Dans l'expérience du chauffage d'un échantillon équilibré initialement à $T < T_0$, une fois atteinte la température de transition T_0 , la source doit apporter un énergie C_{lat} pour nucléer un nombre croissant de domaines de taille $\sim \xi_{\mathbb{Z}_2}(T_0)$ dans lesquels la chiralité est nulle, jusqu'à disparition complète de la phase basse température. D'un point de vue cinétique, la nucléation d'une phase dans l'autre

requiert de franchir la barrière d'énergie libre¹² de hauteur ΔF qui sépare les deux minima du profil $F(E, T_0)$: la théorie d'échappement de Kramers montre que les fluctuations thermiques permettent à l'échantillon de passer la barrière en un temps $\tau \propto e^{\beta_0 \Delta F}$, où $\beta_0 = 1/k_B T_0$.

Si la puissance de la source de chaleur est suffisante, on peut donc amener un échantillon de chiralité *ordonnée* à la température $T \gtrsim T_0$: dans ce cas le système n'a pas eu le temps de franchir la barrière pour relaxer dans l'unique puits d'énergie libre minimale (de chiralité nulle) et relaxe encore pendant un temps $\sim \tau$ dans le puits *métastable* de chiralité finie¹³.

La durée de vie *finie* des états métastables peut être observable, comme dans les aimants ferromagnétiques où elle est de l'ordre de la seconde et est responsable des cycles d'hystérésis mesurés dans les courbes d'aimantation.

A l'inverse, dans les verres, si l'origine de la métastabilité est très différente de celle d'une transition du premier ordre (le profil d'énergie libre présente en effet un grand nombre de minima locaux dû au désordre d'interaction), on peut néanmoins lui associer un temps de relaxation vers l'équilibre qui peut atteindre l'âge de l'univers : à l'échelle de l'expérience un verre est un état thermodynamiquement stable.

Conséquence pour les simulations Monte-Carlo De façon analogue, l'existence d'une barrière d'énergie libre au voisinage d'une transition du premier ordre affecte la dynamique Monte-Carlo : le passage d'un puits d'énergie libre à l'autre est rare $\propto e^{-\beta \Delta F}$ et il est très probable que seul le puits d'énergie libre minimale aie été visité après un nombre fini d'itérations Monte-Carlo .

Pour visiter chacun des deux puits avec les probabilités thermodynamiques, et donc échantillonner correctement l'espace des phases, on peut simuler des recuits à température supérieure à la température de transition, suivis de trempes : un échantillon équilibré à $T < T_0$, et piégé dans le puits d'énergie libre minimale (de chiralité finie), est recuit à $T > T_0$ et relaxe dans le puits de chiralité nulle (d'énergie libre minimale pour $T > T_0$), puis trempé à sa température initiale, etc...

Evidemment, pour retrouver les distributions d'équilibre à la limite d'un nombre infini d'itérations Monte-Carlo , il faut respecter le bilan détaillé, ce que réalise l'algorithme de trempe parallèle.

On commence par effectuer n simulations Metropolis en parallèle à des températures différentes. Après un nombre suffisant d'itérations on a n échantillons équilibrés

¹²La barrière est concave et donc instable : le profil d'équilibre est obtenu en prenant l'enveloppe convexe de $F(E, T_0)$ qui est plate entre E_1 et E_2 (Fig. 2.18).

¹³En considérant la nucléation à $T \gtrsim T_0$ d'une bulle de chiralité nulle et d'énergie libre F_2 , au sein de la phase ordonnée d'énergie libre $F_1 > F_2$, on montre que la barrière d'énergie libre résulte de la compétition entre le gain d'énergie libre en volume dans la bulle *vs.* le coût de l'interface : $\Delta F \propto e_s^3 / \delta f^2$, avec e_s la tension de surface, *i.e.* l'énergie surfacique de création d'une interface entre les deux phases, et $\delta f = f_1 - f_2 > 0$ le gain d'énergie libre volumique dans la bulle.

ayant chacun relaxé dans la cuvette d'énergie libre minimale à la température de simulation.

Une gamme de températures de simulation bien choisie contient la température de transition : les échantillons à basse température ont donc relaxé dans le puits de chiralité finie tandis que les échantillons de plus haute température ont relaxé dans le puits de chiralité nulle.

On propose ensuite un échange entre des paires de configurations : on échange les configurations i et j d'énergie E_i et $E_j = E_i + \delta E_{ij}$, obtenues aux températures adjacentes β_i et $\beta_j = \beta_i + \delta\beta_{ij}$ si $\delta\beta_{ij} \delta E_{ij} < 0$ et avec la probabilité

$$\mathcal{P}_{ij} = e^{-\delta\beta_{ij}\delta E_{ij}}$$

sinon.

Après l'échange on continue les n simulations Metropolis à partir des nouvelles configurations jusqu'à la proposition d'échange suivante.

En adoptant cette probabilité d'échange nous avons donc ajouté un processus de Markov de trempe/recuit entre les différentes simulations menées en parallèle, de telle manière que le processus global, *i.e.* impliquant les n températures, respecte le bilan détaillé.

En pratique la probabilité d'échange n'est appréciable que si $\delta\beta_{ij} \delta E_{ij}$ est petit, *i.e.* les distributions d'énergie aux températures i et j doivent avoir un recouvrement fini.

La transition chirale est du premier ordre On montre sur la figure 2.14(a) un exemple d'histogrammes d'énergie obtenus à partir de l'algorithme de trempe parallèle sur un cluster de $n = 24$ processeurs, pour l'échantillon de la figure 2.12. Le recouvrement important des histogrammes donne ici un taux d'acceptation élevé ($\sim 80\%$).

L'apparition d'un double pic dans la distribution d'énergie aux températures voisines de la température de transition ($0.1207 \leq T \leq 0.1233$) confirme définitivement le caractère premier ordre de la transition chirale à $J_2 = 0.38|J_1|$ et l'écart entre les deux maxima donne la chaleur latente de la transition chirale. De façon cohérente, à ces mêmes températures la distribution de $|m_\sigma|$ est doublement piquée (Fig. 2.14(b)), à chiralité finie et à chiralité nulle¹⁴

¹⁴En définissant l'aimantation \mathbb{Z}_2 comme $\langle |m_\sigma| \rangle$ nous avons replié l'un sur l'autre les deux pics de chiralité finie et opposée.

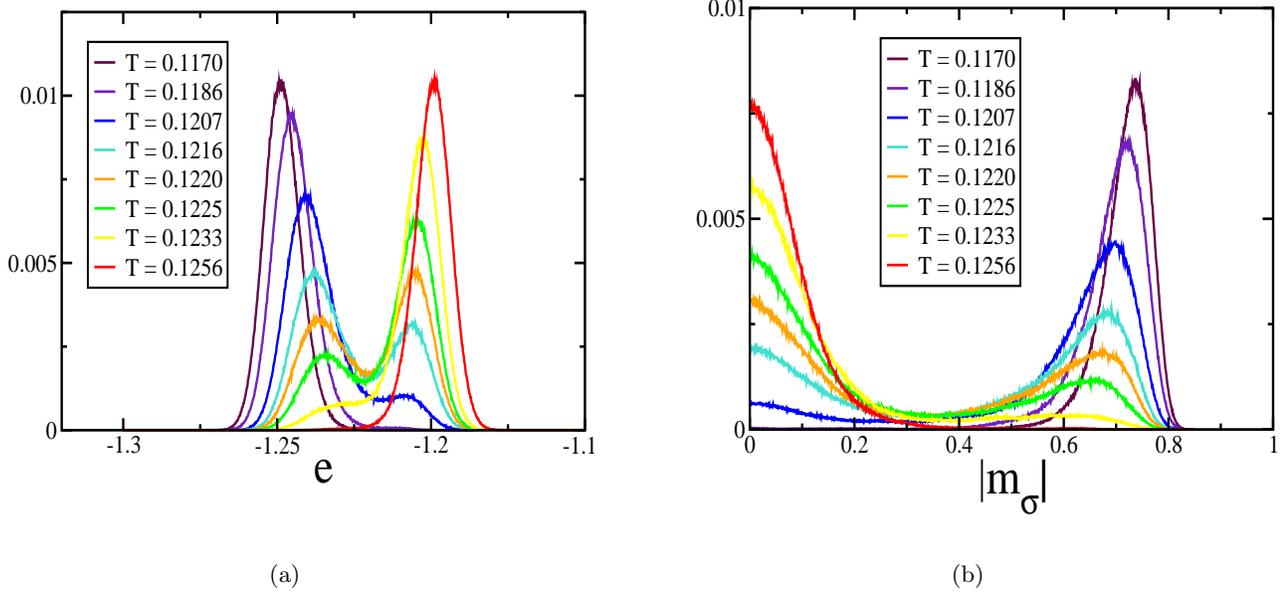


FIG. 2.14 – Simulation Monte-Carlo avec l'algorithme de trempe parallèle pour le même échantillon qu'à la figure 2.12. Le nombre total d'itérations par spin est inchangé mais tous les 16 MCS on propose un échange entre paires de configurations équilibrées à des températures adjacentes. Pour plus de lisibilité on ne présente qu'une partie des 24 histogrammes normalisés d'énergie (Fig. 2.14(a)) et de chiralité (Fig. 2.14(b)).

2.5.6 Effets de taille finie

Puisque la transition chirale est du premier ordre, à la limite thermodynamique les dérivées premières de l'énergie libre, comme l'énergie $\langle e \rangle$ ou la chiralité scalaire $\langle m_\sigma \rangle$, doivent être discontinues à T_0 , tandis que les dérivées secondes associées, la chaleur spécifique $C(T)$ et la susceptibilité chirale $\chi_\sigma(T)$, sont des distributions delta.

Comme pour les transitions critiques, la divergence des observables est frustrée par la taille *finie* des échantillons simulés : pour l'observable $X(T)$, la distribution delta attendue à la limite thermodynamique devient un pic de hauteur $X_{max}(L)$ et de largeur finies. Lorsque $L \rightarrow \infty$, $X_{max}(L)$ diverge tandis que la largeur du pic tend vers 0.

D'autre part, à taille finie, on s'attend à ce que les différentes observables ne soient pas piquées simultanément. Cependant les températures des différents pics $T_{max}(X, L)$ doivent tendre vers l'unique température de transition T_0 à la limite thermodynamique.

Puisque la longueur de corrélation $\xi_{\mathbb{Z}_2}(T_0)$ est finie, il n'y a pas d'invariance d'échelle à la transition et les exposants critiques ne sont pas définis : le seul

exposant qui contrôle l'approche asymptotique de la limite thermodynamique est la dimension d du réseau, et pour $L \gg \xi_{Z_2}(T_0)$ on montre que [7]

$$T_{max}(X, L) = T_0 + \mathcal{O}(L^{-d}), \quad (2.8)$$

$$X_{max}(L) = \mathcal{O}(L^d), \quad (2.9)$$

avec $X = C$ ou χ_σ par exemple.

La méthode de repondération Nous avons donc besoin de connaître précisément l'évolution des différentes observables avec la température. On peut évidemment effectuer plusieurs simulations Monte-Carlo mais pour diminuer le temps de calcul on utilisera la méthode de repondération [28, 90] : dans l'ensemble canonique la mesure de l'énergie d'un système à température T_0 donne E avec une probabilité

$$P_{\beta_0}(E) = \frac{1}{Z(\beta_0)} W(E) e^{-\beta_0 E}$$

avec $\beta_0 = 1/k_B T_0$, $Z(\beta_0) = \sum_E W(E) e^{-\beta_0 E}$ la fonction de partition, et $W(E)$ le nombre d'états d'énergie E . On peut remarquer qu'à la température inverse $\beta \neq \beta_0$ on a

$$P_\beta(E) = \frac{Z(\beta_0)}{Z(\beta)} P_{\beta_0}(E) e^{-\Delta\beta E} \quad (2.10)$$

où $\Delta\beta = \beta - \beta_0$.

Formellement la connaissance exacte de la distribution $P_{\beta_0}(E)$ permet donc de calculer la moyenne thermodynamique de l'observable X à toute température β par

$$\langle X \rangle_\beta = \frac{\sum_E X(E) P_{\beta_0}(E) e^{-\Delta\beta E}}{\sum_E P_{\beta_0}(E) e^{-\Delta\beta E}} = \frac{\langle X e^{-\Delta\beta E} \rangle_{\beta_0}}{\langle e^{-\Delta\beta E} \rangle_{\beta_0}}.$$

A priori, la moyenne statistique \overline{X}_β peut donc être calculée à toute température β par *repondération* d'une seule simulation Monte-Carlo à la température β_0 :

$$\overline{X}_\beta = \frac{\overline{X e^{-\Delta\beta E}}_{\beta_0}}{e^{-\Delta\beta E}_{\beta_0}} \xrightarrow{N_{MCS} \rightarrow \infty} \langle X \rangle_\beta. \quad (2.11)$$

Comme d'habitude, pour un nombre d'itérations N_{MCS} fini la moyenne statistique \overline{X}_β ne coïncide pas avec la moyenne thermodynamique $\langle X \rangle_\beta$: l'erreur statistique (Sec. 2.5.2) entre les deux moyennes à la température β_0 de la simulation initiale est propagée et amplifiée par repondération.

On note en effet sur (2.11) que la réalisation $X(E)$ de la chaîne de Markov initiale à β_0 est multipliée par un facteur $f_N = e^{-\Delta\beta E} \sim e^{N\Delta\beta}$ (aux températures qui nous concernent $E < 0$ typiquement). En particulier si cette réalisation est purement une erreur statistique, *i.e.* que $X(E)$ est un évènement rare de probabilité $P_{\beta_0}(X) = 0$ lorsque $N_{MCS} \rightarrow \infty$, alors par repondération à $\beta > \beta_0$ elle est

amplifiée d'un facteur $f_N \gg 1$, et peut donc donner une contribution dominante à \overline{X}_β , bien qu'elle ne porte information physique.

La repondération des erreurs limite donc la fiabilité de la méthode à un domaine de températures *fini* autour de la température de simulation. On remarque par ailleurs que ce domaine de validité diminue rapidement avec la taille de l'échantillon¹⁵ puisque le facteur de repondération $f_N \sim e^N$.

On montre un exemple de repondération de différentes observables sur la figure 2.15 pour un échantillon de taille linéaire $L = 64$, à partir de deux simulations de trempe parallèle, réalisées autour de la température du maximum de C et χ_σ .

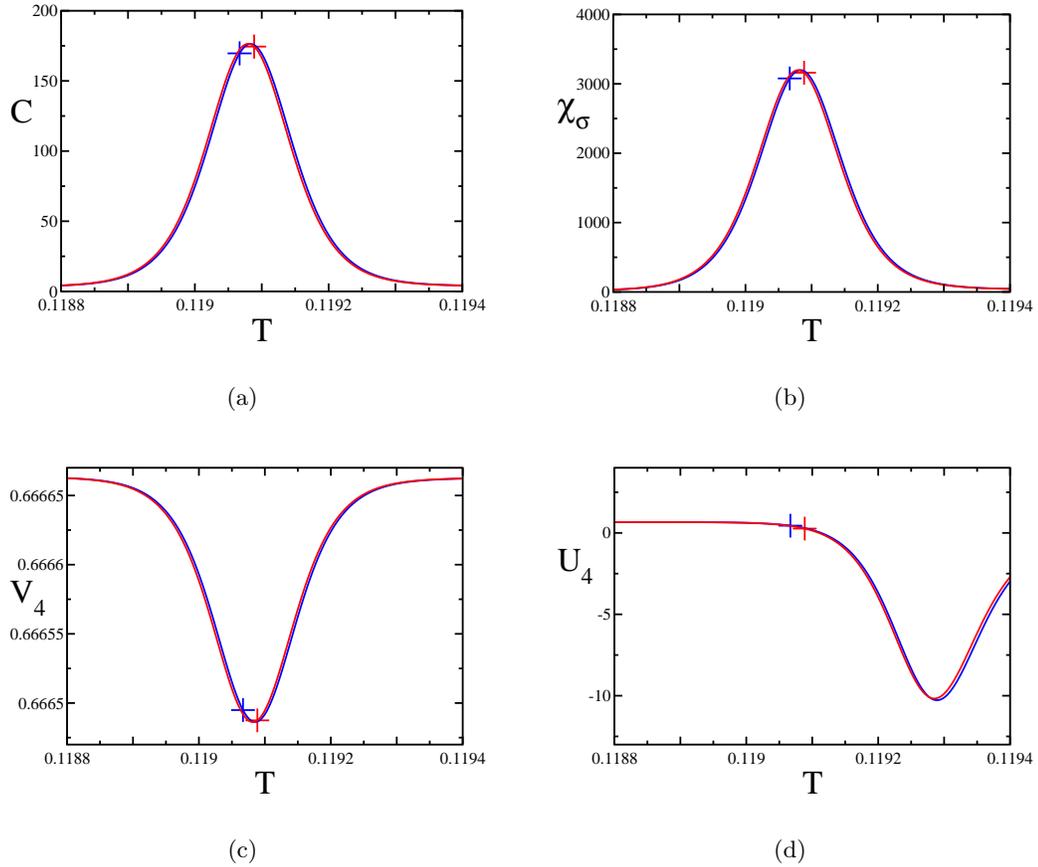


FIG. 2.15 – Moments d'ordre 2 et 4 des distributions d'énergie et de chiralité scalaire *vs.* température, obtenus par repondération de deux simulations de trempe parallèle (indiquées par des croix). L'échantillon a une taille linéaire $L = 64$ et $J_2/|J_1| = 0.38$.

¹⁵En pratique on estime que la repondération n'engendre qu'une erreur négligeable sur les moyennes tant que l'histogramme d'énergie repondéré et son parent sont distants de moins d'un écart type. Ce critère est de plus en plus restrictif lorsque la taille N de l'échantillon croît, puisque loin des transitions la distribution d'énergie est gaussienne de largeur $\propto 1/\sqrt{N} \rightarrow 0$ à la limite thermodynamique.

Les deux courbes obtenues par repondération sont quasiment identiques pour toutes ces observables : les simulations initiales sont donc suffisamment bien convergées, et la gamme de températures de repondération suffisamment étroite, pour que l'erreur statistique soit faible et se propage peu.

La repondération fournit donc directement une estimation des extréma des quatre grandeurs, avec une barre d'erreur fiable.

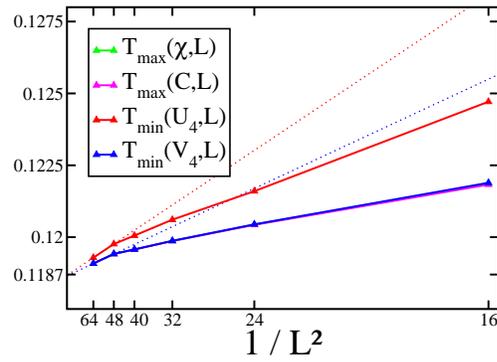
On montre sur la figure 2.16(a) les effets de taille sur les températures du maximum de C et χ_σ , respectivement $T_{max}(C, L)$ et $T_{max}(\chi_\sigma, L)$, et sur la température des minima de U_4 et V_4 , notées $T_{min}(U_4, L)$ et $T_{min}(V_4, L)$.

Comme on pouvait déjà le remarquer sur la figure 2.15, C , χ , et V_4 sont extrémales quasiment à la même température tandis que le minimum de U_4 a lieu à une température légèrement supérieure.

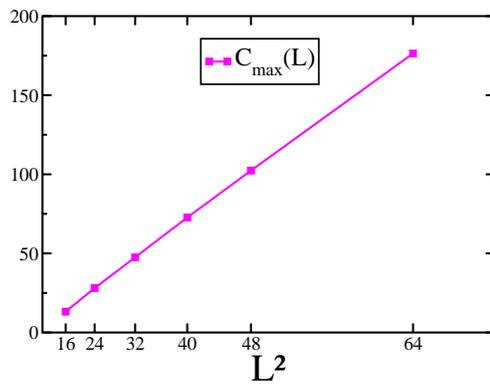
Cependant, et en accord avec (2.8), l'écart entre les quatre températures diminue avec la taille et elles semblent toutes converger vers une même température de transition $T_0 = 0.1187 \pm 0.0001$ à la limite thermodynamique. En revanche le régime asymptotique ne semble pas tout à fait atteint aux plus grandes tailles comme le montre le léger infléchissement vers la taille $L = 48$.

La divergence en $\mathcal{O}(L^2)$ des moments d'ordre 2 est correcte (Fig. 2.16(b) et 2.16(c)), mais l'approche du régime asymptotique est plus lente pour les moments d'ordre 4 : $U_{4min}(L)$ diverge bien en $\mathcal{O}(L^2)$ avec là encore un léger changement de comportement vers $L = 48$ (Fig. 2.16(e)), tandis que $V_{4min}(L)$ ne semble pas avoir rejoint son asymptote en $\mathcal{O}(L^{-2})$ aux tailles les plus grandes (Fig. 2.16(d)).

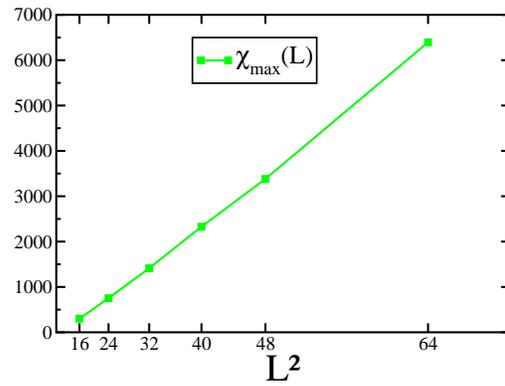
On peut cependant déjà prévoir une valeur thermodynamique $V_{4min}(\infty) \simeq 2/3$, *i.e.* une très faible chaleur latente (Sec. 2.5) : la transition chirale est *faiblement* du premier ordre à $J_2/|J_1| = 0.38$.



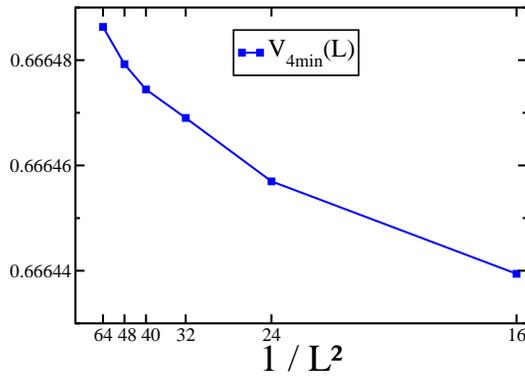
(a)



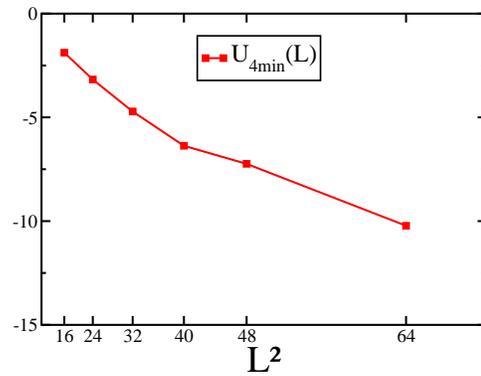
(b)



(c)



(d)



(e)

FIG. 2.16 – Effets de taille finie sur les températures des extréma respectifs de C , χ_σ , U_4 et V_4 (Fig. 2.16(a)), ainsi que sur la hauteur des extréma de C (Fig. 2.16(b)), χ_σ (Fig. 2.16(c)), V_4 (Fig. 2.16(d)) et U_4 (Fig. 2.16(e)). Les barres d'erreur sont plus petites que la taille des symboles.

Longueur de corrélation chirale A la limite thermodynamique on attend donc une faible discontinuité de l'énergie la transition, *i.e.* une transition chirale quasiment critique, ou encore *faiblement* du premier ordre.

De façon cohérente on prévoit une longueur de corrélation chirale $\xi_{\mathbb{Z}_2}$ finie, mais grande à la transition : le régime asymptotique $L \gg \xi_{\mathbb{Z}_2}(T_0)$ ne semble en effet pas atteint pour les moments d'ordre 4, et les termes sous-dominants négligés dans les effets de taille finie (2.8) et (2.9) sont encore relativement importants aux tailles $L \leq 64$.

Pour estimer $\xi_{\mathbb{Z}_2}$ on calcule le facteur de structure de la chiralité scalaire alternée

$$\mathcal{S}_{\mathbb{Z}_2}^{\mu\nu}(\mathbf{q}, T) = (-1)^{\alpha_\mu + \alpha_\nu} \langle m_\sigma^\mu(\mathbf{q}) m_\sigma^\nu(-\mathbf{q}) \rangle_T - \langle |m_\sigma^\mu| \rangle_T \langle |m_\sigma^\nu| \rangle_T \delta(\mathbf{q}) \quad (2.12)$$

où μ et ν repèrent les deux types de triangles, pointe en haut et pointe en bas ($\mathcal{S}_{\mathbb{Z}_2}^{\mu\nu}$ est donc une matrice 2×2), tandis que $(-1)^{\alpha_\mu}$ est le facteur habituel de redressement des chiralités scalaires.

On a également introduit m_σ^μ , la transformée de Fourier de la chiralité scalaire restreinte aux triangles de type μ :

$$m_\sigma^\mu(\mathbf{q}) = \sqrt{\frac{3}{N}} \sum_{\Delta_\mu} \sigma_{\Delta_\mu} e^{j\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\Delta_\mu}}$$

où la somme s'étend sur les $N/3$ triangles Δ_μ de type μ .

En fin de simulation on diagonalise $\mathcal{S}_{\mathbb{Z}_2}^{\mu\nu}(\mathbf{q}, T)$ et on suppose une forme de Ornstein-Zernicke pour sa valeur propre maximale $\lambda_{\mathbb{Z}_2}(\mathbf{q}, T)$ au voisinage de $\mathbf{q} \simeq \mathbf{0}$, soit $(\lambda_{\mathbb{Z}_2}(\mathbf{q}, T)/\lambda_{\mathbb{Z}_2}(\mathbf{0}, T))^{-1} \simeq 1 + \mathbf{q}^2 \xi_{\mathbb{Z}_2}^2(T)$ ¹⁶, qui définit la longueur de corrélation de la chiralité scalaire $\xi_{\mathbb{Z}_2}(T)$ à la température T .

On donne sur la figure 2.17 l'évolution avec la taille de $\xi_{\mathbb{Z}_2}(T_0(L))$ à la température de transition chirale : $\xi_{\mathbb{Z}_2}(L)$ est de l'ordre de quelques pas du réseau de Bravais, *i.e.* nettement inférieure à la taille linéaire des échantillons, en accord avec l'observation des distributions d'énergie et de chiralité scalaire qui montraient clairement la coexistence des deux phases à la transition (Fig. 2.14(a) et 2.14(b)).

¹⁶Dans cette approximation, et à la limite continue, l'énergie libre due aux fluctuations inhomogènes de la chiralité scalaire est $\propto \int d^2\mathbf{r} (\nabla\sigma_\Delta)^2 \propto \int d^2\mathbf{q} q^2 |\sigma_\Delta(\mathbf{q})|^2$: c'est donc une approximation gaussienne pour la fonction de partition des fluctuations.

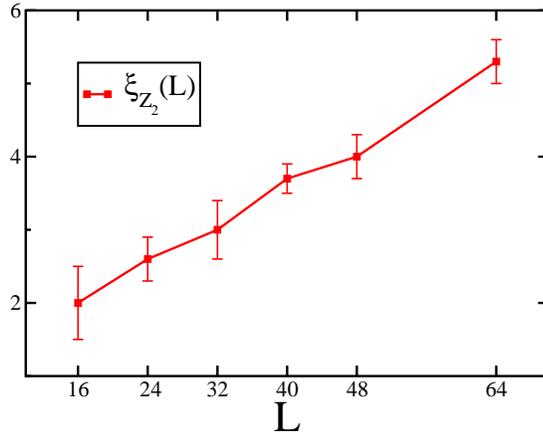


FIG. 2.17 – Effets de taille finie sur la longueur de corrélation ξ_{Z_2} (en pas du réseau de Bravais), à la température de transition chirale.

D'autre part $\xi_{Z_2}(L)$ croît plus ou moins linéairement avec la taille : la saturation asymptotique de $\xi_{Z_2}(L)$ à une valeur finie n'est pas atteinte aux tailles $L \leq 64$, et laisse comme prévu la possibilité d'une grande longueur de corrélation chirale à la limite thermodynamique.

Barrière d'énergie libre Finalement la signature la plus claire du caractère premier ordre de la transition chirale à $J_2/|J_1| = 0.38$ est lue directement sur les histogrammes doublement piqués de l'énergie et de la chiralité scalaire, plutôt que sur leurs moments.

On s'intéresse donc aux effets de taille sur la distribution d'énergie : à la limite thermodynamique et pour un nombre infini d'itérations, elle donne directement le profil d'énergie libre $F(E, \beta)$ par $P_\beta(E) = e^{-\beta F(E, \beta)}$.

À une transition du premier ordre, on développe le profil d'énergie libre avec la taille selon [48, 49]

$$F(E, L) = L^d f_{bulk}(E) + L^{d-1} f_{barrier}(E) + \dots$$

avec $L^d f_{bulk}(E)$ l'énergie libre en volume, identique dans les deux phases à la température de transition, et $L^{d-1} f_{barrier}(E)$ la barrière d'énergie libre (Fig. 2.18), liée comme on l'a vu à l'énergie d'interface entre les deux phases, et qui croît donc comme la taille linéaire de l'échantillon en dimension 2¹⁷.

¹⁷La barrière est une branche concave et donc instable du profil d'énergie libre : elle devient en effet négligeable à la limite thermodynamique.

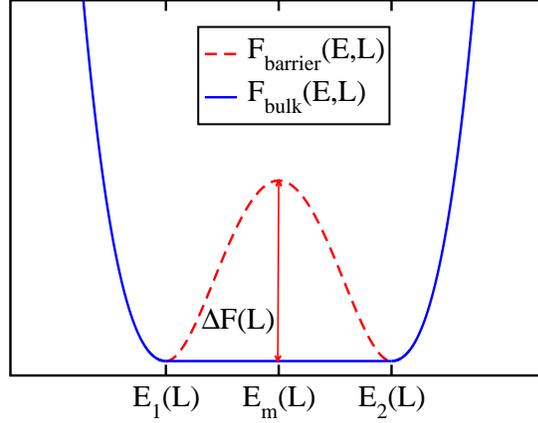


FIG. 2.18 – Profil d'énergie libre $F(E, L)$ à taille finie L . La barrière concave $F_{\text{barrier}}(E, L) = L^{d-1} f_{\text{barrier}}(E)$ (pointillés rouges) est un branche instable à la limite thermodynamique, et sa hauteur $\Delta F(L) \sim \mathcal{O}(L^{d-1})$. Les énergies des deux phases convergent comme $\mathcal{O}(L^{-1})$ vers leur valeur thermodynamique.

A taille finie la hauteur de la barrière croît donc comme

$$\Delta F(L) = F(E_m, L) - F(E_1, L) = L^{d-1} \Delta f_{\text{barrier}} \sim L^{d-1} \quad (2.13)$$

et signe clairement une transition du premier ordre.

En revanche, pour une transition critique la barrière ΔF est finie à la limite thermodynamique, et pour une transition faiblement du premier ordre on attend un comportement intermédiaire, *i.e.* au moins une croissance monotone de $\Delta F(L)$ pour $L < \xi_{\mathbb{Z}_2}(T_0)$ avant d'atteindre le régime asymptotique (2.13) [48, 49].

On montre sur la figure 2.19(a) les profils d'énergie libre obtenus à partir des histogrammes d'énergie à différentes tailles : bien que le régime asymptotique ne semble pas atteint, la barrière d'énergie libre croît effectivement avec la taille de l'échantillon ¹⁸ (Fig. 2.19(b)) et montre directement que l'énergie d'interface est finie, *i.e.* que la transition chirale est du premier ordre à $J_2/|J_1| = 0.38$.

D'autre part Lee et Kosterlitz [49] proposent d'estimer la longueur de corrélation ξ à une transition du premier ordre par $\Delta F(L = \xi) = 1$, qui donne $\xi_{\mathbb{Z}_2}(T_0) \sim 17$ pour la transition chirale à $J_2/|J_1| \sim 0.38$, et montre le caractère *faiblement* du premier ordre de la transition.

¹⁸La grande barre d'erreur sur $\Delta F(L = 64)$ provient du mauvais échantillonnage de la barrière d'énergie libre à cette taille : les énergies mesurées dans l'intervalle $[e_1(L), e_2(L)]$ sont des événements rares et le nombre d'itérations est insuffisant pour pouvoir négliger l'erreur statistique à cette taille (Sec. 2.5.2). Evidemment la barrière contribue peu aux moyennes thermodynamiques et on remarque en effet que l'erreur sur celles-ci est faible pour $L = 64$ (Fig. 2.15, 2.16 et 2.17).

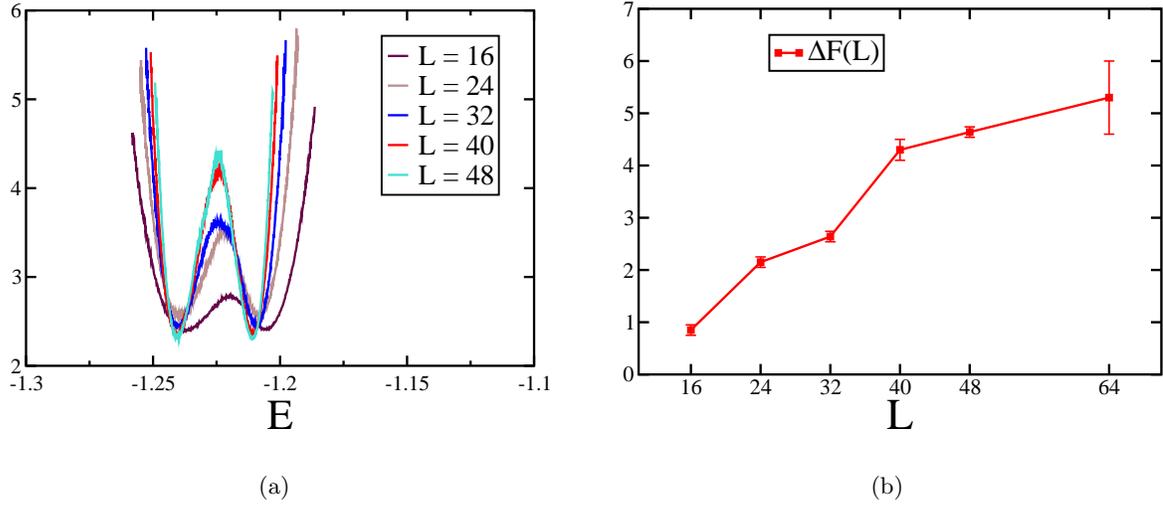


FIG. 2.19 – Effets de taille finie sur le profil d'énergie libre $F(E, L)$ (Fig. 2.19(a)). La barrière d'énergie libre $\Delta F(L)$ croît avec la taille linéaire L , comme prévu pour une transition du premier ordre (Fig. 2.19(b)).

D'autre part on montre que les énergies par spin des deux phases $i = 1, 2$ tendent vers leur valeur thermodynamique respective e_i comme [48, 49]

$$e_i(L) = e_i + \mathcal{O}(L^{-1}) \quad (2.14)$$

avec $e_2 - e_1$ la chaleur latente par spin de la transition.

Les effets de taille semblent compatibles (Fig. 2.20) et donnent une mesure directe du caractère *faiblement* premier ordre de la transition chirale : à la limite thermodynamique la chaleur latente est estimée à $C_{lat} = 0.027 \pm 0.001$, *i.e.* l'écart relatif entre les énergies par spin des deux phases n'est que de quelques pourcents.

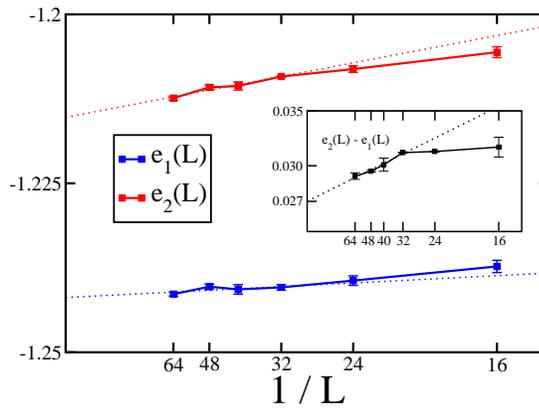


FIG. 2.20 – Effets de taille sur l'énergie par spin de chaque phase et sur la chaleur latente (en encart).

2.5.7 Conclusion partielle

Il ressort donc des simulations que la transition chirale dans la phase *cuboc* à $J_2/|J_1| = 0.38$ est loin du scénario d'une transition Ising : elle est du premier ordre comme le montrent les distributions doublement piquées de l'énergie et de l'aimantation \mathbb{Z}_2 . Leurs seconds moments divergent comme prévu en $\mathcal{O}(L^d)$ tandis que la barrière d'énergie libre croît avec la taille des échantillons.

Cependant, la faible chaleur latente, et de façon cohérente la grande longueur de corrélation chirale $\xi_{\mathbb{Z}_2}(T_0) \sim 17$, montrent le caractère *faiblement* premier ordre de la transition.

Une transition chirale similaire a déjà été mise en évidence par Momoï [67, 68] sur le réseau triangulaire avec un couplage de Heisenberg premiers voisins frustré par un échange cyclique à quatre spins.

Pour $K > 0$ et $-K/2 \leq J \leq 2K$, le fondamental du Hamiltonien

$$\begin{aligned}
 H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\
 + K \sum_{\langle ijkl \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)(\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_l) + (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_l)(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k) - (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k)(\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_l)
 \end{aligned} \tag{2.15}$$

est un ordre de Néel à quatre sous-réseaux pointant vers les sommets d'un tétraèdre [43] : comme dans la phase *cuboc*, la non coplanarité du paramètre d'ordre assure que la symétrie chirale est brisée dans le fondamental.

Les simulations Monte-Carlo semble d'abord montrer une transition chirale critique, avec des exposants non-Ising 2D [67], mais un double pic faiblement marqué apparaît aux plus grandes tailles dans la distribution d'énergie et fait conclure là encore à une transition *faiblement* du premier ordre [68, 66].

Dans les deux modèles le caractère premier ordre des transitions chirales semble être *induit par les fluctuations*, au sens où le champ moyen prédit vraisemblablement une transition critique : dans un développement de Landau de l'énergie libre, le terme cubique est en effet interdit par la symétrie de spin-flip des Hamiltoniens (2.1) et (2.15), et on s'attendrait dans le cas le plus simple à une transition critique¹⁹.

Le mécanisme de destruction de l'ordre chirale, et en particulier le rôle joué par les fluctuations, reste donc à déterminer dans les deux modèles.

Les fluctuations des spins, qui sont les variables directement couplées par le Hamiltonien et à partir desquels la chiralité scalaire est construite, devraient fournir un élément de réponse : dans le cas de la phase *cuboc*, on va voir en effet que la topologie du paramètre d'ordre autorise des excitations fondamentalement différentes des ondes de spin, et qui apparaissent à la transition chirale.

¹⁹C'est le cas si l'énergie libre se développe selon $F = a_2 m_\sigma^2(T) + a_4 m_\sigma^4(T)$. Le coefficient $a_2 \propto (T - T_c)$ change de signe à la transition et la convexité de l'énergie libre impose que $a_4 > 0$. On peut néanmoins envisager une transition du premier ordre sans terme impair si $a_2 > 0$ et $a_4 < 0$: la concavité de F requiert alors d'inclure le terme d'ordre 6.

2.6 Défauts topologiques dans la phase *cuboc*

2.6.1 Espace topologique des paramètres d'ordre *cuboc*

On s'intéresse maintenant à la topologie de l'ensemble *continu* des paramètres d'ordre *cuboc*, *i.e.* engendré par rotation globale d'un cuboctaèdre, et on appelle "espace des paramètres d'ordre *cuboc*" l'ensemble de ces configurations trivialement dégénérées.

Selon la chiralité du cuboctaèdre de départ, on engendre par $SO(3)$ deux espaces de paramètre d'ordre *cuboc*, différenciés par la chiralité, et par elle uniquement (Sec. 2.2). En particulier ces deux espaces ont la même topologie et ils seront donc indistinguables dans la suite : on parlera donc de l'espace des paramètres d'ordre *cuboc* au singulier.

Mathématiquement, l'espace des paramètres d'ordre est le groupe quotient G/H où G est le groupe *continu* de symétrie du Hamiltonien et H est le sous-groupe *continu* de G qui laisse invariant le paramètre d'ordre.

Dans le cas de la phase *cuboc*, la partie continue du groupe de symétrie de Hamiltonien est $SO(3)$ qui est complètement brisé en \mathcal{O} , un groupe fini (Sec. 2.2) : le seul sous-groupe continu de $SO(3)$ qui laisse invariant le paramètre d'ordre est l'identité seule, et l'espace topologique des paramètres d'ordre *cuboc* est donc $SO(3)/\{id\} = SO(3)$.

De façon plus intuitive on note que pour orienter complètement un cuboctaèdre dans l'espace 3D, il suffit de fixer l'orientation du cube qui le contient (Fig. 2.4), c'est à dire orienter un trièdre orthonormé $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ par rapport à un trièdre de référence, disons orthonormé direct. On peut se convaincre sur la figure 2.4 que le caractère direct ou indirect de $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ correspond aux deux choix possibles pour la chiralité, dont nous avons souligné qu'elle ne jouait ici aucun rôle : on peut donc faire le choix d'un trièdre $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ orthonormé *direct* sans restreindre la généralité. L'orientation d'un cuboctaèdre est donc entièrement déterminée par la matrice de passage du trièdre de référence au trièdre $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$, tous deux orthonormés directs : du point de vue de la topologie, l'ensemble des paramètres d'ordre *cuboc* est donc l'ensemble des matrices de rotation $SO(3)$.

Lien avec les défauts A partir de la configuration fondamentale ordonnée à $T = 0$ on peut toujours construire une excitation par déformation continue, *i.e.* une onde de spin.

Toutefois, lorsque l'espace des paramètres d'ordre a une topologie non triviale, *i.e.* lorsqu'au moins un de ses groupes d'homotopie n'est pas réduit à l'identité, on peut construire un autre type d'excitations qu'on ne peut "connecter" au fondamental ordonné par une simple déformation continue : ces excitations sont donc des *singularités* ou défauts topologiques [57]²⁰, et sont nécessairement gappées.

²⁰Pour souligner la différence entre les deux types d'excitations on peut remarquer que les ondes de spin sont de petites déformations du fondamental ordonné : elles ne "sondent" que la structure *locale*

A chaque groupe d'homotopie non trivial est associé un type de défauts. En particulier la topologie non triviale de $SO(3)$ s'écrit au moyen de son *premier* groupe d'homotopie $\pi_1(SO(3)) = \mathbb{Z}_2$ qui montre l'existence de défauts topologiques *ponc-tuels*, appelés vortex, dans la phase *cuboc*. Avant de décrire ces excitations on reprend les principaux résultats connus sur le modèle XY, qui possède un autre type de vortex.

2.6.2 Vortex de $SO(2)$ - Transition de Kosterlitz-Thouless

Pour se convaincre du lien entre la topologie non triviale de l'espace des paramètres d'ordre et l'existence de défauts topologiques on considère le cas plus simple d'un Hamiltonien de Heisenberg ferromagnétique (de constante d'échange $J = -1$) sur le réseau carré pour des spins XY : ici encore le groupe de symétrie $SO(2)$ du Hamiltonien est complètement brisé. L'espace des paramètres d'ordre est donc $SO(2)$ dont la topologie est non triviale : $\pi_1(SO(2)) = \mathbb{Z}$. C'est une conséquence directe de la cyclicité des variables angulaires : un même élément de $SO(2)$ peut être à la fois représenté par les angles θ et $\theta + 2k\pi$, $k \in \mathbb{Z}$.

Vorticité \mathbb{Z} Prenons une configuration quelconque des spins, non ordonnée, et définissons une boucle *fermée* sur le réseau, par exemple autour d'une plaquette carrée. En circulant le long de la boucle l'orientation des spins successifs définit une trajectoire *fermée* sur le cercle unité.

On peut se convaincre qu'aucune déformation continue de la configuration ne change le nombre (algébrique) de tours n effectués autour du cercle : si $n \neq 0$ on a une singularité, appelée vortex, topologiquement stable. A l'inverse, deux singularités de même nombre d'enroulement n se transforment l'une dans l'autre par déformation continue, et on dit qu'elles sont topologiquement équivalentes.

Le lien avec le groupe d'homotopie est maintenant clair : on peut trier les singularités en classes topologiquement distinctes et indexées par leur nombre d'enroulement, ou vorticité, c'est à dire un entier. L'ensemble de ces classes est simplement le groupe d'homotopie \mathbb{Z} de l'espace des paramètres d'ordre [57].

Notons que le nombre d'enroulement n est indépendant du contour utilisé pour le définir. En particulier si l'on considère une configuration contenant un seul vortex, on calcule le même nombre d'enroulement $n \neq 0$ sur n'importe quel contour, aussi grand soit-il : un vortex seul est une "perturbation" de portée infinie et on montre en effet que l'énergie de création d'un seul vortex de nombre d'enroulement n est $\pi n^2 \ln L$, avec L la taille de l'échantillon.

En revanche, en circulant le long d'une boucle qui contient deux singularités $\pm|n|$, soit une paire vortex-antivortex, on mesure un nombre d'enroulement algébrique total nul : par déformation continue on peut donc se ramener à une configuration

de l'espace des paramètres d'ordre et sont donc complètement insensibles à sa topologie, qui est une propriété *globale* de l'espace. En particulier les modèles sigma non-linéaires, qui décrivent la physique des ondes de spin, sont dépourvus d'excitations topologiques.

sans singularité à l'intérieur de la boucle, *i.e.* on peut annihiler continuellement une paire vortex-antivortex. En particulier, loin d'une paire de singularités la perturbation est faible : on montre que l'énergie d'une paire vortex-antivortex distants de r est $\sim n^2 \ln r$.

Transition de confinement/déconfinement Dans le modèle XY la contribution des défauts topologiques à la thermodynamique est remarquable et se déduit directement des considérations précédentes. Nous avons vu en effet que le coût en énergie de la création d'un vortex seul était prohibitif ($\sim \ln L$) : à basse température les vortex \mathbb{Z} n'existent donc jamais seuls, mais plutôt par paires d'énergie finie ($\sim \ln r$).

En revanche, lorsque l'on augmente la température, la création de vortex seuls est favorisée par la contribution entropique à l'énergie libre.

Plus précisément on estime que l'on peut localiser le centre d'un vortex de L^2 façons possibles : l'énergie libre d'un vortex seul vaut donc

$$F_v(L, T) = \pi \ln L - T \ln L^2 = (\pi - 2T) \ln L \quad ^{21}.$$

Pour $T < T_{KT} = \frac{\pi}{2}$, $F_v(L, T) \rightarrow +\infty$ lorsque $L \rightarrow \infty$ et on retrouve que les vortex ne peuvent exister que liés par paires. En revanche, pour $T > T_{KT}$ $F_v(L, T) \rightarrow -\infty$ lorsque $L \rightarrow \infty$, *i.e.* la création d'un vortex seul est infiniment favorisée : les vortex sont libres.

A partir d'arguments énergétiques simples Kosterlitz et Thouless [42] prédisent donc une transition de confinement-déconfinement des paires vortex-antivortex à température finie²², qui porte leurs noms. On remarque que la dépendance logarithmique de l'énergie d'un vortex seul, en $\ln L$ comme l'entropie, est essentielle pour qu'une telle transition existe.

Mécanisme de dissociation KT La transition de Kosterlitz-Thouless est un peu à part dans la nomenclature usuelle puisque les ondes de spin restaurent $SO(2)$ dès que $T > 0$ (Mermin-Wagner) mais prédisent une longueur de corrélation infinie à toute température [97] : les corrélations spin-spin $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle_T \sim r_{ij}^{-\eta(T)}$ décroissent algébriquement avec un exposant $\eta(T)$ dépendant de la température, *i.e.* le système est critique à toute température.

En fait ce résultat est obtenu à partir du modèle sigma non-linéaire qui ignore

²¹On a supposé l'existence d'un vortex d'enroulement $n = \pm 1$. Comparativement, les vortex d'enroulement plus élevé sont en effet énergétiquement défavorisés (leur énergie croît comme le carré de leur enroulement) et contribuent, en première approximation, pour une part négligeable à la transition de Kosterlitz-Thouless.

²²On peut se convaincre du lien entre le modèle de vortex et le gaz de Coulomb 2D sur réseau en remarquant que l'énergie d'une paire vortex-antivortex est simplement l'énergie d'interaction coulombienne d'un dipôle de charges $\pm|n|$ en deux dimensions. En fait il s'agit d'un gaz de Coulomb globalement neutre puisqu'on peut montrer que les seules configurations de vortex d'énergie finie ont un nombre d'enroulement total $\sum n_i = 0$. Dans ce langage la transition de Kosterlitz-Thouless sépare donc une phase gaz de dipôles vortex-antivortex pour $T < T_{KT}$, d'une phase plasma neutre de vortex pour $T > T_{KT}$.

les vortex. Il est clair cependant que les corrélations de spin sont tuées par la prolifération des vortex libres à la transition.

A mesure que la température $T < T_{KT}$ augmente, quelques paires vortex-antivortex très liées apparaissent. On a vu qu'elles ne perturbent la configuration que localement (elles sont donc libres en première approximation) et les corrélations restent donc critiques : dans ce domaine de températures la physique reste dominée par les ondes de spin.

A l'approche de la transition les paires prolifèrent et commencent à interagir : sous l'effet de la température on trouve quelques paires suffisamment distantes pour que leur interaction confinante puisse être écrantée par une autre paire située à proximité. En retour, ces paires éloignées perturbent la configuration sur des distances de plus en plus grandes et écrantent un nombre croissant de paires. Globalement les paires sont donc moins liées à mesure que la température augmente. A $T \gtrsim T_{KT}$ les paires les plus distantes se dissocient, *i.e.* leurs singularités s'échappent à l'infini. Comme on l'a vu, les vortex libérés perturbent l'ensemble de la configuration et interagissent avec toutes les paires, dont elles favorisent également la dissociation.

Qualitativement on comprend donc que les corrélations de spin soient tuées à $T \gtrsim T_{KT}$ avec la loi exponentielle $\xi_{KT}(T) \sim e^{A/\sqrt{T-T_{KT}}}$, à comparer avec la décroissance simplement algébrique $\xi(T) \sim |T - T_c|^{-\nu}$ à l'approche d'une transition continue usuelle.

Transition topologique Le caractère pathologique de la transition KT est évident si on remarque qu'aucune brisure de symétrie ne l'accompagne. D'après le théorème de Memin-Wagner, les phases basse et haute température ont en effet la symétrie $O(2)$ du Hamiltonien et les deux phases ne diffèrent donc que par leur topologie. En particulier, aucun paramètre d'ordre *local* ne distingue les deux phases : au contraire nous avons dû définir les défauts au moyen de boucles, à la manière des théories de jauge ²³.

Sans prétendre que le modèle XY peut s'écrire comme une théorie de jauge sur réseau, on peut poursuivre l'analogie en se souvenant que $\pi_1(SO(2)) = \mathbb{Z}$ est la conséquence de la multiplicité des représentations d'une même rotation de $SO(2)$ par $\theta + 2k\pi$, $k \in \mathbb{Z}$, qu'on peut voir comme autant de choix de jauge.

Dans ce langage, pour définir les vortex de $SO(2)$ on a d'abord fixé la jauge arbitrairement en orientant la boucle et en imposant implicitement que l'angle θ entre deux spins voisins soit compris dans l'intervalle $[0, 2\pi[$, puis on a caractérisé les vortex de $SO(2)$ par leur nombre d'enroulement, *i.e.* la circulation de θ autour de la boucle, qui ne dépend pas du choix de jauge arbitraire utilisé pour la calculer : c'est une quantité bien définie, *i.e.* invariante de jauge²⁴.

²³Plusieurs propriétés des modèles de spin sur réseau 2D (resp. 1D) sont communes aux théories de jauge sur réseau 4D (resp. 2D) [40].

²⁴De la même manière, en électrodynamique le potentiel vecteur dépend de la jauge mais pas sa circulation sur un contour fermé, qui est juste le flux du champ magnétique à travers ce contour.

2.6.3 Vortex de $SO(3)$ - Transition de Kawamura-Miyashita ?

Dans le cas où l'espace des paramètres d'ordre est $SO(3)$, comme dans la phase *cuboc*, il existe également des défauts ponctuels stables, différents des vortex de $SO(2)$. La situation se complique essentiellement du fait que $SO(3)$ n'est pas commutatif.

Vorticité \mathbb{Z}_2 Ici, $\pi_1(SO(3)) = \mathbb{Z}_2$ est une conséquence directe du fait qu'une même rotation peut être représentée de manière équivalente par les paramètres axe-angle (\mathbf{n}, θ) et $(-\mathbf{n}, \pi - \theta)$, *i.e.* il n'y a plus que deux choix de jauge. En conséquence il y a seulement deux classes topologiques de configurations : celles sans vortex, qui sont régulières, et celles qui contiennent un seul vortex.

En particulier la loi de groupe de \mathbb{Z}_2 assure que les vortex de $SO(3)$ sont leur propres antivortex, et une configuration possédant deux singularités \mathbb{Z}_2 est continuellement déformable en une configuration régulière. Pour marquer la différence avec les vortex du modèle XY on appellera "vortex \mathbb{Z}_2 " les vortex de $SO(3)$.

Ces vortex \mathbb{Z}_2 ont été initialement étudiés par Kawamura et Miyashita [37] sur le réseau triangulaire avec un échange antiferromagnétique $J = 1$ entre premiers voisins, et on reprend dans la suite leurs principaux résultats.

À $T = 0$ les spins sont ordonnés en un état de Néel planaire à trois sous-réseaux orientés à 120° . Pour orienter le paramètre d'ordre il suffit maintenant de se donner deux angles pour orienter le plan des spins puis un troisième angle pour orienter la structure à 120° dans le plan, ce qui revient à orienter un trièdre direct dans l'espace à trois dimensions : l'espace des paramètres d'ordre est donc encore $SO(3)$.

Dans le cas XY on a défini la vorticité en sommant les déviations entre spins consécutifs le long d'un contour orienté. Pour des spins Heisenberg sur le triangulaire, ce sont les déviations entre structures à 120° voisines que l'on va sommer le long d'une boucle.

Sur un triangle on attache donc un trièdre défini à partir des trois spins coplanaires : on prend par exemple \mathbf{e}_1 parallèle à l'un des trois spins, \mathbf{e}_2 dans le plan des trois spins avec $\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2 = 0$, et $\mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2$. Les trièdres vivent alors sur un réseau triangulaire de pas $\sqrt{3}$, et la déviation entre deux structures à 120° voisines est simplement la rotation entre leurs trièdres respectifs.

Pour définir la vorticité \mathbb{Z}_2 on doit, là encore, fixer arbitrairement la jauge. On oriente d'abord un contour fermé sur le réseau triangulaire des trièdres puis on détermine la rotation qui mène d'un trièdre à son voisin le long de la boucle : on a toujours le choix entre les représentations (\mathbf{n}, θ) et $(-\mathbf{n}, \pi - \theta)$, avec $\mathbf{n} \in S_2$ la sphère 2D et $\theta \in [0, 2\pi[$. La jauge est fixée en demandant par exemple que $\theta \in [0, \pi]$, qui détermine \mathbf{n} de manière univoque.

Enfin, pour sommer ces déviations le long du contour on a besoin d'une représentation matricielle des rotations (\mathbf{n}, θ) successives. Comme pour la vorticité XY, on doit calculer la circulation des déviations *dans la jauge* que nous avons arbitrairement

choisie. Il est donc clair que la représentation de spin 1 de $SO(3)$ ne convient pas, puisqu'elle ne distingue pas les deux choix de jauge (\mathbf{n}, θ) et $(-\mathbf{n}, \pi - \theta)$: pour calculer sans ambiguïté la circulation à jauge fixée, la représentation adéquate de $SO(3)$ est bien celle de spin 1/2, *i.e.* la représentation par des matrices de $SU(2)$ ²⁵.

On représente donc la rotation (\mathbf{n}, θ) par

$$\hat{U}(\mathbf{n}, \theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \cos(\theta/2) \mathbb{1} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} \sin(\theta/2) \quad (2.16)$$

avec $\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ les trois matrices de Pauli.

La somme des déviations le long du contour fermé orienté C s'écrit maintenant $\hat{U}(C) = \prod_{i \in C} \hat{U}_i$ qui est une quantité invariante de jauge.

Comme dans le cas XY, le fait que le contour soit *fermé* montre que la matrice $\hat{U}(C)$ représente une rotation d'angle multiple de 2π . Cependant, et c'est là une nouveauté par rapport au cas XY, $SU(2)$ ne distingue que deux types de telles rotations. En effet (2.16) montre que $\hat{U}(\mathbf{n}, 2k\pi) = (-1)^k \mathbb{1}$ ²⁶, et une définition de la vorticité \mathbb{Z}_2 est donc

$$V(C) = \frac{1}{2} \text{Tr}(\hat{U}(C)) = \pm 1 \quad (2.17)$$

qui vaut +1 lorsque le nombre d'enroulement k est pair, *i.e.* la boucle contient un nombre pair de vortex \mathbb{Z}_2 , et -1 s'il est impair, et la boucle contient alors un nombre impair de vortex.

$\hat{U}(C)$, et donc $V(C)$, ne dépend ni du choix de jauge arbitraire que nous avons dû faire pour la calculer, ni du contour C , pourvu qu'il renferme le même nombre de singularités²⁷.

En dépit de l'apparition des matrices $SU(2)$ pour définir la vorticité, on souligne que l'ensemble des résultats précédents est obtenu dans un cadre *classique* et sur des arguments purement topologiques. Cependant on parle souvent de "nombre quantique", plutôt que de "nombre topologique", pour la vorticité.

Confinement - déconfinement des vortex \mathbb{Z}_2 On se demande naturellement s'il existe un analogue de la transition KT pour les vortex \mathbb{Z}_2 sur le réseau triangulaire.

Kawamura et Miyashita [37] examinent pour cela deux types de configurations de vortex \mathbb{Z}_2 , dans lesquelles les trièdres tournent autour d'un axe fixe : ils montrent

²⁶En ce sens c'est bien le double tour 4π , et non 2π , la vraie identité de $SO(3)$, bien que la représentation de spin 1 usuelle ne les distingue pas [55].

²⁷On obtient ce résultat en montrant d'abord qu'un contour orienté se décompose formellement en $C = C_1 + C_2$, puis que $\hat{U}(C) = \hat{U}(C_1)\hat{U}(C_2)$. On remarque ensuite qu'un contour quelconque se décompose toujours en contours élémentaires autour des plaquettes du réseau triangulaire de pas $\sqrt{3}$ sur lequel vivent des trièdres.

que l'énergie de ces configurations est $\sim \ln L$ et la répétition des arguments de Kosterlitz et Thouless les conduit également à prédire une température finie de transition de confinement-déconfinement des paires de vortex²⁸. A lui seul l'argument n'est cependant pas conclusif puisqu'il met en jeu un sous-ensemble restreint de vortex $SO(3)$ très similaires aux vortex XY.

Cependant les simulations Monte-Carlo [37] montrent la prolifération des vortex \mathbb{Z}_2 à température finie T_{KM} . De plus la chaleur spécifique est piquée à T_{KM} et la hauteur du pic ne semble pas diverger avec la taille des échantillons, de manière analogue à la transition KT [87].

Pour montrer que les vortex \mathbb{Z}_2 subissent effectivement une transition de confinement-déconfinement à la température T_{KM} , il faut pouvoir différencier deux singularités libres d'une paire liée. Pour les vortex \mathbb{Z}_2 comme pour les vortex XY, la différence est ténue : en particulier on sait déjà qu'aucun paramètre d'ordre local ne distingue les phases confinée/déconfinée.

Par analogie avec le modèle XY, Kawamura et Miyashita [37] considèrent le comportement asymptotique de la vorticité moyenne $\langle V(C_R) \rangle_T$ sur des contours C_R de périmètre $R \rightarrow \infty$.

$V(C_R)$ vaut en effet ± 1 selon que C_R contient un nombre pair ou impair de singularités.

En particulier la contribution d'une paire de vortex à $\langle V(C_R) \rangle_T$ vaut -1 uniquement si la paire enjambe le contour : c'est donc le périmètre R qui importe et on montre aisément que $\langle V(C_R) \rangle_T \sim e^{-\alpha(T)R}$ lorsque $R \rightarrow \infty$.

Au contraire, un vortex seul contribue toujours pour -1 quelle que soit sa position à l'intérieur du contour : c'est l'aire du contour qui importe ici et on montre facilement que $\langle V(C_R) \rangle_T \sim e^{-\gamma(T)R^2}$ lorsque $R \rightarrow \infty$.

On a donc un paramètre d'ordre *non-local*, comme prévu, qui distingue les phases confinée/déconfinée.

Sur le réseau triangulaire, au voisinage de la température T_{KM} du pic de chaleur spécifique, Kawamura et Miyashita [37] semblent en effet observer le passage de la "loi du périmètre" à la "loi de l'aire", en même temps que les vortex prolifèrent, ce qui conforte le scénario d'une transition de confinement/déconfinement pour les vortex \mathbb{Z}_2 .

Mécanisme de dissociation non-KT A la différence du modèle XY, la phase basse température du modèle de Heisenberg sur le réseau triangulaire n'est pas critique pour $T < T_{KM}$: les ondes de spin tuent les corrélations dès que $T > 0$ ²⁹ [4]. Plus précisément les simulations Monte-Carlo semblent montrer un cross-over violent de la longueur de corrélation de spin ξ_{spin} vers $T \simeq T_{KM}$, entre le com-

²⁸On rappelle que les vortex \mathbb{Z}_2 sont leur propres antivortex.

²⁹La définition même de la vorticité \mathbb{Z}_2 est litigieuse puisqu'elle suppose un ordre à 120° au moins local, *i.e.* sur un triangle, pour définir les trièdres. En fait les simulations Monte-Carlo montrent que c'est une hypothèse raisonnable puisqu'on estime $\xi_{spin} \gtrsim 5$ jusqu'à $T \gtrsim T_{KM}$ [71].

portement $\xi_{spin}(T) \sim \sqrt{T} e^{B/T}$ du modèle sigma non-linéaire (dépourvu de vortex) [41] et une loi $\xi_{spin}(T) \sim e^{A/\sqrt{T-T_{KM}}}$ à la Kosterlitz-Thouless pour $T \gtrsim T_{KM}$. Le fait que ξ_{spin} soit fini dans la phase confinée met sérieusement en doute la validité du mécanisme de dissociation KT pour les vortex \mathbb{Z}_2 .

Pour nous en convaincre, on considère par exemple une paire liée de singularités : on a vu que la perturbation due à l'un des deux vortex annulait exactement celle de son partenaire, modulo une déformation continue. Qualitativement, les spins gardent donc une certaine cohérence sur une distance de l'ordre de r , la séparation entre les deux singularités.

On peut donc raisonnablement supposer que les paires de vortex \mathbb{Z}_2 interagissent comme des vortex XY en $\sim \ln r$, jusqu'à $r \lesssim \xi_{spin}$: au delà la décorrélation des spins tue probablement l'interaction confinante et on a deux singularités libres.

Qualitativement, à mesure que la température augmente, les corrélations sont tuées essentiellement par les ondes de spin : jusqu'au voisinage de la transition les paires de vortex sont peu nombreuses, très liées, et ne jouent aucun rôle.

A l'approche de la transition on trouve des paires de vortex de plus en plus distantes et qui désordonnent encore un peu plus la configuration. Le modèle sigma non-linéaire prédit par exemple $\xi_{spin} \sim 20$ au voisinage de la transition alors qu'on mesure $\xi_{spin} \sim 15$ [71].

La transition a lieu lorsqu'au moins une paire de vortex est distante de $r \sim \xi_{spin}$: les vortex libres désordonnent alors l'ensemble des paires comme dans la transition KT. A la limite thermodynamique on peut donc voir ce mécanisme simpliste comme un ensemble de dissociations à la Kosterlitz-Thouless ayant lieu simultanément dans différents domaines de longueur ξ_{spin} .

Dans ce scénario les ondes de spin n'interagissent avec les vortex que de manière indirecte, par l'intermédiaire de la longueur de corrélation finie à $T < T_{KM}$. Les deux types d'excitations sont donc quasiment indépendants, à la manière du modèle XY où les ondes de spin n'interagissent pas avec les vortex en première approximation [42].

Cependant les vortex \mathbb{Z}_2 interagissent avec les ondes de spin, même en première approximation [70], et le scénario proposé est donc assez peu vraisemblable : la question de la nature de la transition à la limite thermodynamique, si toutefois elle existe, reste donc très ouvert [37, 36, 85, 84].

2.6.4 Les vortex dans la phase *cuboc* : premiers résultats

Comme nous l'avons souligné, l'espace topologique des paramètres d'ordre *cuboc* est $SO(3)$ et les vortex \mathbb{Z}_2 existent donc également dans la phase *cuboc*.

La définition des vortex dans la phase *cuboc* est identique à celle des vortex du triangulaire (Sec. 2.6.3) et il ne reste donc qu'à définir les trièdres locaux de la phase *cuboc* : en reprenant la figure 2.4 on voit qu'en choisissant par exemple $\mathbf{e}_1 = \frac{\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_{11}}{|\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_{11}|}$, $\mathbf{e}_3 = \frac{\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_{11}}{|\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_{11}|}$ et $\mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_3 \wedge \mathbf{e}_1$ on définit un trièdre local orthonormé

(direct) sur chaque maille de 12 spins : dans la phase *cuboc* les trièdres vivent donc sur un super-réseau triangulaire de pas 4.

Dans un premier temps on calcule la vorticit  sur toutes les plaquettes  l mentaires orient es du super-r seau. Pour une boucle donn e on obtient la vorticit  \mathbb{Z}_2 comme le produit des vorticit s  l mentaires   l'int rieur de la boucle, tandis que le nombre de vortex \mathbb{Z}_2 de la configuration est donn  par le nombre de plaquettes dont la vorticit  vaut -1 .

Sur la figure 2.21 on donne l' volution avec la temp rature du nombre moyen $\langle n_v \rangle$ de vortex \mathbb{Z}_2 par unit  de surface, pour l' chantillon de la figure 2.12, de taille $L = 16$ avec $J_2/|J_1| = 0.38$.

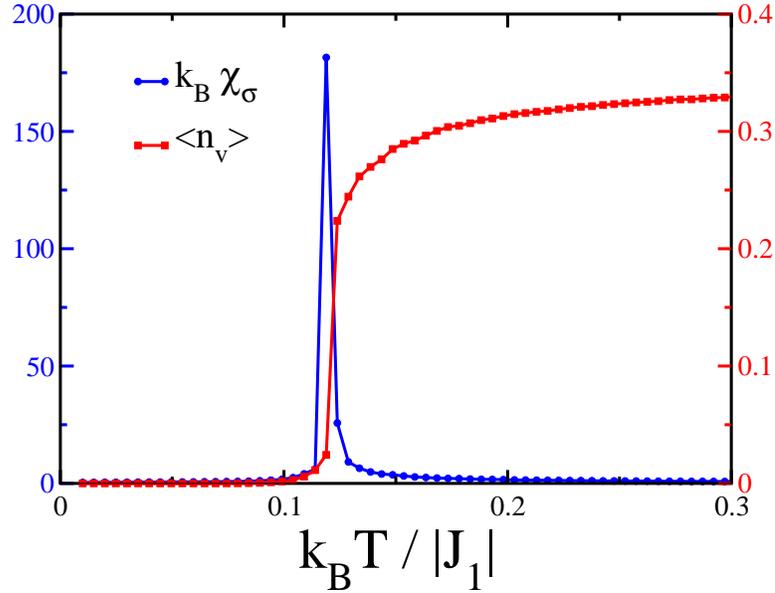


FIG. 2.21 – Densit  moyenne de vortex \mathbb{Z}_2 en fonction de la temp rature sur un  chantillon de taille $L = 16$ avec $J_2/|J_1| = 0.38$. La transition chirale est rep r e par le pic de susceptibilit  chirale.

Ce premier r sultat montre que les vortex \mathbb{Z}_2 prolif rent brutalement vers la temp rature de transition chirale : on se demande naturellement si la transition chirale est accompagn e d'une transition, ou un cross-over, de confinement-d confinement   la Kawamura-Miyashita des vortex \mathbb{Z}_2 .

Pour le v rifier le calcul de la vorticit  asymptotique $\langle V(C_R) \rangle$ lorsque $R \rightarrow \infty$ devra toutefois  tre men  sur des  chantillons de taille nettement plus grande.

Longueur de corr lation spin-spin La motivation initiale de notre  tude des vortex \mathbb{Z}_2  tait d'examiner les fluctuations de spin au voisinage de la transition chirale. La longueur de corr lations spin-spin fournit  videmment une mesure directe de l'importance de ces fluctuations.

Pour l'estimer on emploie une méthode analogue au calcul de ξ_{Z_2} : on calcule le facteur de structure magnétique

$$\mathcal{S}_{spin}^{\mu\nu}(\mathbf{q}, T) = \langle \mathbf{S}_{\mathbf{q}}^{\mu} \cdot \mathbf{S}_{-\mathbf{q}}^{\nu} \rangle_T \quad (2.18)$$

où μ et ν repèrent les trois types de sites sur le réseau kagomé : $\mathcal{S}_{spin}^{\mu\nu}$ est donc une matrice 3×3 .

Une forme de Ornstein-Zernicke est ensuite postulée pour la valeur propre maximale au voisinage des trois milieux de côté $\mathbf{q} = \mathbf{X}_{1,2,3}$, qui définit la longueur de corrélation ξ_{spin} .

En fait le facteur de structure magnétique est nettement anisotrope près des milieux de côtés. Une analyse plus fine de l'anisotropie des corrélations $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle_T$ nécessiterait sans doute de définir plusieurs longueurs de corrélation selon la direction de la paire ij . Toutefois, pour estimer l'ordre de grandeur de ξ_{spin} on se contentera de la forme isotrope de Ornstein-Zernicke, la dispersion angulaire étant à l'origine des grandes barres d'erreur.

La figure 2.22 donne l'évolution de ξ_{spin} avec la température pour un échantillon de taille $L = 64$ à $J_2/|J_1| = 0.38$.

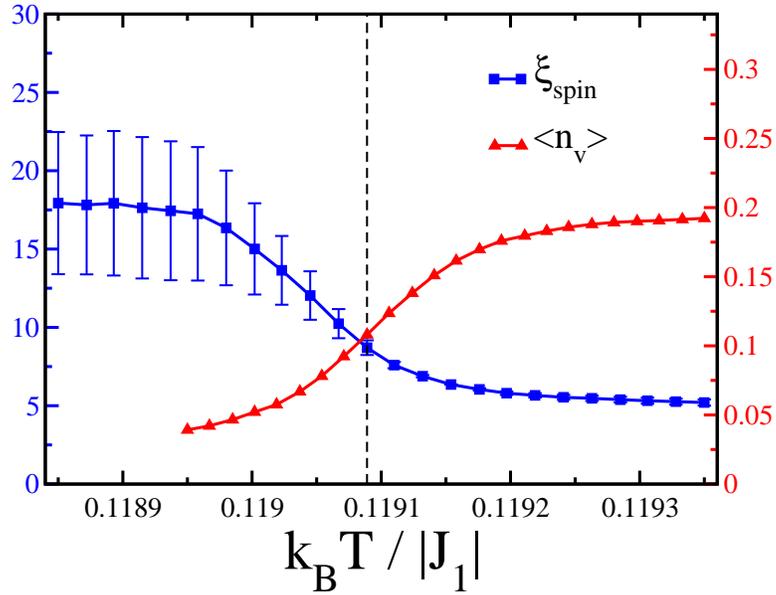


FIG. 2.22 – Evolution de la longueur de corrélation spin-spin ξ_{spin} (en bleu) au voisinage de la température de transition chirale $T_0(L = 64) \simeq 0.11909 |J_1|/k_B$ (pointillés noirs), pour un échantillon de taille $L = 64$ à $J_2/|J_1| = 0.38$. Les barres d'erreur sont estimées de la régression du facteur de structure magnétique au voisinage des trois milieux de côté. Près de la transition chirale, ξ_{spin} est tuée en même temps que les vortex prolifèrent (en rouge).

Dans une large mesure les corrélations de spin sont déjà tuées par les ondes de

spin, *avant* d'atteindre la température de transition chirale : on mesure en effet $\xi_{spin}(T \lesssim T_0) \sim 17$ alors que la densité de vortex n'est que de quelques pourcents. À la transition chirale le changement de comportement de ξ_{spin} est cependant assez brutal : la prolifération violente des vortex \mathbb{Z}_2 finit de désordonner les spins. De plus, la mesure de $\xi_{spin}(T \gtrsim T_0) \gtrsim 5$ pas du réseau de Bravais montre que l'hypothèse d'un ordre *cuboc* local, *i.e.* au moins à l'échelle d'une maille de 12 spins, de longueur 2 pas du réseau de Bravais, est valide : les trièdres locaux sont bien définis à la transition.

Le rôle des vortex à la transition chirale ? L'ensemble des résultats semble donc montrer que contrairement au scénario Ising (Sec. 2.4), où seules les variables \mathbb{Z}_2 locales sont activées à la transition, les fluctuations de spin jouent un rôle déterminant à la transition chirale.

Plus précisément on peut même supposer que ce sont essentiellement les vortex qui tuent la chiralité.

À basse température les vortex sont en effet quasiment absents. À elles seules, les ondes de spin tuent les corrélations spin-spin (Fig. 2.22) mais la chiralité scalaire reste cependant ordonnée à longue portée (Fig. 2.23).

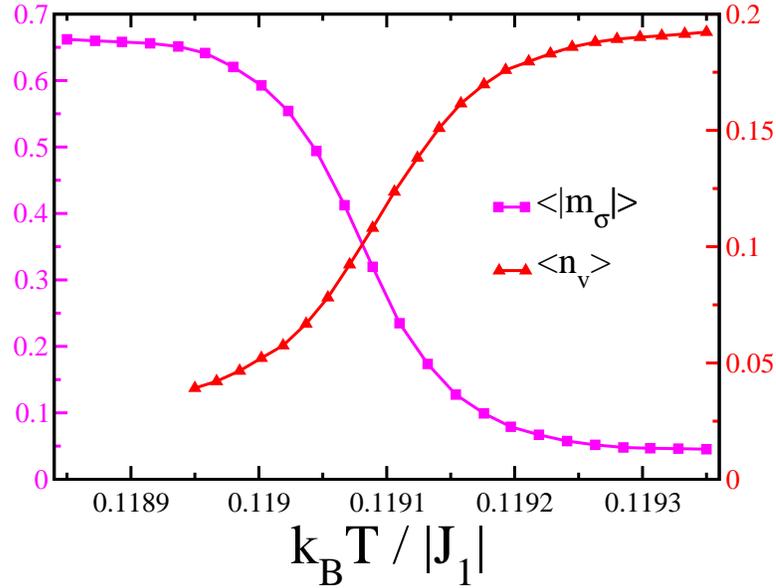


FIG. 2.23 – Evolution de la chiralité scalaire (en magenta) et de la densité de vortex \mathbb{Z}_2 (en rouge) au voisinage de la température de transition pour le même échantillon qu'à la figure 2.22.

Ce n'est qu'avec la prolifération des vortex que l'ordre chiral disparaît. S'il paraît clair que les vortex \mathbb{Z}_2 jouent un rôle déterminant dans la destruction de l'ordre chiral, on est évidemment loin d'en proposer un mécanisme réaliste. En

particulier, à la température de transition on peut s'attendre à ce que les vortex \mathbb{Z}_2 interagissent non seulement avec les ondes de spin (Sec. 2.6.3), mais aussi avec les excitations de chiralité.

Raisonnablement, on peut penser par exemple que les vortex désordonnent suffisamment les spins pour tuer les corrélations chirales à longue distance : les vortex seraient alors responsables du caractère non-critique de la transition chirale.

Dans ce scénario, dès que le fondamental est un ordre de Néel non-coplanaire, comme dans la phase *cuboc* ou la phase tétraédrique considérée par Momoï (Sec. 2.5.7), il brise la symétrie de spin-flip *et* il existe des vortex \mathbb{Z}_2 : la transition chirale est donc toujours associée à la prolifération/dissociation des vortex \mathbb{Z}_2 et elle n'est donc jamais critique.

Retour sur les transitions Ising sur le réseau carré Dans les modèles $J_1 - J_2$ et $J_1 - J_3$ sur le réseau carré (Sec. 2.4) la transition de restauration de la symétrie \mathbb{Z}_2 est critique et dans la classe d'universalité du modèle d'Ising en deux dimensions.

En particulier la portée des corrélations de la variable discrète, construite là encore à partir des spins ³⁰, diverge à la transition, contrairement à la transition chirale de la phase *cuboc*.

Dans ces deux modèles la situation est cependant différente :

- Dans le modèle $J_1 - J_2$, après sélection d'un des deux ordres *up-down* par le désordre (Sec. 2.4), le paramètre d'ordre est colinéaire [93, 16] et peut pointer dans toutes les directions de S_2 , la sphère 2D : $\pi_1(S_2) = 0$ montre qu'il n'existe pas de vortex \mathbb{Z}_2 dans le problème.
- Le cas du modèle $J_1 - J_3$ est moins clair : pour $J_3 > J_1/4$ on a effectivement une phase spirale coplanaire, ordonnée à $T = 0$. Comme dans le cas du modèle de Heisenberg sur le réseau triangulaire, pour orienter le paramètre d'ordre on doit se donner une direction (la normale au plan) et un angle (pour orienter la spirale dans le plan) : l'espace des paramètres d'ordre est donc encore le groupe des rotations $SO(3)$ entier, et *à priori* il existe des vortex \mathbb{Z}_2 stables dans le problème. Pourtant la transition à température finie est bien critique, *i.e.* la prolifération des vortex \mathbb{Z}_2 ne frustre pas la divergence des corrélations de la variable discrète.

On peut cependant remarquer que l'ordre spiral est incommensurable, et qu'à la limite thermodynamique les spins pointent dans toutes les directions du plan : du point de vue de la topologie, tout se passe comme si les spins étaient désordonnés dans le plan. Le paramètre d'ordre est donc entièrement fixé en orientant la normale au plan, qui peut pointer là encore dans toutes les directions de la sphère S_2 .

³⁰Dans les deux modèles la variable discrète est une combinaison de produits scalaires de spins sur une plaquette carrée [93, 12].

Qualitativement, l'incommensurabilité restaure la symétrie uniaxiale du paramètre d'ordre, et interdirait donc les vortex.

2.7 Evolution avec $J_2/|J_1|$: vers un point critique ?

On donne sur la figure 2.24 l'évolution de la température de transition avec le couplage $J_2/|J_1|$.

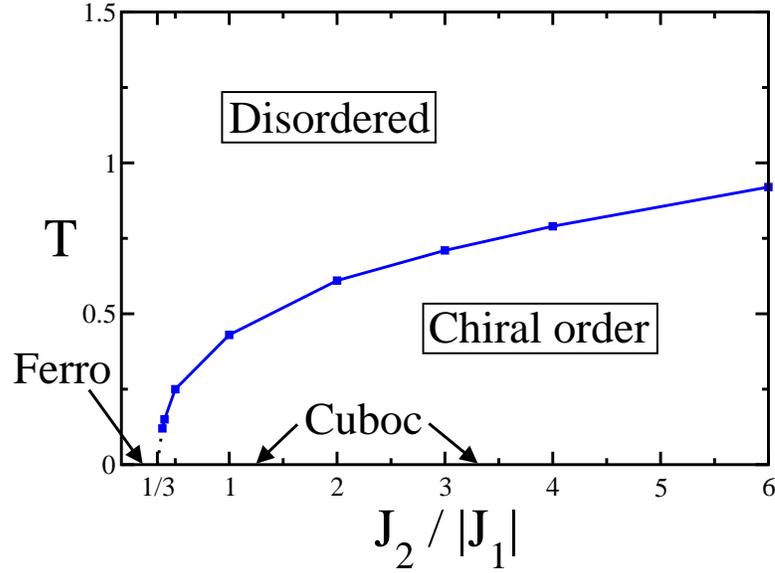


FIG. 2.24 – Diagramme de phase Température - couplage. La transition de l'ordre *cuboc* au ferromagnétique à $T = 0$ a lieu pour $J_2/|J_1| = 1/3$.

A mesure que l'on approche de la zone de stabilité du Ferro ($J_2 \leq |J_1|/3$) la température de transition diminue rapidement et semble tendre vers 0. Dans l'autre limite, elle croît quasiment linéairement avec J_2 .

De manière remarquable, la transition est de plus en plus faiblement du premier ordre à mesure que J_2 croît, comme le montrent les histogrammes d'énergie pour la taille $L = 64$ (Fig. 2.25(a)) : dès $J_2/|J_1| = 0.5$ le double pic dans la distribution d'énergie n'est presque plus visible et il a tout à fait disparu à $J_2/|J_1| = 1.0$. D'après le critère de Lee et Kosterlitz (Sec. 2.5.6) on estime que $\xi_{z_2} \gg 64$ dès $J_2/|J_1| = 0.5$ à comparer avec l'estimation $\xi_{z_2} \sim 17$ pour $J_2/|J_1| = 0.38$: la longueur de corrélation chirale explose avec $J_2/|J_1|$. De manière cohérente la distribution de chiralité scalaire à la transition (Fig. 2.25(a)) devient une distribution continue.

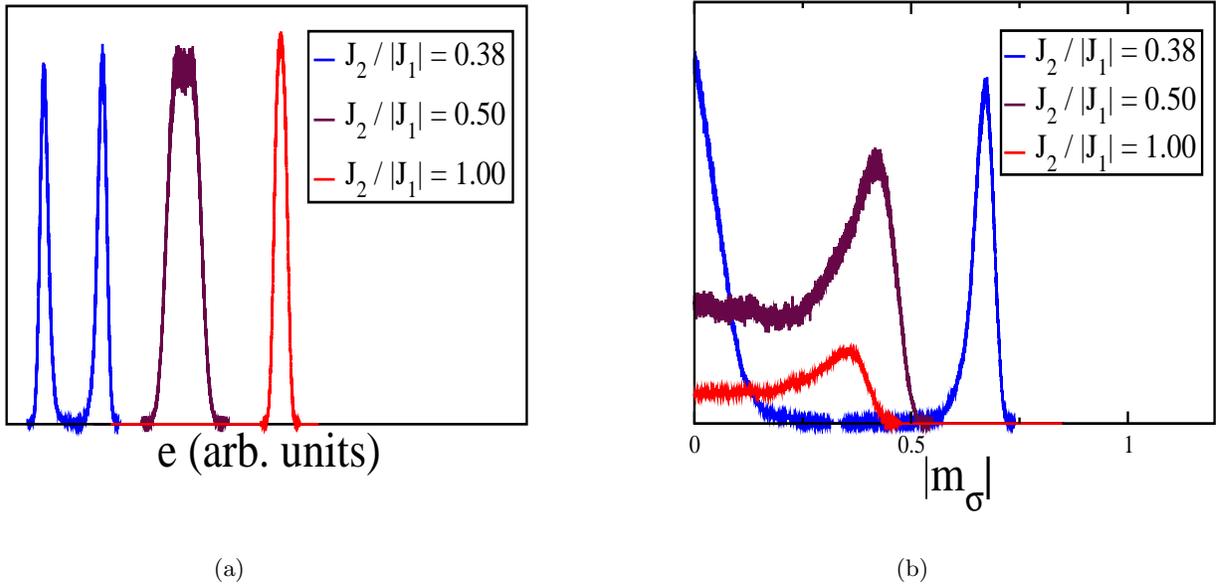


FIG. 2.25 – Histogrammes (en unités arbitraires) d’énergie et de chiralité scalaire d’un échantillon de taille linéaire $L = 64$ à la température de transition chirale, pour différents $J_2/|J_1|$. Fig. 2.25(a) : pour plus de lisibilité l’échelle d’énergie est également arbitraire.

Dans ces conditions on peut envisager que la ligne de transitions chirales du premier ordre faible se termine par un point critique à $J_2/|J_1|$ fini, et dans ce cas la question de la classe d’universalité du point critique se pose.

Dans un autre scénario la transition, ou le cross-over, de confinement-déconfinement des vortex \mathbb{Z}_2 n’a pas lieu tout à fait simultanément avec la transition chirale : on a deux lignes de transition quasiment superposées et indiscernables aux tailles simulées. A mesure que $J_2/|J_1|$ croît les deux transitions se séparent et on peut identifier deux transitions successives avec la température. Une transition, ou un cross-over, à la Kawamura-Miyashita pour les vortex \mathbb{Z}_2 et une transition critique, éventuellement Ising pour la chiralité.

C’est ce qui semble être observé sur le modèle XY complètement frustré sur le réseau carré, *i.e.* un modèle XY frustré par un flux magnétique de π sur chaque plaquette ³¹ : ici encore la frustration induit une brisure de symétrie chirale dans le fondamental. Pour les tailles les plus grandes ($L \lesssim 10^3$), et dans une certaine gamme de paramètres de frustration, les simulations Monte-Carlo montrent successivement la transition KT puis la transition chirale, qui semble être critique dans la classe Ising 2D, à mesure que la température augmente [31].

A l’appui d’un tel scénario pour la phase *cuboc*, on remarque que pour le modèle

³¹Ce modèle est réalisé par exemple dans les réseaux de jonctions Josephson en champ magnétique.

XY complètement frustré, les transitions KT et Ising sont indiscernables dans une certaine gamme de frustration : on observe alors une transition unique, faiblement du premier ordre.

Chapitre 3

Influence des fluctuations quantiques dans la phase *cuboc* à $T = 0$

Les spins en chaque site sont maintenant de *vrais* spins quantiques $1/2$ représentés par les matrices de Pauli, et on se demande l'effet des fluctuations quantiques sur l'ordre classique *cuboc* à 12 sous-réseaux :

- Les fluctuations peuvent désordonner l'état de Néel *cuboc* classique au point de restaurer l'invariance $SU(2)$ du Hamiltonien, auquel cas on obtient un fondamental *purement quantique*, comme un Valence Bond Crystal (brisant le groupe du réseau) ou un liquide RVB (ne brisant ni $SU(2)$ ni le groupe du réseau).
- Dans un autre cas de figure les fluctuations ne font que renormaliser l'ordre classique, sans le détruire. Dans ce cas le fondamental quantique possède exactement les mêmes symétries que le fondamental classique mais les observables prennent des valeurs différentes dans les deux cas : dans un état de Néel quantique l'aimantation normalisée d'un sous réseau est inférieure à $1/2$, par exemple. On peut donc voir ces états comme des états classiques “habillés” par les fluctuations quantiques, et on les qualifie de *semi-classiques*.

Au vu de l'étude classique menée plus haut on commence par tester ce dernier scénario.

3.1 Brisure de $SO(3)$ à la Néel

Pour des spins quantiques, le mécanisme de brisure de $SO(3)$, dit à la Néel, a déjà été décrit sur l'exemple du Néel à trois sous-réseaux sur le triangulaire,

où les diagonalisations exactes avaient d'ailleurs mis fin à la spéculation sur le fondamental du modèle [6, 5].

La brisure de $SO(3)$ dans un état de Néel est moins triviale que pour un ferromagnétique puisqu'il n'y a pas d'aimantation spontanée. Il existe en revanche des sous-réseaux formés d'un nombre *macroscopique* de spins alignés.

Les inégalités de Heisenberg montrent que pour localiser la direction de ces sous-réseaux ferromagnétiques avec une précision $\sim \epsilon$, il faut faire un paquet d'onde d'états propres du Hamiltonien de différents spin totaux $0 \leq S \lesssim 1/\epsilon$.

En particulier la brisure de $SO(3)$ n'a lieu qu'à la limite thermodynamique, avec la superposition d'un nombre macroscopique d'états propres de spin total quelconque : un état fondamental de Néel a donc une dégénérescence macroscopique.

Tour des états de Anderson A taille finie cette famille d'états propres n'est plus dégénérée ¹, et on les appellera QDJS, pour *quasidegenerate joint states*.

Leur superposition décrit maintenant la *dynamique* libre du paramètre d'ordre, *i.e.* les rotations *en bloc* des sous-réseaux : le sous-espace de Hilbert engendré par les QDJS est donc l'analogie de l'espace topologique des paramètres d'ordre (Sec. 2.6.1) pour des spins quantiques.

On cherche maintenant à décrire l'énergie des QDJS.

Considérons un aimant uniaxial, comme l'état de Néel colinéaire usuel sur le réseau carré. En ce qui concerne la dynamique libre du paramètre d'ordre, il n'y a plus que deux degrés de liberté, *i.e.* les deux angles qui localisent l'axe des aimantations : seuls deux des trois générateurs de $SO(3)$ sont brisés ², et on retrouve la physique d'un rotateur rigide.

Pour un aimant biaxial, comme le Néel à trois sous-réseaux sur le triangulaire, les aimantations ne sont plus colinéaires : il faut maintenant trois angles pour localiser le paramètre d'ordre et les trois générateurs de $SO(3)$ sont donc brisés. Dans le cas du triangulaire, il faut deux angles pour localiser la normale au plan des spins et un troisième angle pour localiser la structure à 120° dans ce plan ³. On retrouve alors la physique d'une toupie symétrique.

Pour les deux types de brisure ⁴ la dynamique libre du paramètre d'ordre est celle d'une simple toupie de moment(s) d'inertie $\mathcal{O}(N)$, comme l'aimantation des sous-réseaux. Pour les QDJS on attend donc en première approximation [45]

$$E_{QDJS}(S) \propto S(S+1)/N \quad (3.1)$$

¹A taille finie le fondamental est un état de spin $S=0$ ou $1/2$ selon la parité de la taille N de l'échantillon [3].

²Le troisième générateur est en effet associé aux rotations autour de l'axe des aimantations.

³ $SO(3)$ n'a que trois générateurs et les aimants biaxiaux réalisent donc la brisure "maximale" de $SO(3)$. En particulier, bien que l'ordre *cuboc* soit non-coplanaire, c'est aussi un aimant biaxial : localiser le cube revient en effet à se donner une matrice de rotation (Sec. 2.6.1), c'est à dire trois angles.

⁴On ne peut briser que 0, 2 ou 3 générateurs de $SO(3)$, ce qui correspond à une phase invariante par rotation, à un aimant uniaxial ou biaxial, respectivement. Le caractère non-abélien de $SO(3)$ interdit en effet la brisure d'un seul générateur.

avec S le spin total et N la taille de l'échantillon.

De plus on attend un seul état dans chaque secteur de spin pour la toupie sphérique, contre $2S + 1$ états pour la toupie symétrique [45]⁵.

Les énergies propres sont donc souvent représentées en fonction de $S(S + 1)$ et l'ensemble des QDJS est alors appelé *tour des états* de Anderson⁶.

Dynamique effective du paramètre d'ordre Dans le scénario d'une brisure de $SO(3)$ à la Néel, la physique de basse énergie est donc associée aux rotations *globales* du paramètre d'ordre, qui conservent la norme de l'aimantation des sous-réseaux.

Cette image n'est donc cohérente qu'à la condition de pouvoir "négliger" les excitations de magnon, responsables des fluctuations d'aimantation.

Plus précisément, la dynamique de ces fluctuations doit être bien plus rapide que celle associée aux QDJS : pour la physique aux temps longs on peut alors légitimement intégrer les fluctuations d'aimantation, *i.e.* la dynamique effective au temps longs est simplement la dynamique libre du paramètre d'ordre *renormalisé* par les fluctuations.

Quantitativement, les magnons antiferromagnétiques sont des excitations de spin 1 dont la dispersion est linéaire près des modes mous. La dynamique du magnon le plus "lent" a donc un temps caractéristique $\tau_{mag} \sim \Delta E_{mag}(\mathbf{k})^{-1} \sim k^{-1} \sim \sqrt{N}$ ⁷. D'autre part la vitesse angulaire de rotation d'un solide est $\sim E/S$, avec S le moment cinétique et E l'énergie cinétique.

Si la tour de Anderson contient des états de spin $S \leq S_{max}$, alors la rotation globale du paramètre d'ordre s'effectue sur un temps

$$\tau_{QDJS} \gtrsim (E_{QDJS}(S_{max})/S_{max})^{-1} \sim N/S_{max}, \text{ d'après (3.1).}$$

Le schéma de brisure de $SO(3)$ à la Néel n'est donc auto-cohérent que si

$\tau_{QDJS} < \tau_{mag}$, *i.e.* $S_{max} \lesssim \sqrt{N}$. On en déduit que la tour de Anderson contient $\mathcal{O}(N)$ QDJS pour une brisure uniaxiale, contre $\mathcal{O}(N^{3/2})$ pour une brisure biaxiale. Lorsque la taille N de l'échantillon augmente, la tour (de Pise) de Anderson s'écroule sur le fondamental d'après (3.1), *i.e.* la dynamique libre du paramètre d'ordre renormalisé est de plus en plus lente.

A la limite thermodynamique la dynamique devient nulle, et l'état de Néel renormalisé devient état propre fondamental du Hamiltonien : c'est comme prévu la superposition d'un nombre macroscopique d'états propres de spin quelconque, *i.e.* il brise $SO(3)$.

Numériquement, l'effondrement asymptotique en $\sim 1/N$ de la tour de Anderson est plus facile à observer que l'aimantation d'un sous-réseau, qui ne converge que comme $\sim 1/\sqrt{N}$ vers sa valeur thermodynamique.

⁵Sans compter la dégénérescence triviale associée aux $2S + 1$ valeurs de S^z .

⁶Des tours d'états ont récemment été observées sur des nano-aimants, qui réalisent expérimentalement les petits échantillons qu'on diagonalise [91].

⁷Les modes de Goldstone, et donc la brisure de $SO(3)$, ne sont définis qu'à la limite thermodynamique.

Mais l'intérêt principal d'une analyse extensive de la tour des états est que le nombre et les symétries des QDJS dans chaque secteur de spin sont complètement déterminés par le schéma de brisure de $SO(3)$, *i.e.* par la symétrie du paramètre d'ordre. On va voir dans la suite (Sec. 3.2) que les diagonalisations exactes permettent justement d'obtenir les symétries des états propres.

3.2 Les diagonalisations exactes

Pour un échantillon de taille finie N , la taille de l'espace de Hilbert \mathcal{E}_N ($\dim \mathcal{E}_N = 2^N$) croît exponentiellement avec N et le coût mémoire de la diagonalisation devient rapidement prohibitif.

L'analyse extensive des symétries de \mathcal{H}_N fournit en revanche un ensemble d'opérateurs qui commutent entre eux et avec \mathcal{H}_N , et permet de pré-diagonaliser \mathcal{H}_N en blocs de symétrie donnée. L'intérêt est évidemment que la taille d'un bloc croît moins vite avec N que $\dim \mathcal{E}_N$.

Plus précisément, le groupe de symétrie de \mathcal{H}_N est

$$\mathcal{G}_{\mathcal{H}_N} = O(3) \times G_N$$

où $G_N = T_N \wedge P_N$ est le groupe d'invariance du réseau, soit le produit semi-direct de T_N qui contient les N translations par un vecteur du réseau de Bravais, avec P_N le groupe ponctuel de l'échantillon (en général P_N est un sous-groupe du groupe ponctuel du réseau infini, soit C_{6v} pour le réseau kagomé). On note que $O(3)$ agit dans l'espace des spins.

La bloc-diagonalisation de \mathcal{H}_N correspond à la décomposition de \mathcal{E}_N en sous-espaces associés à une RI de $\mathcal{G}_{\mathcal{H}_N}$ donnée, selon

$$\mathcal{E}_N = \bigoplus_{S,\epsilon,\mu} \mathcal{E}_N(S, \epsilon, \mu)$$

où $\mathcal{E}_N(S, \epsilon, \mu)$ est le sous-espace de \mathcal{E}_N associé à la RI (S, ϵ, μ) de $\mathcal{G}_{\mathcal{H}_N}$, avec $0 \leq S \leq N/2$ le spin de la RI de $SO(3)$, $\epsilon = \pm 1$ la parité sous spin-flip, et μ une RI de G_N .

On diagonalise ensuite chaque bloc avec un algorithme de Lanczos et on obtient les états propres de \mathcal{H} avec leurs symétries. Avec cette méthode on peut aujourd'hui diagonaliser des échantillons de 36 voire 40 spins selon la complexité du Hamiltonien.

3.3 Signature de l'ordre cuboc

On cherche ici à déterminer le nombre et les symétries des QDJS attendus dans chaque secteur de spin, dans le cas d'un fondamental *cuboc* semi-classique. Les symétries des QDJS doivent être compatibles à la fois avec les symétries de

\mathcal{H} , puisqu'ils sont états propres, et avec celles du paramètre d'ordre.

Un résultat classique de théorie des groupes est que le nombre de ces états est complètement déterminé par la structure des deux groupes, comme on va le voir ci-dessous.

Restreignons-nous pour commencer à la brisure de symétrie de rotation. La symétrie $SO(3)$ de \mathcal{H} est réduite dans le fondamental *cuboc* à son sous-groupe \mathcal{O} . Soit D_S une représentation irréductible [RI] de spin S de $SO(3)$ (D_S est une matrice $(2S + 1) \times (2S + 1)$).

Il est clair que D_S est une représentation *à priori* réductible de \mathcal{O} , et on peut donc la décomposer sur les 5 RI Γ_ν de \mathcal{O} , selon

$$D_S = \sum_{\nu=1}^5 n_\nu(S) \Gamma_\nu \quad (3.2)$$

avec

$$n_\nu(S) = \frac{1}{24} \sum_{g \in \mathcal{O}} \chi_\nu^*(g) \chi_S(g)$$

où $\chi_\nu(g)$ et $\chi_S(g)$ sont les caractères de $g \in \mathcal{O}$ dans les RI Γ_ν de \mathcal{O} , et D_S de $SO(3)$, respectivement.

Les $\chi_\nu(g)$ sont donnés dans la table 3.1 et $\chi_S(g) = \frac{\sin((2S+1)\theta/2)}{\sin(\theta/2)}$, avec θ l'angle de la rotation g .

Enfin on calcule explicitement (3.2) pour $S \leq 6$ (Tab. 3.2).

TAB. 3.1 – Tables de caractères des groupes \mathcal{O} et $\{Id, i\}$. Les RI de \mathcal{O} sont données dans la nomenclature usuelle et avec la numérotation $1 \leq \nu \leq 5$ utilisée ici. La table de caractères de $\mathcal{O}_h = \mathcal{O} \times \{Id, i\}$ est le produit direct des 2 tables.

	Id	$8C_3$	$3C_2$	$6C_2$	$6C_4$	ν
A_1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1	2
E	2	-1	2	0	0	3
T_1	3	0	-1	-1	1	4
T_2	3	0	-1	1	-1	5

	Id	i
Γ_e	1	1
Γ_o	1	-1

TAB. 3.2 – Décomposition (3.2) pour $S \leq 6$.

D_0	$=$	A_1								
D_1	$=$	T_1								
D_2	$=$	E	$+$	T_2						
D_3	$=$	A_2	$+$	T_1	$+$	T_2				
D_4	$=$	A_1	$+$	E	$+$	T_1	$+$	T_2		
D_5	$=$	E	$+$	$2T_1$	$+$	T_2				
D_6	$=$	A_1	$+$	A_2	$+$	E	$+$	T_1	$+$	$2T_2$

La décomposition (3.2) donne directement les états de symétrie compatible avec les groupes $SO(3)$ et \mathcal{O} , *i.e.* appartenant simultanément aux RI des deux groupes. On remarque qu'il y en a $2S + 1$ dans le secteur de spin S , comme attendu pour une brisure complète (*i.e.* des trois générateurs) de $SO(3)$ ⁸.

Pour obtenir l'ensemble des QDJS dans chaque secteur de spin, il faut cependant considérer le groupe \mathcal{O}_h en entier et non se limiter à la brisure de symétrie de rotation comme nous l'avons fait jusqu'à présent.

C'est particulièrement simple puisque \mathcal{O}_h est le produit direct de \mathcal{O} avec $\{id, i\}$: le spin-flip étant également une symétrie de \mathcal{H} il n'y a aucun problème de compatibilité.

Concrètement, à chaque fois qu'une RI Γ_ν apparaît dans (3.2), il en arrive en fait deux copies associées aux deux RI de $\{id, i\}$, soit $\Gamma_\nu \times \Gamma_e$ et $\Gamma_\nu \times \Gamma_o$. Ces deux copies ne diffèrent que par leur parité sous l'opération de spin-flip dont on sait qu'elle transforme tout paramètre d'ordre en son image \mathbb{Z}_2 : le doublement du nombre des QDJS attendu est donc une signature claire de la brisure classique \mathbb{Z}_2 sur les spectres quantiques.

Nous avons donc déterminé formellement le nombre et les symétries des QDJS qui apparaissent dans chaque secteur de spin de la tour d'états. Cependant leurs symétries sont obtenues en terme des RI de \mathcal{O}_h alors que les diagonalisations exactes donnent des états propres de symétrie donnée sous les opérations du groupe du réseau G_N : il nous reste donc à trouver un mapping des RI de \mathcal{O}_h vers celles de G_N .

Un tel mapping existe certainement puisque le label des 12 sommets d'un cuboctaèdre induit clairement un label des sites du réseau kagomé (Fig. 2.4). Ainsi une opération de \mathcal{O}_h appliquée à un cuboctaèdre permute ses 12 labels, et cette

⁸La décomposition ne repose comme prévu que sur la structure des deux groupes, en particulier elle ne fait aucune référence à l'espace de représentation $\mathcal{E}_{12} = \bigotimes_{i=1}^{12} \mathcal{D}_{N/24}$, le sous-espace de \mathcal{E}_N des états à 12 sous-réseaux ferromagnétiques. Pour S grand on peut s'attendre à ce que le sous-espace de \mathcal{E}_{12} de spin total S soit de dimension trop petite pour contenir tous les états donnés par (3.2). Un calcul explicite permet cependant de vérifier que le couplage de 12 spins $N/24$ donne plus de $2S + 1$ états de spin total S , au moins pour $S \leq \sqrt{N}$, *i.e.* dans les secteurs où l'on doit identifier les QDJS (Sec. 3.1).

même permutation sur le réseau est équivalente à une opération de G_N .

Par exemple, avec le paramètre d'ordre de la figure 2.4, on peut se convaincre à l'aide d'un schéma que la rotation $C_3^1 \in \mathcal{O}$ (Fig. 2.6) et $T_{\mathbf{u}} R_{2\pi/3} \in G_N$, où $T_{\mathbf{u}}$ et $R_{2\pi/3}$ sont respectivement la translation de vecteur \mathbf{u} sur le réseau et la rotation de $2\pi/3$ autour du centre d'un hexagone, sont deux opérations équivalentes à une même permutation des labels, soit

$$[1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12] \rightarrow [2, 8, 11, 5, 10, 12, 6, 1, 3, 4, 9, 7].$$

Nous avons donc un mapping entre les éléments de \mathcal{O}_h et certains éléments de G_N . Ce mapping n'est en général pas bijectif, et en fait il ne l'est pour aucun des éléments du sous-groupe \mathcal{O} . Cependant le mapping induit entre les RI des deux groupes est quant à lui toujours bijectif, pourvu que G_N soit assez grand (Tab. 3.3).

Une exception notable est le spin-flip qui s'envoie exactement sur la rotation R_π d'angle π autour du centre d'un hexagone. La parité d'un état propre de \mathcal{H} sous R_π est donc directement sa parité sous l'opération de spin-flip. En particulier la brisure \mathbb{Z}_2 est signée par des QDJS apparaissant par paires, avec les parités $\mathcal{R}_\pi = \pm 1$.

En utilisant la table 3.2 et le mapping des RI de \mathcal{O}_h vers celles de G_N (Tab. 3.3) nous sommes donc capables de déterminer complètement les QDJS, dégénérés à la limite thermodynamique, dont on doit faire la superposition pour obtenir un fondamental *cuboc* semi-classique pour des spins 1/2 à $T = 0$.

TAB. 3.3 – Mapping bijectif entre les RI de \mathcal{O}_h et celles de G_N . On considère un échantillon qui a les trois milieux de côté dans sa première zone de Brillouin et dont la symétrie ponctuelle est le groupe C_{6v} entier. C_{6v} est engendré par $R_{2\pi/3}$, la rotation du réseau d'angle $2\pi/3$ autour du centre d'un hexagone, R_π et σ , la réflexion d'axe \mathbf{u} , et les RI de C_{6v} sont désignées par les trois nombres quantiques associés $\mathcal{R}_{2\pi/3}$, \mathcal{R}_π et σ . Les RI de \mathcal{T}_N sont quant à elles repérées par le vecteur \mathbf{k} de la première zone de Brillouin.

\mathcal{O}	\mathbf{k}	$\mathcal{R}_{2\pi/3}$	σ	ν
A_1	$\mathbf{0}$	1	1	1
A_2	$\mathbf{0}$	1	-1	2
E	$\mathbf{0}$	j, j^2		3
T_1	$\mathbf{X}_{1,2,3}$		-1	4
T_2	$\mathbf{X}_{1,2,3}$		1	5

$\{Id, i\}$	\mathcal{R}_π
Γ_e	1
Γ_o	-1

Il reste en fait une dernière subtilité : pour ne pas frustrer artificiellement l'ordre *cuboc* à 12 sous-réseaux on va diagonaliser des échantillons de taille multiple de 12, soit $N = 12, 24$ et 36 spins. Il est clair que les espaces de représentation de ces trois échantillons ont des propriétés différentes selon que le spin total $N/24$

d'un sous-réseau est entier ou demi-entier.

Concrètement, essayons d'écrire la matrice $\hat{U}(g) \in SU(2)$ associée à la rotation $g \in \mathcal{O}$ qui agit sur le ket $|cuboc\rangle$ représentant un cuboctaèdre formé de 12 spins $N/24$.

L'espace de représentation de ces états est un sous-espace de $\mathcal{E}_{12} = \bigotimes_{i=1}^{12} \mathcal{D}_{N/24}$,

avec $\mathcal{D}_{N/24}$ l'espace de Hilbert d'un spin $N/24$. Un choix naturel pour $\hat{U}(g)$ est donc le produit tensoriel de 12 matrices $\hat{U}_{N/24}(g)$ représentant chacune la rotation g dans $\mathcal{D}_{N/24}$.

Cependant, du fait de la double connexité de $SO(3)$, les matrices $\hat{U}_{N/24}(g)$ et $-\hat{U}_{N/24}(g)$ sont deux représentations différentes mais également valables de la rotation g lorsque $N/24$ est demi-entier : le choix de l'une ou l'autre est un choix de jauge, qui ne peut être qu'arbitraire (Sec. 2.6.3).

En particulier, $g \rightarrow \hat{U}_{N/24}(g)$ n'est pas une représentation *vraie* de $SO(3)$ (ni *a fortiori* de \mathcal{O}) puisque le degré de liberté de jauge conduit à une loi de groupe modifiée d'un facteur de phase arbitraire : on a plutôt obtenu une représentation *projective* de $SO(3)$.

De la même manière que précédemment, on fixe arbitrairement la jauge en demandant par exemple que l'angle de g soit dans $[0, \pi]$, et ce pour tous les $g \in \mathcal{O}$. Dans cette jauge on détermine $\hat{U}_{N/24}(g)$, puis on forme le produit tensoriel $\hat{U}(g)$ qu'on applique à un ket $|cuboc\rangle$.

On obtient

$$\hat{U}(g) |cuboc\rangle = \varphi(g) |cuboc'\rangle$$

où $|cuboc'\rangle$ représente le cuboctaèdre obtenu en appliquant $g \in \mathcal{O}$ au cuboctaèdre représenté par $|cuboc\rangle$, et $\varphi(g)$ est un facteur de phase global qui dépend *a priori* de la jauge que nous avons choisie.

On se souvient alors que $\hat{U}(g)$ agit dans le sous-espace \mathcal{E}_{12} des états de 12 spins $N/24$, qui sont toujours des états de spin total *entier*, que $N/24$ soit entier ou demi-entier. Les $\hat{U}(g)$ forment donc une représentation *vraie* de \mathcal{O} , et ils vérifient donc la loi de groupe exactement.

En particulier la phase $\varphi(g)$ ne peut pas être arbitraire, *i.e.* c'est une quantité invariante de jauge : on remarque en effet que $g \rightarrow \hat{U}(g)$ n'est une représentation vraie de \mathcal{O} qu'à la condition que $\varphi(g)$ vérifie elle aussi la loi de groupe. On en déduit que $g \rightarrow \varphi(g)$ est une représentation de dimension 1 (et donc irréductible) de \mathcal{O} .

Un calcul direct pour $N = 12, 24$ et 36 spins montre en effet que

$$\varphi(g) = \chi_{\nu_0}(g) \text{ où } \nu_0 = \begin{cases} 1 & \text{si } N/24 \in \mathbb{N} \\ 2 & \text{si } N/24 \in \mathbb{N} + \frac{1}{2} \end{cases}$$

Pour inclure ce résultat dans la décomposition (3.2) il suffit donc de permuter

$A_1 \leftrightarrow A_2$ et $T_1 \leftrightarrow T_2$ dans la table 3.2 pour $N = 12$ et 36 spins, comme on peut le voir directement sur la table de caractères de \mathcal{O} (Tab. 3.1).

3.4 Analyse des spectres

On applique le raisonnement de la partie précédente pour trouver le nombre et les symétries des QDJS attendus pour des échantillons de taille $N = 12, 24$ et 36 spins, que l'on va comparer au résultat des diagonalisations exactes.

On reprend donc la Table 3.2 dans laquelle on permute $A_1 \leftrightarrow A_2$ et $T_1 \leftrightarrow T_2$ pour $N = 12$ et 36.

On se souvient qu'on a en réalité deux copies $\mathcal{R}_\pi = \pm 1$ de chaque RI de \mathcal{O} lorsque l'on considère \mathcal{O}_h entier.

On mappe ensuite les RI de \mathcal{O} sur les RI de G_N et il nous faut alors spécifier la forme de l'échantillon (Fig. 3.1).

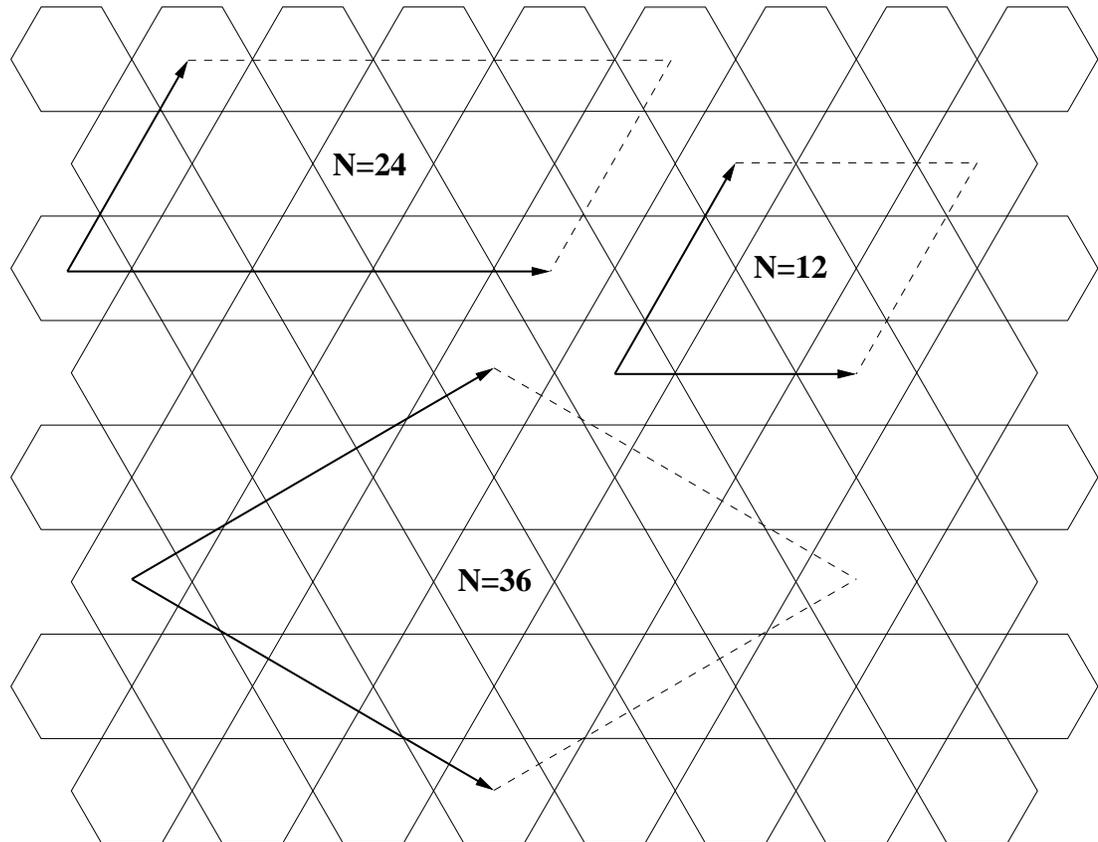


FIG. 3.1 – Échantillons $N = 12, 24$ et 36.

Le groupe ponctuel des échantillons $N = 12$ et 36 est C_{6v} entier et on peut

utilise donc directement la table 3.4.

Pour $N = 24$ le groupe ponctuel est réduit à $\{Id, R_\pi\}$: la partie $\{Id, i\}$ de \mathcal{O}_h se mappe donc sur $\{Id, R_\pi\}$ tandis que les RI de \mathcal{O} se mappent sur les RI du groupe des translations \mathcal{T}_N . On remarque en particulier que les trois milieux de côtés ne sont plus dans la même orbite pour $N = 24$ et ils ne forment plus une RI unique $\mathbf{k} = \mathbf{X}_{1,2,3}$ de dimension 3 comme c'était le cas pour l'échantillon $N = 36$: on a en revanche trois RI de dimension 1 qu'on note $\mathbf{k} = \mathbf{X}$ (Tab. 3.5).

Dans les deux cas on note que le nombre d'états dans le secteur de spin total S vaut $2(2S + 1)$, comme attendu pour une brisure totale de $SO(3)$, où le facteur 2 est réminiscent de la brisure de symétrie chirale dans la phase *cuboc*.

TAB. 3.4 – Nombre et symétries des QDJS de spin total $S \leq 6$ pour les échantillons de symétrie ponctuelle C_{6v} ($N = 12$ et 36). Chaque RI (de dimension d) apparaît en fait deux fois avec $\mathcal{R}_\pi = \pm 1$, comme on l'indiquera dans la suite avec les indices e (even) et o (odd). Le nombre total de QDJS de spin S est $2n(S)$ où $n(S)$ est indiqué à la dernière ligne, le facteur 2 signant la brisure \mathbb{Z}_2 .

S					0	1	2	3	4	5	6
1	$\mathbf{k} = \mathbf{0}$	$\mathcal{R}_{2\pi/3}=1$	$\sigma = 1$	d=1	0	0	0	1	0	0	1
2	$\mathbf{k} = \mathbf{0}$	$\mathcal{R}_{2\pi/3}=1$	$\sigma = -1$	d=1	1	0	0	0	1	0	1
3	$\mathbf{k} = \mathbf{0}$	$\mathcal{R}_{2\pi/3}=j, j^2$		d=2	0	0	1	0	1	1	1
4	$\mathbf{k} = \mathbf{X}_{1,2,3}$		$\sigma = -1$	d=3	0	0	1	1	1	1	2
5	$\mathbf{k} = \mathbf{X}_{1,2,3}$		$\sigma = 1$	d=3	0	1	0	1	1	2	1
$n(S)$					1	3	5	7	9	11	13

TAB. 3.5 – Nombre et symétries des QDJS de spin total $S \leq 4$ pour l'échantillon $N = 24$ de symétrie ponctuelle réduite à $\{Id, R_\pi\}$. Chaque RI de \mathcal{T}_N (identifiée par \mathbf{k}) apparaît deux fois avec $\mathcal{R}_\pi = \pm 1$.

S			0	1	2	3
1	$\mathbf{k} = \mathbf{0}$	d=1	1	0	2	1
2	$\mathbf{k} = \mathbf{X}$	d=1	0	3	3	6
$n(S)$			1	3	5	7

On peut maintenant comparer ces résultats aux spectres obtenus par diagonalisation exacte de \mathcal{H} pour $N = 12$ (Fig. 3.2), $N = 24$ (Fig. 3.3) et $N = 36$ (Fig. 3.4).

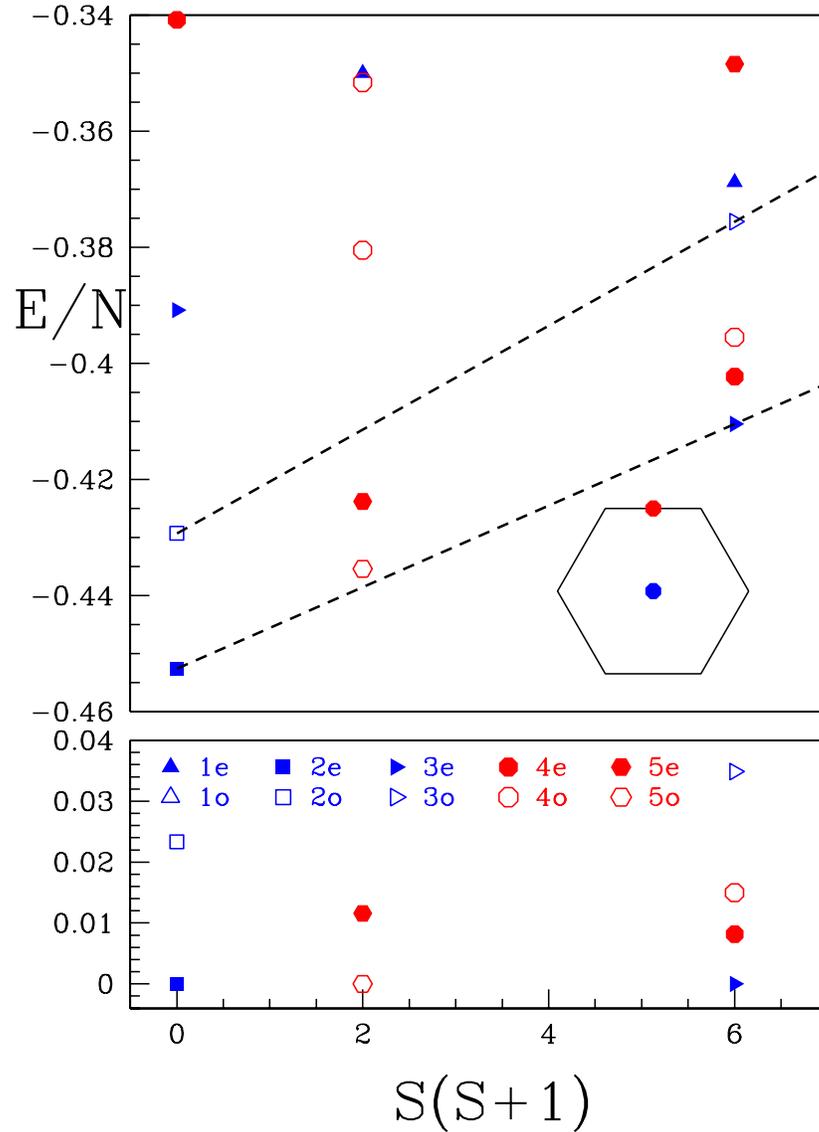


FIG. 3.2 – Haut : Spectre exact du Hamiltonien (3.6), avec $J_1=-1$ et $J_2=0.5$, pour l'échantillon $N = 12$. On dessine les énergies exactes par spin *vs.* $S(S+1)$ pour un spin total $0 \leq S \leq 2$. La couleur indique le vecteur \mathbf{k} de la première zone de Brillouin et le symbole donne la RI G_N à laquelle appartient l'état propre (la numérotation est celle de la table 3.4). Les QDJS attendus pour un ordre *cuboc* semi-classique apparaissent entre les 2 lignes pointillées. Bas : Zoom sur les QDJS (énergies arbitraires).

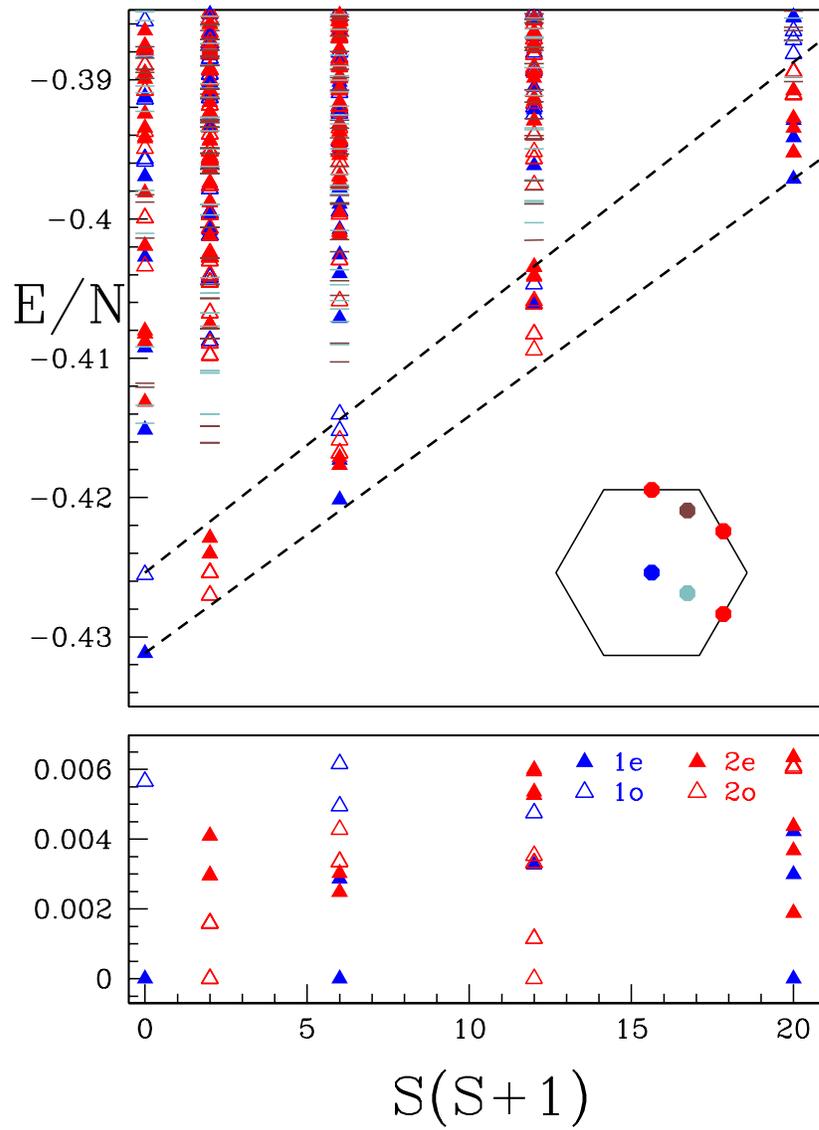


FIG. 3.3 – Spectre exact du Hamiltonien (3.6), avec $J_1=-1$ et $J_2=0.5$, pour l'échantillon $N = 24$. On a représenté les secteurs de spin total $0 \leq S \leq 4$ et la numérotation des RI est celle de la table 3.5.

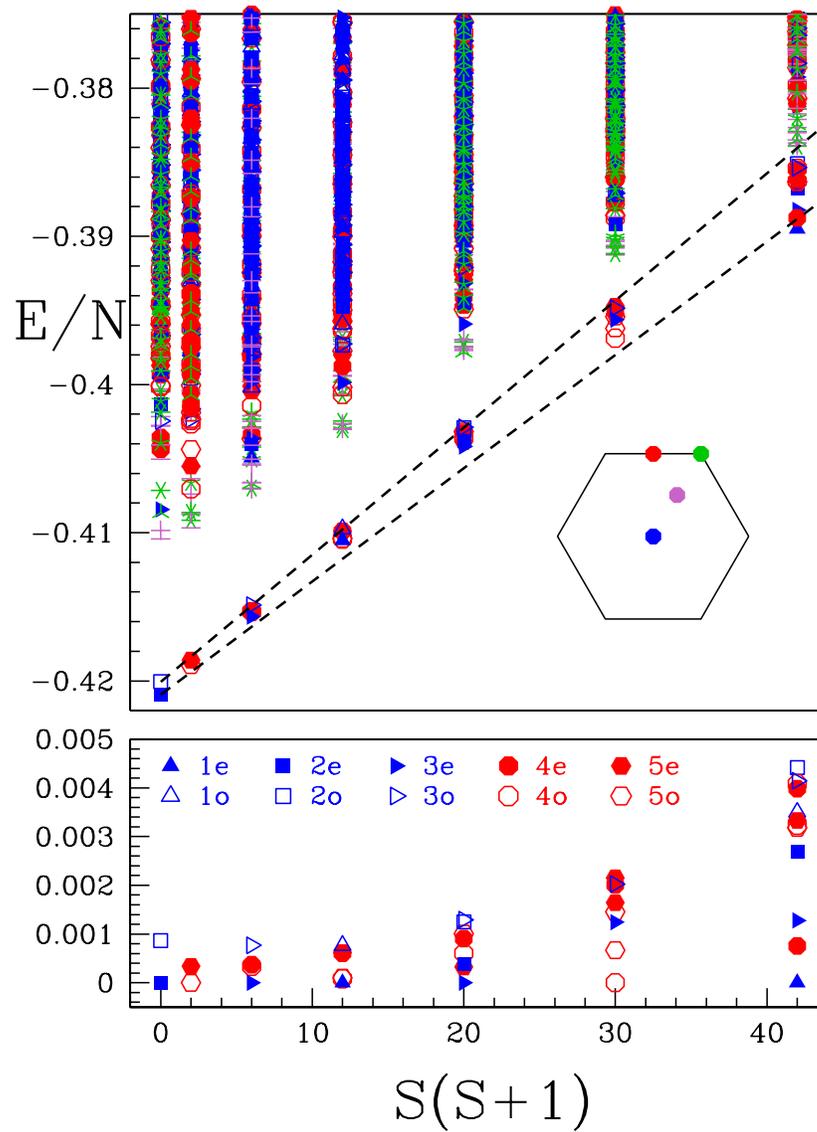


FIG. 3.4 – Haut : Spectre exact du Hamiltonien (3.6), avec $J_1=-1$ et $J_2=0.5$, pour l'échantillon $N = 36$. On a représenté les secteurs de spin total $0 \leq S \leq 6$ et la numérotation des RI est celle de la table 3.4.

Pour les trois échantillons une famille d'états propres de basse énergie se détache effectivement des excitations de magnon, et leurs énergies obéissent raisonnablement à la loi d'échelle en $S(S+1)$, en accord avec le scénario de brisure de $SO(3)$ à la Néel.

L'information la plus forte ressort cependant de l'examen attentif des symétries de ces états : dans chaque secteur de spin, leur nombre et leurs symétries sont

exactement ceux prédits par notre analyse des symétries du paramètre d'ordre, comme on peut le vérifier facilement sur les vues de détail du bas des spectres. En particulier on a bien $2(2S + 1)$ QDJS de spin S jusqu'à $S \lesssim \sqrt{N}$ ⁹, en accord avec ce le scénario d'une brisure complète de $SO(3)$ à la limite thermodynamique, le facteur 2 provenant des deux répliques $\mathcal{R}_\pi = \pm 1$ de chaque QDJS et qui rend compte de la brisure \mathbb{Z}_2 dans les spectres quantiques. On donne sur la table 3.6 le détail des énergies par spin et des symétries des QDJS obtenus dans les secteurs de spin $S \leq 4$ pour l'échantillon $N = 36$.

TAB. 3.6 – Énergies par spin et symétries des premiers états propres de (3.6) pour $S \leq 4$ et $N = 36$.

S	$E/N J_1 $	RI
0	-0.420920074	2e
0	-0.4200543165	2o
1	-0.4189355373	5o
1	-0.418596983	5e
2	-0.4156541824	3e
2	-0.4153173566	4o
2	-0.4152827263	4e
2	-0.4148859382	3o
3	-0.4105060697	1e
3	-0.410423696	4o
3	-0.4104035497	5o
3	-0.4098987579	4e
3	-0.409886241	5e
3	-0.409738183	1o
4	-0.4041817784	3e
4	-0.4038558602	5e
4	-0.4037970304	2e
4	-0.4035743475	4o
4	-0.4032725096	4e
4	-0.4031726122	5o
4	-0.4029286504	2o
4	-0.4028885961	3o

⁹Il apparaît qu'un grand nombre d'excitations tombe sur les QDJS de la tour à aimantation $1/3$, soit $S = N/6$, comme on peut s'en rendre compte sur la figure 3.4 par exemple : on retrouve la grande densité d'états de basse énergie dans laquelle figurent probablement les états responsables du plateau transitoire à $1/3$ expérimental (section 1). On n'analysera donc les états de la tour que pour $S \leq N/6$ et la limite $S = \sqrt{N}$ ne sera atteinte que pour $N \geq 36$.

Evidemment le scénario d'une brisure de $SO(3)$ à la Néel requiert l'effondrement de la tour lorsque la taille de l'échantillon augmente : sur la figure 3.5 on montre la fermeture du gap de spin $\Delta_N = E_0(S=1) - E_0(S=0) \sim 1/N$, en accord avec (3.1).

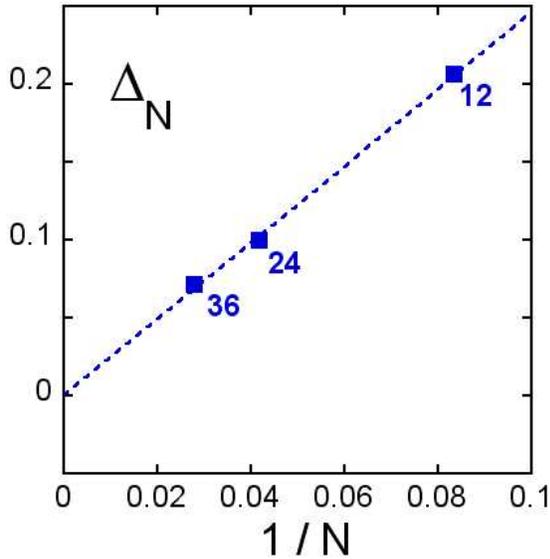


FIG. 3.5 – Effet de taille sur le gap de spin Δ_N à $J_2/|J_1| = 0.5$. Le gap se ferme en $1/N$ en accord avec le schéma de brisure de $SU(2)$ à la Néel.

A priori plus l'échantillon est petit plus son fondamental peut être quantique, au sens où les fluctuations quantiques permettent des résonances liées aux conditions périodiques et donc dépendantes de l'échantillon.

Le fait que l'ordre *cuboc* à 12 sous-réseaux ait tendance à se développer sur les plus petits échantillons renforce notre conviction qu'au moins dans une certaine gamme de couplages $J_2/|J_1|$, le fondamental quantique est un ordre *cuboc* classique renormalisé les fluctuations quantiques.

On peut cependant objecter que les fluctuations quantiques qui renormalisent le plus l'ordre classique, et qui sont donc le plus susceptibles de détruire l'ordre *cuboc*, sont les fluctuations de grande longueur d'onde.

Il est clair que les diagonalisations exactes ne peuvent rendre compte de l'influence de ces fluctuations puisque leur longueur d'onde est bornée au cut-off naturel, *i.e.* la taille linéaire de l'échantillon.

Pour calculer la contribution des fluctuations de grande longueur d'onde, et vérifier la stabilité de l'ordre *cuboc* semi-classique lorsque $N \rightarrow \infty$, le prix à payer est d'abandonner l'approche exacte en faisant une approximation sur les fluctuations quantiques, ici l'approximation semi-classique ou approximation des ondes de spin.

3.5 Approche semi-classique

On calcule ici l'influence des fluctuations de grande longueur d'onde sur l'énergie, l'aimantation des sous-réseaux et la chiralité scalaire, dans le fondamental *cuboc* et dans l'approximation des ondes de spin.

L'approche que l'on suit est standard : on choisit un ordre classique *cuboc*, disons celui de la figure 2.4, et on construit une base locale dont l'axe \mathbf{z}_i au site i est aligné avec le spin local \mathbf{S}_i .

Dans la base locale, l'état *cuboc* est donc simplement l'état ferromagnétique auquel on sait appliquer la transformation de Holstein-Primakov.

Pour construire une telle base locale $(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i, \mathbf{z}_i)$ il reste donc à trouver \mathbf{x}_i et \mathbf{y}_i en chaque site. Il y a une infinité de solutions et on s'attache donc à trouver une construction invariante par translation pour simplifier les calculs ultérieurs.

Chaque site i appartient à deux triangles pointe en haut et pointe en bas. Considérons les deux autres sites du triangle pointe en bas et appelons-les (j, k) avec (i, j, k) tournant dans le sens des aiguilles d'une montre. Les directions des spins j et k sont \mathbf{z}_j et \mathbf{z}_k et on vérifie facilement sur la figure 2.4 que $\mathbf{x}_i = (\mathbf{z}_k - \mathbf{z}_j)/\sqrt{2}$ est bien un vecteur unitaire orthogonal à \mathbf{z}_i . On détermine complètement la base locale en imposant $\mathbf{y}_i = \mathbf{z}_i \wedge \mathbf{x}_i$.

La construction est bien invariante par translation et en la répétant sur tous les sites du réseau on obtient 12 bases locales associées aux 12 sous-réseaux du fondamental classique. En utilisant les 12 matrices de passage \mathcal{R}_i du trièdre de référence $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ aux trièdres locaux on obtient les composantes de chaque spin dans sa base locale $\mathbf{S}'_i = (S_i^{x_i}, S_i^{y_i}, S_i^{z_i})$ par $\mathbf{S}_i = \mathcal{R}_i \mathbf{S}'_i$.

On peut maintenant écrire le Hamiltonien dans le référentiel local. On commence par le réécrire comme une somme sur les $N/3$ hexagones (Fig. 3.6)

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\diamond} \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\diamond} \sum_{\langle\langle i, k \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k \quad (3.3)$$

où $\langle i, j \rangle$ et $\langle\langle i, k \rangle\rangle$ sont maintenant respectivement les 6 liens plus proches voisins et les 6 liens seconds plus proches voisins de l'hexagone \diamond . Puis on utilise $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \mathbf{S}'_i T_{ij} \mathbf{S}'_j$ avec $T_{ij} = {}^t \mathcal{R}_i \mathcal{R}_j$ pour réécrire (3.3) dans le référentiel local

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\diamond} \sum_{\langle i, j \rangle} \mathbf{S}'_i T_{ij} \mathbf{S}'_j + J_2 \sum_{\diamond} \sum_{\langle\langle i, k \rangle\rangle} \mathbf{S}'_i T_{ik} \mathbf{S}'_k \quad (3.4)$$

Nous sommes alors prêts à quantifier les fluctuations autour de l'ordre *cuboc* classique en utilisant des bosons de Holstein-Primakov dont les opérateurs de création/annihilation au site i seront notés c_i/c_i^\dagger .

Comme annoncé plus haut, pour aller jusqu'à la limite thermodynamique il nous faut faire une approximation sur les fluctuations quantiques : on suppose que l'amplitude des fluctuations est faible, *i.e.* le nombre de déviations à l'ordre classique,

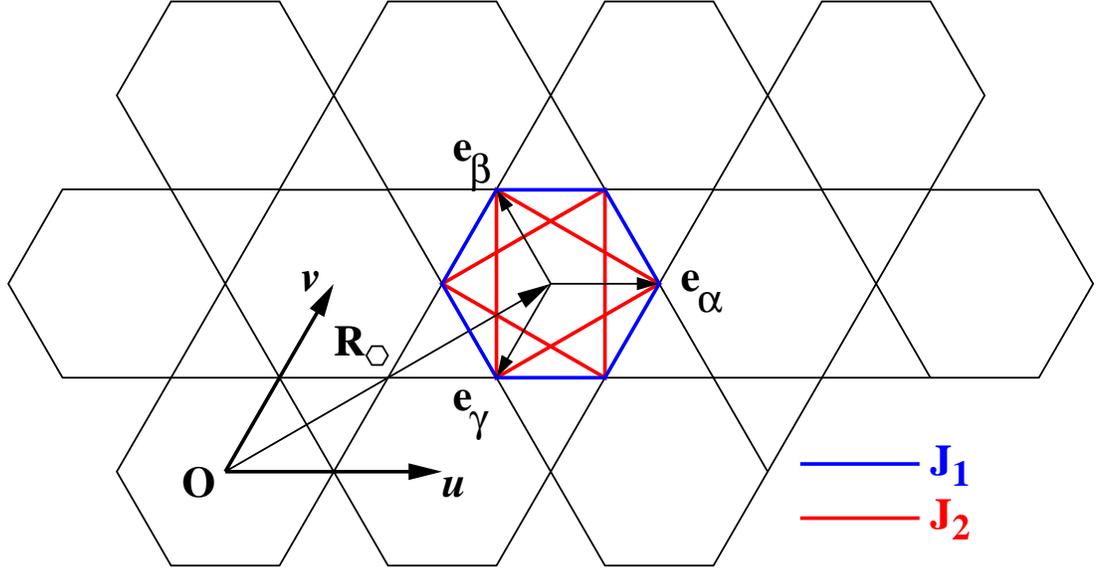


FIG. 3.6 – Réseau kagomé avec échange entre premiers (bleu) et seconds voisins (rouge). On remarque qu'en considérant les 12 liens d'un hexagone \square situé en \mathbf{R}_{\square} et en itérant \mathbf{R}_{\square} sur l'ensemble du réseau de Bravais on obtient tous les liens premiers et seconds voisins de l'échantillon. Les trois sites α, β, γ par cellule de Bravais définissent les trois vecteurs unitaires $\mathbf{e}_{\alpha} = \mathbf{u}/2$, $\mathbf{e}_{\beta} = (\mathbf{v} - \mathbf{u})/2$ and $\mathbf{e}_{\gamma} = -\mathbf{v}/2$.

soit le nombre de bosons, est petit¹⁰. On retiendra donc les termes jusqu'à l'ordre quadratique en c_i, c_i^{\dagger} dans le Hamiltonien, et donc on linéarise la transformation de Holstein-Primakov selon

$$\begin{cases} S_i^{'+} &= S_i^{x_i} + jS_i^{y_i} &= \sqrt{2S - n_i} c_i \simeq \sqrt{2S} c_i \\ S_i^{'-} &= S_i^{x_i} - jS_i^{y_i} &= c_i^{\dagger} \sqrt{2S - n_i} \simeq \sqrt{2S} c_i^{\dagger} \\ S_i^{'z} &= S_i^{z_i} &= S - n_i \end{cases} \quad (3.5)$$

avec S la longueur du spin local et $n_i = c_i^{\dagger} c_i$. En substituant (3.5) dans (3.4) on obtient la version quantifiée du Hamiltonien (3.6) jusqu'à l'ordre quadratique. On passe ensuite dans l'espace de Fourier par

$$c_i = \sqrt{\frac{3}{N}} \sum_{\mathbf{q}} e^{-j\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}_{\square} + \mathbf{e}_{\alpha_i})} c_{\mathbf{q}}^{\alpha_i}$$

où l'on somme sur la première zone de Brillouin, \mathbf{R}_{\square} est un vecteur du réseau de Bravais et $\alpha_i = \alpha, \beta, \gamma$ indique l'un des trois sites de la cellule de Bravais (Fig. 3.6).

¹⁰En fait la transformation de Holstein-Primakov n'est même pas définie pour $c_i^{\dagger} c_i > 2S$.

On a donc trois types de bosons et on met le Hamiltonien sous la forme matricielle selon

$$\mathcal{H} = (J_1 - J_2)NS(S + 1) + \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}^{\dagger} M_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \quad (3.6)$$

où l'on somme sur la première zone de Brillouin, $V_{\mathbf{q}}$ est le vecteur colonne $(c_{\mathbf{q}}^{\alpha}, c_{\mathbf{q}}^{\beta}, c_{\mathbf{q}}^{\gamma}, c_{-\mathbf{q}}^{\alpha\dagger}, c_{-\mathbf{q}}^{\beta\dagger}, c_{-\mathbf{q}}^{\gamma\dagger})$, et $M_{\mathbf{q}}$ est la matrice 6×6

$$M_{\mathbf{q}} = (J_2 - J_1)S \mathbb{1} + \begin{pmatrix} A_{\mathbf{q}} & B_{\mathbf{q}} \\ B_{-\mathbf{q}} & A_{-\mathbf{q}} \end{pmatrix} \text{ avec } \mathbb{1} \text{ la matrice identité, et}$$

$$A_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} 0 & a_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) & a_{\alpha\gamma}(\mathbf{q}) \\ a_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) & 0 & a_{\beta\gamma}(\mathbf{q}) \\ a_{\alpha\gamma}(\mathbf{q}) & a_{\beta\gamma}(\mathbf{q}) & 0 \end{pmatrix}$$

et

$$B_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} 0 & b_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) & b_{\alpha\gamma}(\mathbf{q}) \\ b_{\alpha\beta}(-\mathbf{q}) & 0 & b_{\beta\gamma}(\mathbf{q}) \\ b_{\alpha\gamma}(-\mathbf{q}) & b_{\beta\gamma}(-\mathbf{q}) & 0 \end{pmatrix}$$

avec

$$\begin{aligned} a_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) &= \frac{J_2 S}{4} \cos q_{\beta-\alpha} - \frac{J_1 S}{4} \cos q_{\gamma} - \frac{J_1 S}{\sqrt{2}} \sin q_{\gamma} \\ b_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) &= \frac{J_2 S}{4} \cos q_{\beta-\alpha} - \frac{J_1 S}{4} \cos q_{\gamma} + \frac{J_2 S}{\sqrt{2}} \sin q_{\beta-\alpha} \end{aligned}$$

les quatre autres éléments de matrice s'obtenant simplement par permutation circulaire des indices (α, β, γ) . On a utilisé la notation condensée $q_{\beta-\alpha} = \mathbf{q} \cdot (\mathbf{e}_{\beta} - \mathbf{e}_{\alpha})$. Le premier terme de (3.6) contient la contribution dominante habituelle à la renormalisation de l'énergie du fondamental *cuboc* classique, soit $(J_1 - J_2)NS^2$.

D'autre part, l'hermiticité de $M_{\mathbf{q}}$ est assurée par $A_{\mathbf{q}}^{\dagger} = A_{\mathbf{q}}$ et $B_{\mathbf{q}}^{\dagger} = B_{-\mathbf{q}}$.

L'étape suivante est la diagonalisation de $M_{\mathbf{q}}$ par une matrice $P_{\mathbf{q}}$. Il est clair que $P_{\mathbf{q}}$ est fortement contrainte par le fait qu'elle doit préserver les relations de commutation [23], de la même manière que la transformation de Bogoliubov pour l'état de Néel colinéaire sur le réseau carré.

On obtient alors trois types de bosons de Bogoliubov dans le vecteur colonne $W_{\mathbf{q}} = (d_{\mathbf{q}}^{\alpha}, d_{\mathbf{q}}^{\beta}, d_{\mathbf{q}}^{\gamma}, d_{-\mathbf{q}}^{\alpha\dagger}, d_{-\mathbf{q}}^{\beta\dagger}, d_{-\mathbf{q}}^{\gamma\dagger}) = P_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}$ et des six valeurs propres on tire les trois nappes de dispersion $\omega_{\mathbf{q}}^{\mu}$.

Dans la nouvelle base (3.6) s'écrit

$$\mathcal{H} = (J_1 - J_2)NS(S + 1) + \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mu=\alpha,\beta,\gamma} \omega_{\mathbf{q}}^{\mu} (d_{\mathbf{q}}^{\mu\dagger} d_{\mathbf{q}}^{\mu} + \frac{1}{2}) \quad (3.7)$$

L'inspection de (3.7) montre clairement que le fondamental est simplement le vide de bosons de Bogoliubov $d_{\mathbf{q}}^{\mu}$, qu'on note $|0\rangle$, si bien que l'énergie par spin

dans le fondamental vaut

$$e_0^N = \frac{1}{N} \langle 0 | \mathcal{H} | 0 \rangle = (J_1 - J_2) S(S+1) + \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mu=\alpha,\beta,\gamma} \omega_{\mathbf{q}}^{\mu} \quad (3.8)$$

Comme pour l'ordre de Néel colinéaire, il est clair que la transformation de Bogoliubov $P_{\mathbf{q}}$ est singulière dès que $\omega_{\mathbf{q}}^{\mu} = 0$, c'est-à-dire aux points mous : on vérifie que la nappe de dispersion la plus basse s'annule aux trois milieux de côtés $\mathbf{q} = \mathbf{X}_{1,2,3}$.

Lorsque $N \rightarrow \infty$ le *cut-off* naturel en $1/L \sim 1/\sqrt{N}$ dans l'espace de Fourier disparaît et l'on obtient aux trois milieux de côté les trois modes de Goldstone attendus pour briser complètement $SO(3)$ à la limite thermodynamique : c'est précisément la contribution de ces modes que l'on cherche ¹¹.

A taille finie, pour calculer la renormalisation des observables on peut toujours enlever les trois singularités $\mathbf{q} = \mathbf{X}_{1,2,3}$, l'erreur relative commise sur la renormalisation totale n'étant qu'un $\mathcal{O}(1/N)$.

On calcule ensuite la renormalisation de l'aimantation des sous-réseaux, *i.e.* de l'aimantation dans le référentiel local

$$m^N = \frac{1}{NS} \langle 0 | \sum_{i=1}^N S_i^{z_i} | 0 \rangle = 1 + \frac{1}{S} \left(1 - \frac{1}{N} \sum'_{\mathbf{q}} \sum_{i,j=1}^3 (P_{\mathbf{q}}^{i,j})^2 \right) \quad (3.9)$$

où le prime souligne que l'on somme sur la première zone de Brillouin privée de ses trois milieux de côté et où $P_{\mathbf{q}}^{i,j}$ est l'élément de matrice (i, j) de $P_{\mathbf{q}}$.

On s'intéresse également à la renormalisation du paramètre d'ordre associé à la brisure de \mathbb{Z}_2 dans la phase *cuboc*, soit la chiralité scalaire.

Le produit mixte de trois spins sur un triangle est normalisé naturellement par sa valeur classique dans la phase *cuboc*, et on définit donc $\xi_{\Delta} = \frac{\sqrt{2}}{S^3} (\mathbf{S}_i \wedge \mathbf{S}_j) \cdot \mathbf{S}_k$ sur chaque triangle (i, j, k) , avec (i, j, k) tournant dans le sens des aiguilles d'une montre. La renormalisation de la chiralité scalaire alternée est alors

$$m_{\xi}^N = \frac{3}{2N} \langle 0 | \sum_{\Delta} (-1)^{\alpha_{\Delta}} \xi_{\Delta} | 0 \rangle = 1 + \frac{3}{S} \left(1 - \frac{1}{N} \sum'_{\mathbf{q}} \mathcal{D}_{\mathbf{q}} \right), \quad (3.10)$$

où l'on a sommé sur les $2N/3$ triangles du réseau kagomé et α_{Δ} vaut 0 sur les triangles pointe en haut et 1 sur les triangles pointe en bas.

¹¹Plus précisément les modes de Goldstone sont définis asymptotiquement à la limite thermodynamique comme les modes $\delta \mathbf{q}_i = \mathbf{q} - \mathbf{X}_i$ de norme $\|\delta \mathbf{q}_i\| \sim 1/\lambda \sim 1/L \rightarrow 0$ lorsque $N \rightarrow \infty$. De façon équivalente on pourrait travailler dans la première zone de Brillouin *réduite*. Les trois milieux de côté \mathbf{X}_i sont alors repliés au centre de zone $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ et les trois modes de Goldstone sont alors directement des modes \mathbf{q} de norme $\|\mathbf{q}\| \sim 1/L \rightarrow 0$ lorsque $N \rightarrow \infty$.

Enfin

$$\mathcal{D}_q = \sum_{i,j=1}^3 (P_q^{i,j})^2 \left(\begin{array}{l} \cos q_\alpha (P_q^{2,j} + P_q^{5,j})(P_q^{3,j} + P_q^{6,j}) \\ + \cos q_\beta (P_q^{1,j} + P_q^{4,j})(P_q^{3,j} + P_q^{6,j}) \\ + \cos q_\gamma (P_q^{1,j} + P_q^{4,j})(P_q^{2,j} + P_q^{5,j}) \\ + \frac{\sqrt{2}}{3} \sin q_\alpha (P_q^{5,j} P_q^{6,j} - P_q^{2,j} P_q^{3,j}) \\ + \frac{\sqrt{2}}{3} \sin q_\beta (P_q^{4,j} P_q^{6,j} - P_q^{1,j} P_q^{3,j}) \\ + \frac{\sqrt{2}}{3} \sin q_\gamma (P_q^{4,j} P_q^{5,j} - P_q^{1,j} P_q^{2,j}) \end{array} \right) \quad (3.11)$$

La diagonalisation et le calcul des observables est mené numériquement sur des échantillons de taille linéaire $L \leq 600$ pas du réseau de Bravais.

Les effets de taille finie sur les observables sont contrôlés par l'énergie du premier magnon qui s'annule en $1/L$ aux trois milieux de côté, et on attend les lois d'échelles asymptotique $e_0^N \sim 1/L^3$, $m^N \sim 1/L$ et $m_\xi^N \sim 1/L$.

En particulier on s'attend à ce que l'énergie converge beaucoup plus vite vers son asymptote que les paramètres d'ordre, ce qu'on vérifie sur les figures 3.7 et 3.8.

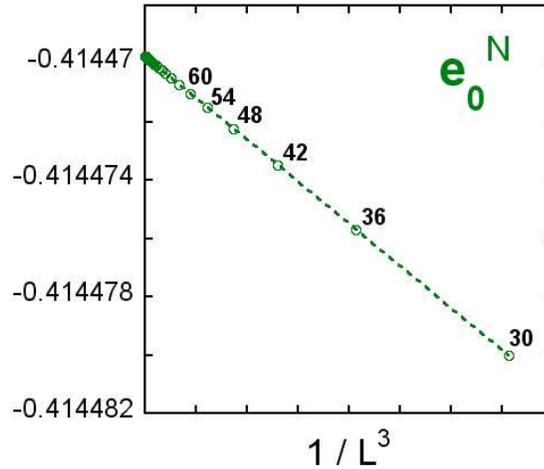


FIG. 3.7 – Effets de taille finie à $J_1 = -1$ et $J_2 = 0.5$ sur e_0^N (Fig. 3.7). Les premières tailles linéaires sont indiquées en noir.

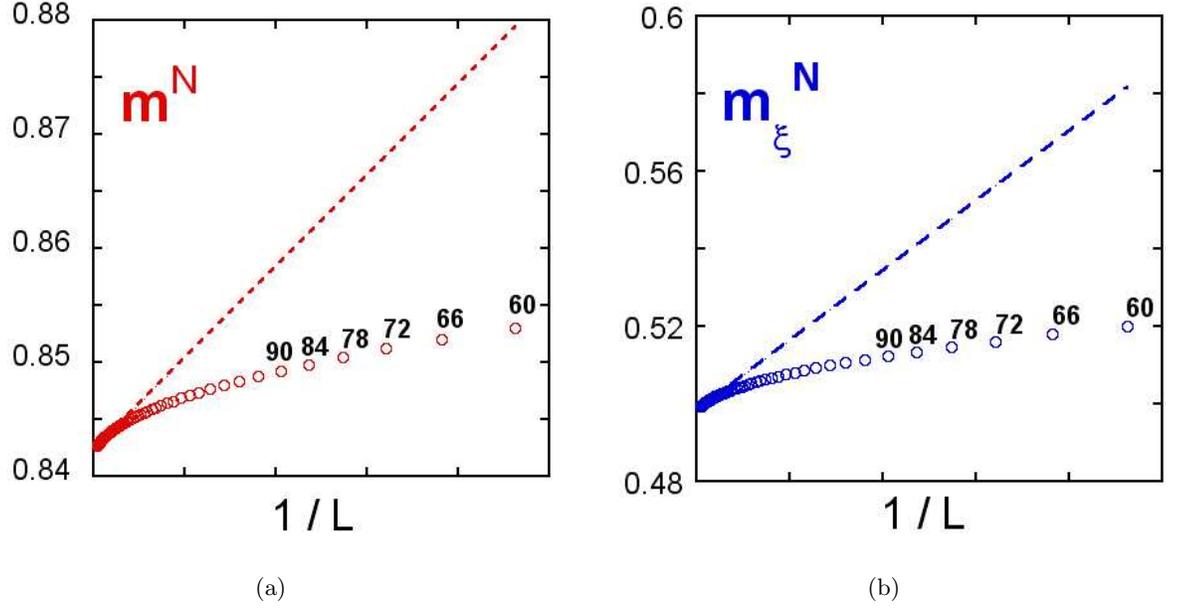


FIG. 3.8 – Effets de taille finie à $J_1 = -1$ et $J_2 = 0.5$ sur m^N (Fig. 3.8(a)) et m_ξ^N (Fig. 3.8(b)).

On extrapole ensuite ces grandeurs à la limite thermodynamique et on trace leur évolution en fonction de $J_2/|J_1|$ (Fig. 3.9).

On remarque d'abord que les paramètres d'ordre m^∞ et m_ξ^∞ s'extrapolent à une valeur finie dans une large gamme de couplages $J_2/|J_1|$ autour de la région où les spectres exacts ont été calculés : la phase *cuboc* classique résiste aux fluctuations quantiques de grande longueur d'onde dans une gamme finie de couplages. En particulier au point des diagonalisations exactes $J_2/|J_1| = 0.5$ on trouve que m^∞ et m_ξ^∞ sont renormalisés respectivement de 16% et 50% par rapport à leur valeur classique.

Comme $\xi_\Delta \sim m^3$ on s'attend à ce qu'une part importante de la renormalisation $\delta m_\xi^N = 1 - m_\xi^N$ de la chiralité provienne de celle du paramètre d'ordre, *i.e.* $\delta m_\xi^N \sim 3 \delta m^N$, ce dont on peut se convaincre en comparant (3.9), à (3.10) et (3.11).

On note cependant que le deuxième terme de (3.11) est nouveau, *i.e.* il contient les fluctuations propres à la chiralité scalaire. Ces fluctuations ont un effet relativement faible dans l'approximation des ondes de spin : la figure 3.9 montre en effet que $\delta m_\xi^\infty \sim 3 \delta m^\infty$. En particulier lorsque $J_2/|J_1| \sim 3$ l'aimantation dans la base locale est renormalisée d'environ 30% et la chiralité scalaire a disparu.

Sans rien exclure pour le moment, on voit mal comment un état quantique pourrait présenter un ordre à longue portée brisant $SO(3)$ avec les symétries de la phase *cuboc* (puisque l'aimantation dans la base locale est finie) sans pour autant

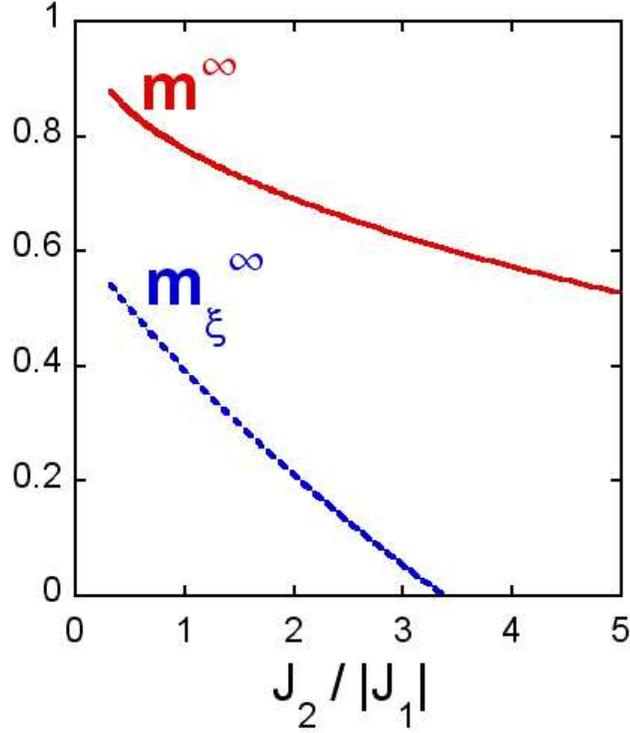


FIG. 3.9 – Valeurs extrapolées de l’aimantation dans le référentiel local m^∞ et de la chiralité scalaire alternée m_ξ^∞ en fonction de $J_2/|J_1|$. e_0^∞ n’est pas représenté.

briser \mathbb{Z}_2 (puisque la chiralité scalaire est nulle). Il est *à priori* plus probable que $J_2/|J_1| \sim 3$ marque la fin de validité de l’approximation des ondes de spin et donc la disparition de la phase *cuboc*.

3.6 Phase gappée pour $J_2/|J_1| = 5.0$

Nous avons remarqué que pour $J_2/|J_1| \gtrsim 3$ la disparition du paramètre d’ordre associé à la brisure \mathbb{Z}_2 signait sans doute la disparition de l’ordre *cuboc* semi-classique et donc l’apparition d’une nouvelle phase.

Il est clair que les diagonalisations exactes ne sont pas le bon outil pour sonder les limites des phases quantiques : si ces dernières sont critiques le cut-off drastique des longueurs d’onde des fluctuations quantiques déplace, ou au moins élargit, les lignes de transition.

On se place donc nettement hors du domaine de validité des ondes de spin, et à

$J_2/|J_1|$ pas trop élevé pour éviter la proximité de la phase J_2 pur ¹².

On présente ci-dessous le spectre $N = 36$ du Hamiltonien pour $J_2/|J_1| = 5.0$ (Fig. 3.10).

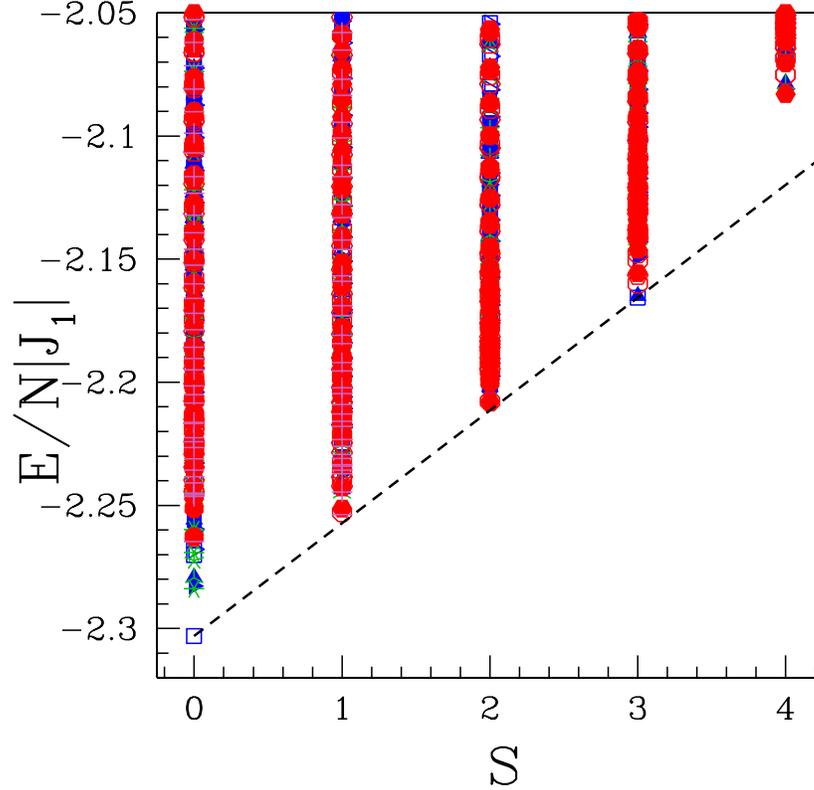


FIG. 3.10 – Spectre de l'échantillon $N = 36$ pour $J_2/|J_1| = 5.0$ en fonction du spin total S . Les couleurs et les symboles des RI suivent la même convention qu'à la figure 3.4.

L'allure générale est très différente de celle du spectre à $J_2/|J_1| = 0.5$. Un grand nombre d'excitations sont adjacentes au fondamental de chaque secteur de spin S , et on ne retrouve plus la tour des états. En particulier la loi d'échelle en $S(S+1)$ disparaît : l'énergie des fondamentaux de spin S croît plutôt linéairement avec S et on a donc un terme linéaire en m dans $e_0(m) = e_0 + \Delta_N m + \mathcal{O}(m^2)$ avec Δ_N le gap de spin pour l'échantillon de taille N .

L'effet de taille sur Δ_N est clairement compatible avec un gap Δ fini à la limite thermodynamique (Fig. 3.11), *i.e.* avec une phase ne brisant pas $SU(2)$ [3].

Une mesure expérimentale directe de Δ est donnée par la courbe d'aimantation : l'échantillon se polarise à partir d'un champ *fini* $B_c = 2(\frac{\partial e_0}{\partial m})_{m \rightarrow 0} \sim \Delta$ qui ferme le gap de spin.

¹²A J_2 pur on retrouve trois réseaux kagomé antiferromagnétiques de pas $\sqrt{3}$ découplés.

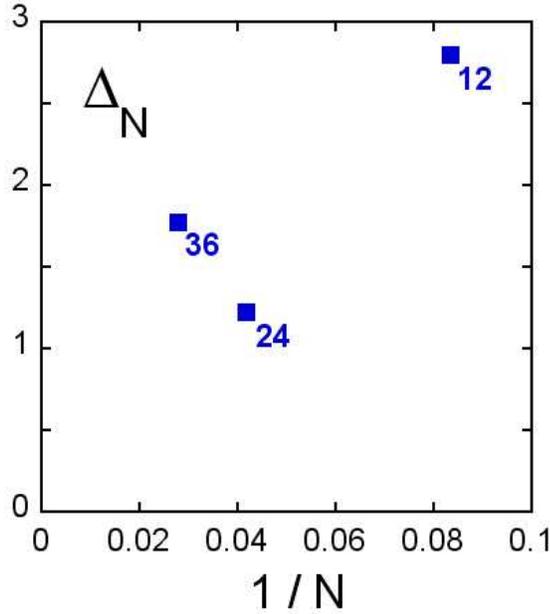


FIG. 3.11 – Effet de taille sur le gap de spin Δ_N à $J_2/|J_1| = 5.0$. L'ouverture d'un gap fini à la limite thermodynamique assure que $SU(2)$ n'est pas brisé pour ces couplages.

Lorsque $J_2/|J_1|$ croît à partir de la phase *cuboc* on prévoit donc au moins une transition de phase quantique, marquant la restauration de la symétrie $SO(3)$, avant de retrouver les trois kagomé découplés dans la limite de J_2 pur.

La taille $N = 36$ est cependant insuffisante pour déterminer la nature de cette phase quantique à $J_2/|J_1| = 5$.

En particulier le fondamental non dégénéré (Fig. 3.10) est problématique : dans le cas d'un liquide RVB on attendrait en effet une dégénérescence 4 sur le tore, provenant de la mise en ordre topologique.

D'autre part la frustration géométrique du réseau ne permet que des VBC de grande maille, de 12 ou 36 spins [86, 74] : on attend un état fondamental $S = 0$ dégénéré à la limite thermodynamique, compatible avec la brisure de symétrie du réseau [59].

La présence éventuelle d'états singulets proches du fondamental et séparés du reste des excitations n'est pas évidente sur la figure 3.10 et des échantillons plus grands sont nécessaires pour conclure.

Bien que les ondes de spin semblent montrer que les fluctuations quantiques désordonnent la chiralité scalaire dans cette gamme de paramètres, on peut envisager que les liquides de spin chiraux soient des candidats pertinents : ces phases quantiques sont en effet invariantes sous $SO(3)$ mais brisent P et T , respectivement la parité et le renversement du temps [94], *i.e.* le spin flip. Ces liquides brisent donc la symétrie chirale, comme la phase *cuboc* semi-classique.

Chapitre 4

Ordre nématique pour des spins 1/2 sur le réseau carré

Dans les états de Néel, le paramètre d'ordre associé à la brisure de $SO(3)$ est vectoriel (Sec. 3.1) : c'est l'aimantation des sous-réseaux. Plus généralement, $SO(3)$ est brisé dès qu'un tenseur non scalaire est ordonné sur le réseau. Pour construire un paramètre d'ordre non-vectoriel on considère le produit tensoriel le plus simple $\langle \hat{S}_i^\alpha \hat{S}_j^\beta \rangle$, qu'on peut toujours décomposer selon

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_i^\alpha \hat{S}_j^\beta \rangle &= \frac{1}{3} \delta^{\alpha\beta} \langle \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \epsilon^{\alpha\beta\gamma} \langle (\hat{\mathbf{S}}_i \wedge \hat{\mathbf{S}}_j)_\gamma \rangle \\ &+ \langle \hat{Q}_{ij}^{\alpha\beta} \rangle \end{aligned} \quad (4.1)$$

où $\hat{Q}_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\hat{S}_i^\alpha \hat{S}_j^\beta + \hat{S}_i^\beta \hat{S}_j^\alpha) - \frac{1}{3} \delta^{\alpha\beta} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$.

Seuls les deux derniers termes ne sont pas scalaires et sont donc susceptibles d'être les paramètres d'ordre associés à une brisure de $SO(3)$.

Lorsque le terme quadrupolaire $\hat{Q}_{ij}^{\alpha\beta}$ est la seule variable ordonnée sur le réseau on obtient un nématique- n : ce type d'ordre peut apparaître en particulier sous l'effet d'interactions biquadratiques $\propto (\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j)^2$ [2]. L'ordre quadrupolaire est responsable des transitions anormales dans les pnictides magnétiques [18, 19], dans lequel les spins $S \geq 5/2$.

Un ordre quadrupolaire pour des spins 1/2 serait relativement exotique. $\hat{Q}_{ij}^{\alpha\beta}$ est en effet un tenseur de rang 2 qui agit dans le sous-espace des spins i et j : pour des spins 1/2, ce sous espace est $D_{1/2} \otimes D_{1/2} = D_0 \oplus D_1$, et le théorème de Wigner-Eckart assure que les seuls éléments de matrice non-nuls de $\hat{Q}_{ij}^{\alpha\beta}$ sont les éléments diagonaux du secteur triplet : l'ordre quadrupolaire ne peut donc exister pour des spins 1/2 que si l'échantillon présente de fortes corrélations ferromagnétiques locales, *i.e.* la physique de basse énergie est décrite en appariant les spins i et j

en triplet : on aurait probablement un Hamiltonien effectif couplant plutôt des spins 1.

En l'absence de fortes corrélations ferromagnétiques on peut imaginer des couplages amenant des spins 1/2 à briser $SO(3)$ avec pour *seul* paramètre d'ordre le deuxième terme de (4.1), *i.e.* le produit vectoriel de deux spins, qui est un tenseur de rang 1 (pseudo-vecteur) : on parle alors de nématique- p [2].

Par contraste, un état de Néel biaxial a de l'ordre dans les produits vectoriels *et* dans les spins, puisque l'aimantation des sous-réseaux est finie : en particulier, dans le cas d'un ordre de Néel biaxial *planaire* les produits vectoriels s'ordonnent perpendiculairement au plan des sous-réseaux.

Dans cette situation l'ordre dans les produits vectoriels (uniaxial) est plus symétrique que l'ordre dans les spins (biaxial) : Chandra et Coleman [15] ont suggéré que dans une certaine gamme de frustration, l'ordre des produits vectoriels pouvait être plus robuste que l'ordre des spins vis à vis des fluctuations quantiques.

Dans un tel scénario, en frustrant de manière croissante un état de Néel biaxial planaire, l'aimantation des sous-réseaux est d'abord tuée *dans* le plan alors que le produit vectoriel reste ordonné : on obtient l'ordre nématique- p uniaxial.

En augmentant encore la frustration on désordonne les spins *hors* du plan et $SO(3)$ est complètement restauré : on obtient une phase quantique pure.

On va voir que cette restauration de $SO(3)$ en deux étapes, en passant par l'ordre nématique- p , est observé avec des spins 1/2 dans le modèle $J - K$ sur le réseau carré, avec K l'échange cyclique à quatre corps : là encore c'est une interaction biquadratique qui stabilise l'ordre nématique.

Two-Step Restoration of $SU(2)$ Symmetry in a Frustrated Quantum Magnet

A. Läuchli,¹ J.C. Domenge,² C. Lhuillier,² P. Sindzingre,² and M. Troyer³

¹ *Institut Romand de Recherche Numérique en Physique des Matériaux (IRRMA), PPH-Ecublens, CH-1015 Lausanne*

² *Laboratoire de Physique Théorique des Liquides, Université P. et M. Curie, case 121, 4 Place Jussieu, 75252 Paris Cedex. UMR 7600 of CNRS*

³ *Institut für Theoretische Physik, ETH Hönggerberg, CH-8093 Zürich, Switzerland*

(Dated: August 5, 2005)

We demonstrate the existence of a spin-nematic, moment-free phase in a quantum four-spin ring exchange model on the square lattice. This unusual quantum state is created by the interplay of frustration and quantum fluctuations which lead to a partial restoration of $SU(2)$ symmetry when going from a four-sublattice orthogonal biaxial Néel order to this exotic uniaxial magnet. A further increase of frustration drives a transition to a fully gapped $SU(2)$ symmetric valence bond crystal.

PACS numbers: 75.10.Jm, 75.40.Mg, 75.40.Cx

Broken symmetries are one of the central paradigms of magnetic ordering, and most antiferromagnetic systems are in Néel phases at low temperatures, characterized by a vectorial order parameter: their sublattice magnetic moment. This order parameter breaks the rotational $SU(2)$ symmetry of the Hamiltonian and is accompanied by gapless excitations, the Goldstone modes of the broken symmetry [1]. In low-dimensional systems of Heisenberg spins frustrating couplings can drive transitions to gapful $SU(2)$ symmetric quantum states, where the building blocks are local singlets (in the simplest examples, pairs of spin-1/2 in short-range singlet states). These quantum gapped phases may have long-ranged singlet order and break spatial symmetries of the lattice, called valence bond crystals (VBC) in the following. An even more exotic groundstate, a coherent superposition of all lattice-coverings by local singlets, a state known as a resonating valence bond (RVB) spin liquid, could also be found [2].

Quantum Phase Transitions (QPT) from Néel ordered phases to quantum gapped phases have been studied for a long time as prototypical examples of quantum phase transitions. The nature of the symmetry breaking Néel phase plays an important role in these scenarios and seems determinant as to whether the adjacent gapped phase will be a VBC or an RVB phase [3]. It was recently shown that the transition from the standard collinear (π, π) Néel state to a Valence Bond Crystal phase can actually be an exotic quantum critical point with deconfined excitations [4].

The well-known (π, π) Néel state is a uniaxial magnet, with two gapless Goldstone modes, in which $SU(2)$ is partially broken to $U(1)$. More complete $SU(2)$ breaking schemes do exist, for example in noncollinear magnets with more than two ferromagnetic sublattices or more generally in helicoidal antiferromagnets. In these systems, the order parameter can be described as biaxial (or as a top), the $SU(2)$ symmetry is completely broken, and there are three Goldstone modes. Chandra and Coleman suggested that in such situations the restoration of

the full $SU(2)$ symmetry due to the interplay of quantum fluctuations and frustration could possibly occur in two steps: from a biaxial magnet via an intermediate uniaxial *spin nematic* magnet – still with gapless excitations – to a fully gapped paramagnetic phase without $SU(2)$ symmetry breaking [5, 6]. This speculated spin-nematic intermediate phase – first introduced by Andreev and Grishchuk [7] – has *no* net magnetic moment, but nevertheless breaks the $SU(2)$ symmetry, as the individual spins – albeit disordered – remain correlated in a plane. Up to now this conjectured two-step scenario misses a concrete realization, as it has not been found in the models originally proposed, e.g. the $J_1 - J_3$ model on the square lattice or various models on the kagome lattice.

In this Letter we present the phase diagram of a frustrated four-spin ring exchange model for $S = 1/2$ on the square lattice. We show that this model has a four-sublattice orthogonal Néel groundstate with a biaxial order parameter. This groundstate maximizes the square of the vectorial chirality, and therefore appears as a natural “unfrustrated” starting point in the following. Increasing the frustration due to a change in the nearest neighbor antiferromagnetic coupling, we provide a first realization of the mechanism speculated by Chandra and Coleman [5]. Based on the analysis of spin-resolved spectra, the transition from a biaxial to a uniaxial magnet – accompanied by the reduction from three Goldstone modes in the biaxial magnet to only two Goldstone modes in the uniaxial one – is highlighted. Upon a further increase in the frustration all spin excitations become gapped and the system enters a (staggered) Valence Bond Crystal phase.

The model Hamiltonian with spin $S = 1/2$ reads:

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + K \sum_{[i,j,k,l]} (P_{i\dots l} + P_{i\dots l}^{-1}). \quad (1)$$

$P_{i\dots l}$ is the cyclic permutation of the 4 spins sitting on a square plaquette, and the two sums run respectively over the nearest neighbor bonds and the plaquettes of the square lattice. We parametrize the couplings by $J =$

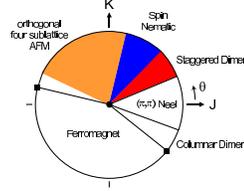


FIG. 1: Schematic phase diagram of the cyclic four-spin exchange Hamiltonian (1) on the square lattice as a function of the parameter θ .

$\cos\theta$ and $K = \sin\theta$. The explicit expression of the 4-spin permutation operators in terms of spin-1/2 operators can be found in Ref. [8].

Interest in the present model has arisen 15 years ago in an early attempt to describe the magnetism of the cuprates [9, 10]. It has been shown very recently to be relevant to describe the high-energy spin waves dispersion of La_2CuO_4 [11]. In this material, the four-spin ring exchange term is significant, but still rather small compared to the usual Heisenberg term [12]. Here we study this model in a broader range of parameters. Recent studies of the Hamiltonian (1) on a two-leg ladder have provided evidence for a number of unconventional phases [13, 14]. Of particular relevance for the present work is the appearance of a short range ordered, gapped phase with dominant *vector chirality* correlations in a large region of the phase diagram.

Our results on the overall phase diagram obtained by large scale exact diagonalizations on systems up to $N = 40$ spins are summarized in Fig. 1. Adjacent to the well established Néel phase around $J = 1$, $K = 0$, we find two VBC phases, a staggered dimer phase for positive K and a columnar dimer phase for negative K . For negative K we further find a large ferromagnetic region. These phases for $K < 0$ are analogous to those observed in a related XY -like model, amenable to Quantum Monte Carlo simulations [15]. The emphasis of the present paper is on three of the phases found for $K > 0$: the coplanar orthogonal antiferromagnet, the spin-nematic state and the staggered dimer VBC. A detailed discussion of the whole phase diagram will be presented in a forthcoming article [16].

The orthogonal four sublattice AFM — Let us start the discussion with a state which has a simple classical interpretation. The cyclic exchange term K contains both four-spin couplings and two-spin exchange terms. For $J = -2$ and $K = 1$ ($\theta \approx 0.85\pi$), we have $J^{\text{eff}} := J + 2K = 0$, i.e. the effective nearest neighbor exchange coupling is vanishing [8]. Classical and semiclassical reasonings then predict an orthogonal four-sublattice AFM [9, 10], as shown in Fig. 2a). A complementary picture can also be obtained by considering the oriented

\mathbf{k}	$\mathcal{R}_{\pi/2}$	σ	(A)	(B)
$(0, 0)$	1	1	✓	✓
$(0, 0)$	-1	1	✓	
(π, π)	1	1	✓	
(π, π)	-1	1	✓	
$(0, \pi), (\pi, 0)$	1	1	✓	✓

TABLE I: Irreducible representations of the square lattice space symmetry group appearing in the tower of states of the orthogonal Néel state (A) and the spin-nematic state (B) respectively. \mathbf{k} denotes the momentum, $\mathcal{R}_{\pi/2}$ the 90° rotation around a site, and σ the site-based reflection along the x or y axis.

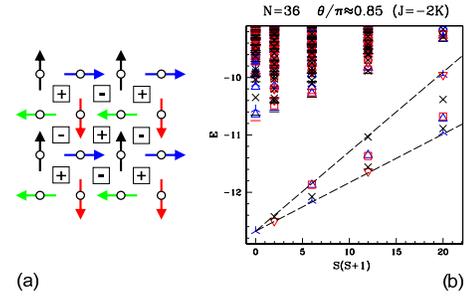


FIG. 2: (a) The orthogonal Néel state. It has a coplanar, four-sublattice structure. The vector chirality on a plaquette possesses a (π, π) structure. (b) Tower of states in the orthogonal four sublattice Néel state for $J = -2$, $K = 1$ ($\theta \approx 0.85\pi$). The eigenstates between the dashed lines belong to the groundstate manifold of the orthogonal Néel state. Taking into account exact degeneracies of some of the states we find $2S+1$ low-lying levels in the spin- S sector, consistent with a complete $SU(2)$ -symmetry breaking order parameter.

sum of the vector chirality on an elementary plaquette:

$$\mathcal{C} = \mathbf{S}_1 \wedge \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_2 \wedge \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_3 \wedge \mathbf{S}_4 + \mathbf{S}_4 \wedge \mathbf{S}_1 \quad (2)$$

One can construct a $SU(2)$ and lattice symmetric Hamiltonian: $\mathcal{H}' = -\sum_i \mathcal{C}_i^2$. Interestingly this Hamiltonian is rather close to our model Eqn. (1) in the region $J = -2$, $K = 1$. Classically it is obvious that a ground-state of \mathcal{H}' is given by the orthogonal Néel structure, as this state maximizes the modulus of the vector chirality Eqn. (2) per plaquette.

We now turn to the fully quantum $S = 1/2$ case, where the presence of the orthogonal Néel state has not yet been verified explicitly. We investigate the ground state with a spectroscopic method, based on the mechanisms of $SU(2)$ symmetry breaking pioneered by Anderson [17]. This numerical approach has been successful in past, e.g. in identifying the coplanar 120° groundstate of the $S = 1/2$ Heisenberg model on the triangular lattice [18]. Based on

a hypothesis of a $SU(2)$ symmetry-breaking order parameter one can systematically determine the expected symmetry properties and degeneracies of the first few levels in the low spin sectors. These levels, which are responsible for the symmetry breaking, should be well separated energetically from the lowest magnon excitations. For the orthogonal Néel order structure at hand we have determined the symmetry sectors which contribute to the groundstate manifold and they are shown in column (A) of Table I. It is easy to verify that these representations are invariant under the lattice symmetry group of the order parameter. Due to the complete $SU(2)$ symmetry breaking we expect $(2S+1)$ spin- S multiplets in the tower of states. One can further predict the multiplicities of the irreducible representations of the lattice group for each spin sector and the numerically determined spectrum ($N = 36$) displayed in Fig. 2b) is in complete agreement with the predictions. We note the clear spectral separation of the states belonging to the groundstate manifold from the spinwaves and higher-lying states. The real-space spin correlations as well as the vector chirality correlations are in perfect agreement with the orthogonal Néel state. We consider this collection of results as solid evidence for the presence of an orthogonal Néel state in this region of the phase diagram.

The spin-nematic phase — The spin-nematic state reached by frustrating the orthogonal Néel state is characterized by the absence of any sublattice magnetic moment $\langle \mathbf{S}_i \rangle = 0$. The state nevertheless breaks $SU(2)$ by virtue of the order parameter defined on nearest neighbor bonds: $\vec{V}(i,j) = \langle \mathbf{S}_i \wedge \mathbf{S}_j \rangle$. Due to the pseudovectorial nature of the order parameter it is called a *p-nematic* state according to Ref. [7]. The pseudovectors $\vec{V}(i,j)$ are collinear and form a uniaxial magnet with a $U(1)$ symmetry. The spatial structure of the order parameter is characterized by a (π, π) staggering of the plaquette-centered vector chirality (2). This can be nicely seen in Fig. 3a), where the order parameter correlations on $N = 40$ sample at $\theta = 0.3\pi$ are shown. While these correlations are also present in the orthogonal Néel state as a consequence of the spin order, they become the primary order parameter in the spin-nematic phase, as the spins themselves are now disordered. The spin-spin correlations are indeed suppressed stronger than the nematic correlations. Stringent information on the presence of the spin-nematic state can again be obtained by inspection of the tower of states. In this particular nematic state the groundstate manifold is expected to exhibit the following features: (i) due to the collinear nature of the order parameter only *one* level per spin S multiplet is allowed. This has to be compared to the orthogonal case where we found a degeneracy of $(2S+1)$ per multiplet. (ii) due to the smaller unit cell and the larger spatial symmetry of the nematic order parameter, fewer representations participate in the symmetry-breaking. The required representations are listed in column (B) of table I. Comparing these predictions with the nu-

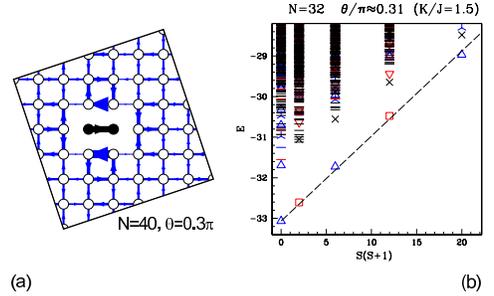


FIG. 3: (a) Real space vector chirality correlations $\langle [\mathbf{S}_0 \wedge \mathbf{S}_1]^x [\mathbf{S}_i \wedge \mathbf{S}_j]^y \rangle$ for a $N = 40$ sample in the spin-nematic phase at $\theta = 0.3\pi$. The black bond denotes the oriented reference bond. The width of the lines is proportional to the correlation strength. (b) Tower of states in the spin-nematic state.

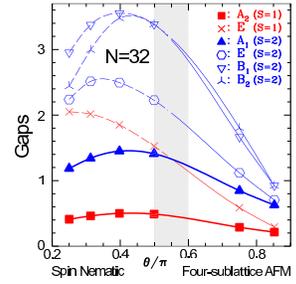


FIG. 4: The evolution of spectral gaps within the QDJS of the orthogonal Néel state. The bold lines denote levels which remain in the QDJS of the spin-nematic state. The other levels detach from the QDJS as $\theta \lesssim \pi/2$.

merical results shown in Fig. 3b), we observe a complete agreement, therefore clearly demonstrating the uniaxial, spin-nematic character of the intermediate phase.

The breakdown of the four-sublattice orthogonal state can be tracked by plotting the relative motion of the different symmetry-breaking levels within the tower of excitations while lowering θ . The energy differences displayed in Fig. 4 show how all but *one* level for each spin sector evaporate once $\theta/\pi \lesssim 0.5$. Since the symmetry group of the orthogonal four-sublattice antiferromagnet is contained in the symmetry group of the spin-nematic state we expect the transition between the two states to be a continuous quantum phase transition.

The staggered dimer VBC phase — Once the nematic state has been destabilized by even stronger frustration we find evidence for a VBC state with a staggered dimer structure. We consistently find an increase of the staggered dimer structure factor for all system sizes consid-

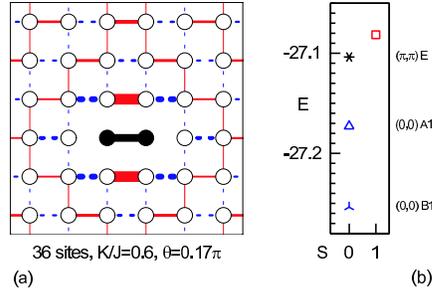


FIG. 5: Staggered Valence Bond Crystal phase: (a) Dimer correlations in the groundstate of a 36 site sample at $\theta \approx 0.17\pi$. Full, red (dashed, blue) lines denote negative (positive) correlations. The line width is proportional to the correlation. (b) Low energy spectrum of a 36 sites sample in the same phase. The required four singlets (the singlet at (π, π) marked with a star is two-fold degenerate) with the correct quantum numbers corresponding to a staggered VBC are found below the first triplet.

ered. The real-space dimer correlations for an $N = 36$ sample are shown in Fig. 5a). These correlations show a clear staggered pattern and they converge to a finite value at the largest distances. Another strong argument in favor of a staggered dimer phase is the presence of 4 singlets which will form the fourfold degenerate groundstate manifold in the thermodynamic limit, as shown in Fig. 5b). We find two distinct singlets at momentum $(0,0)$ and a doubly degenerate singlet at (π, π) . The symmetry properties of these singlets precisely correspond to those expected for a staggered dimer phase. We note that these findings are in line with earlier work which proposed a staggered dimer phase in a cyclic exchange model on the square lattice [10] and recent studies of a two leg ladder [13, 19].

Conclusion- A thorough examination of the low lying spectrum of the ring exchange hamiltonian on the square lattice revealed how a biaxial magnet may be driven to an uniaxial spin-nematic phase through the interplay of frustration and quantum fluctuations. Because of quantum fluctuations the net magnetic moment of the planar orthogonal 4-sublattice state disappears, the spins disorder in the spin plane, the associated Goldstone mode acquires a gap, but nevertheless in a finite range of parameters the plane of spins remains locked. To our knowledge, this is the first clear demonstration of the existence of such a phase in a two-dimensional quantum magnet. At last, increasing again the frustration, $SU(2)$ symmetry is completely restored, a spin gap opens, simultaneously with the collapse in the $S = 0$ sector of the three levels leading to the spatial staggered VBC. This is one realization of the two-step restoration of symmetry speculated some years ago by Chandra and Coleman [5].

In some aspects, such as spin susceptibility and thermodynamic properties, the nematic phase is not different from a standard Néel phase [7]. But the absence of long range order in ordinary spin-spin correlation functions implies that such systems do not display a Bragg peak with unpolarized neutrons. Due to the pseudo-vectorial nature of the order parameter, the NMR pattern of the nematic state is different from that of an ordinary Néel phase (different selection rules), providing a clear experimental signature of this phase. It might, however, be obscured by a phenomenon not addressed in this paper, which is the sensitivity to disorder and impurities: disorder might be able to locally pin the spins in the transverse plane leading to a novel type of spin glass.

We acknowledge very interesting discussions with C. Berthier and G. Misguich and R.R.P. Singh. A.L. acknowledges support by the Swiss National Fund and the CNRS. Computations were performed at the LRZ München, the CSCS Manno and at the IDRIS Orsay.

-
- [1] A. Auerbach, *Interacting electrons and Quantum Magnetism*, Springer Verlag, (1994).
 - [2] G. Misguich and C. Lhuillier, cond-mat/0310405 . Review chapter to appear in the book "Frustrated spin systems", edited by H. T. Diep, World-Scientific (2004).
 - [3] S. Sachdev, Rev. Mod. Phys. 75, 913 (2003); Lect. Notes Phys. **645**, 381 (2004), cond-mat/0401041.
 - [4] T. Senthil *et al.*, Science **303**, 1490 (2004); T. Senthil *et al.*, Phys. Rev. B **70**, 144407 (2004).
 - [5] P. Chandra and P. Coleman, Phys. Rev. Lett. **66**, 100 (1991).
 - [6] A.V. Chubukov, Phys. Rev. B **44**, 5362 (1991).
 - [7] A. F. Andreev and I. A. Grishchuk, Sov. Phys. JETP **60**, 267 (1984).
 - [8] M. Roger, J.H. Hetherington, and J.M. Delrieu, Rev. Mod. Phys. **55**, 1 (1983).
 - [9] M. Roger and J.M. Delrieu, Phys. Rev. B **39**, 2299 (1989); M. Roger and J.H. Hetherington, Phys. Rev. B **41**, 200 (1990).
 - [10] A. Chubukov *et al.*, Phys. Rev. B **45**, 7889 (1992).
 - [11] R. Coldea *et al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5377 (2001); A.A. Katanin and A.P. Kampf, Phys. Rev. B **66**, 100403 (2002); Phys. Rev. B **67**, 100404 (2003); P. Sengupta *et al.*, Phys. Rev. B **66**, 144420 (2002).
 - [12] The ring-exchange Hamiltonian used in fitting the experiments on La_2CuO_4 is somewhat different from our model Hamiltonian. Restricting the comparison to only genuine four-spin terms, $K \approx 1/16J$ in these materials.
 - [13] A. Läuchli *et al.*, Phys. Rev. B **67**, 100409(R) (2003).
 - [14] T. Hikihara *et al.*, Phys. Rev. Lett. **90**, 087204 (2003).
 - [15] A. W. Sandvik *et al.*, Phys. Rev. Lett. **89**, 247201 (2002).
 - [16] A. Läuchli, J.C. Domenge, P. Sindzingre, C. Lhuillier and M. Troyer, to be published.
 - [17] P.W. Anderson, Phys. Rev. **86**, 694 (1952).
 - [18] B. Bernu *et al.*, Phys. Rev. B **50**, 10048 (1994).
 - [19] T. Momoi *et al.*, Phys. Rev. B **67**, 174410 (2003); V. Gritsev *et al.*, Phys. Rev. B **69**, 094431 (2004); P. Lecheminant and K. Totsuka, cond-mat/0405275.

Conclusion

Nous avons rencontré différents scénarios de brisure de symétrie illustrant le rôle joué par les fluctuations thermiques ou quantiques dans les systèmes de spins frustrés.

Le simple modèle de Heisenberg sur le réseau kagomé montre la complexité de cette physique et fait toujours débat.

De manière surprenante, la compétition d'interactions sur ce réseau ne conduit pas nécessairement à des fondamentaux désordonnés exotiques, et dans le diagramme de phase $J_1 - J_2$ le modèle $J_1 > 0$ pur apparaît plutôt comme une singularité : le reste du diagramme est composé essentiellement d'états de Néel, que les spins soient classiques ou quantiques.

En particulier la déstabilisation de l'état ferromagnétique à $J_1 < 0$ par un échange J_2 antiferromagnétique conduit, pour des spins classiques, à un ordre de Néel *cubic* à 12 sous-réseaux, dès que $J_2 \gtrsim |J_1|/3$. Dans ce cas on a vu que, même dans le cas de spins 1/2, les fluctuations quantiques à $T = 0$ habillaient l'ordre classique sans le détruire, et ce tant que $J_2 \lesssim 3|J_1|$.

En augmentant la frustration, l'annulation de la chiralité scalaire dans l'approximation des ondes de spin signale la destruction de l'ordre *cubic* par les fluctuations : les diagonalisations exactes à $J_2 = 5|J_1|$ montrent alors l'apparition d'une phase désordonnée, *i.e.* invariante sous $SO(3)$. Les tailles accessibles sont néanmoins trop petites pour déterminer précisément la nature de cet état.

L'instabilité de l'ordre *cubic* vis à vis des fluctuations thermiques est prédite par le théorème de Mermin-Wagner : l'invariance par rotation est restaurée à toute température $T > 0$.

Cependant la non-coplanarité des 12 sous-réseaux induit une brisure de symétrie chirale, discrète, qui peut survivre aux fluctuations thermiques. Les simulations Monte-Carlo révèlent en effet qu'il subsiste un ordre chiral à température finie alors que l'ordre dans les spins n'est que local.

Bien que la chiralité sépare l'ensemble des configurations fondamentales en deux classes, la transition de restauration de la symétrie chirale est loin d'être une transition critique dans la classe du modèle d'Ising en deux dimensions : elle est faiblement du premier ordre. Le caractère biaxial de l'ordre *cubic* autorise des défauts ponctuels stables, les vortex \mathbb{Z}_2 , qui prolifèrent à la transition chirale : dans une image simple cette prolifération désordonne suffisamment les spins

pour tuer les corrélations chirales à longue distance, et rend compte du caractère discontinu de la transition. De manière générique les états de Néel biaxiaux et non-coplanaires brisent la symétrie chirale et autorisent les vortex \mathbb{Z}_2 : dans ces conditions il est probable que la transition chirale soit toujours du premier ordre. A mesure que le couplage $J_2/|J_1|$ augmente la transition est de plus en plus faiblement du premier ordre : dans le diagramme de phase $T - J_2/|J_1|$ la question de l'existence d'un point critique, ou de deux lignes de transition, une pour les vortex, l'autre pour la chiralité, reste entière.

Dans la région où les fluctuations quantiques ne détruisent pas l'ordre *cuboc*, soit $J_2 \lesssim 3|J_1|$, les diagonalisations exactes montrent la signature claire de la brisure de symétrie chirale à $T = 0$ pour des spins 1/2. Cependant on peut se demander si la brisure de symétrie chirale subsiste à température finie pour des spins 1/2, *i.e.* sous l'effet conjoint des fluctuations quantiques *et* thermiques.

Récemment, dans le modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau carré, un calcul auto-cohérent des fluctuations quantiques, au delà de l'approximation linéaire des ondes de spin, a montré la renormalisation de la température de transition Ising vers une valeur *finie* pour des spin 1/2, environ 10 fois plus petite que la température de transition classique [11]. L'application de cette méthode à l'ordre *cuboc* prolongerait naturellement notre étude de la transition chirale.

En particulier on peut se demander si le pic de basse température dans la chaleur spécifique du composé expérimental Cu-titmb, qui a motivé initialement notre étude, correspond à la transition chirale.

D'autre part, si l'ordre *cuboc* à $J_2 \gtrsim |J_1|/3$ permet de reproduire dans le bon rapport les deux échelles d'énergie mesurées dans Cu-titmb, une validation importante du modèle sera apportée par les mesures de diffraction de neutrons, qui devraient confirmer ou non l'existence de l'ordre à $\mathbf{q} = \mathbf{X}_{1,2,3}$.

Dans la recherche d'états quantiques exotiques, il semble que les interactions d'échange multiple soient un ingrédient crucial pour déstabiliser les états de Néel. Sur le réseau triangulaire, à partir de l'ordre ferromagnétique obtenu pour $J < 0$, c'est le couplage cyclique à 4 corps antiferro $K > 0$ qui mène au liquide RVB.

L'échange à 4 corps semble moins frustrant sur la géométrie du réseau carré : dans le diagramme de phase $J - K$ les phases quantiques révélées par les diagonalisations exactes brisent en effet la symétrie du réseau. La déstabilisation de l'ordre de Néel colinéaire à $J > 0$ mène ainsi aux VBC collonaire ou alterné selon le signe de K ¹.

En revanche le couplage biquadratique à quatre corps stabilise un ordre nématique- p , qui réalise une brisure uniaxiale de $SO(3)$ plus fine, en quelque sorte, que le Néel colinéaire : le produit vectoriel est le premier paramètre d'ordre non-nul, *i.e.* il est d'ordre 2 dans les spins.

¹On remarque cependant que les diagonalisations exactes ne permettent pas d'exclure tout à fait la présence d'un liquide de spin pour $J < 0$ et $K > 0$, dans une région étroite et proche de l'instabilité ferromagnétique, *i.e.* comme pour le triangulaire.

Cet ordre nématique uniaxial apparaît comme une phase intermédiaire dans la restauration de $SO(3)$ à partir de l'ordre de Néel orthogonal, qui brise complètement $SO(3)$, jusqu'au VBC alterné, invariant par rotation : les fluctuations désordonnent d'abord les spins dans le plan avant de restaurer entièrement $SO(3)$.

Cette sélection d'un plan par les fluctuations rappelle le modèle de Heisenberg classique sur le réseau kagomé : les simulations Monte-Carlo montrent en effet la sélection d'un désordre planaire par les fluctuations thermiques [14], associé au paramètre d'ordre quadrupolaire. On se demande évidemment si les fluctuations quantiques sont également capables d'une telle sélection : à notre connaissance ce point reste ouvert puisque les corrélations pertinentes, à 4 spins, n'ont pas été calculées.

Bibliographie

- [1] P.W. Anderson. *Rvb. Mater. Res. Bull.*, 8 :153, 1973.
- [2] A.F. Andreev and I.A. Grishchuk. Spin nematics. *Sov. Phys. JETP*, 60 :267, 1984.
- [3] A. Auerbach. *Interacting electrons and Quantum Magnetism*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1994.
- [4] P. Azaria, B. Delamotte, and D. Mouhanna. Low temperature properties of two dimensional frustrated quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 68 :1762, 1992.
- [5] B. Bernu, P. Lecheminant, C. Lhuillier, and L. Pierre. Exact spectra, spin susceptibilities and order parameter of the quantum heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice. *Phys. Rev. B*, 50 :10048, 1994.
- [6] B. Bernu, C. Lhuillier, and L. Pierre. Signature of neel order in exact spectra of quantum antiferromagnets on finite lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 69 :2590, 1992.
- [7] Kurt Binder. Theory of first-order phase transitions. *rpp*, 50 :783–859, 1987.
- [8] E. Brezin and J. Zinn-Justin. Renormalization of the nonlinear σ model in $2 + \epsilon$ dimensions-application to the heisenberg ferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 36 :691, 1976.
- [9] D. C. Cabra, M. D. Grynberg, P. C. W. Holdsworth, A. Honecker, P. Pujol, J. Richter, D. Schmalfuss, and J. Schulenburg. Quantum kagomé antiferromagnet in a magnetic field : Low-lying non-magnetic excitations versus valence-bond crystal order. *Phys. Rev. B*, 71 :144420, 2005.
- [10] D. C. Cabra, M. D. Grynberg, P. C. W. Holdsworth, and P. Pujol. From classical to quantum kagomé antiferromagnet in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, 65 :094418, 2002.
- [11] L. Capriotti, F. Fubini, T. Roscilde, and V. Tognetti. Ising transition in the two-dimensional quantum j1-j2 heisenberg model. *Phys. Rev. Lett.*, 92 :157202, 2004.
- [12] L. Capriotti and S. Sachdev. Low-temperature broken symmetry phases of spiral antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :257206, 2004.

- [13] J.T. Chalker and J.F.G. Eastmond. Ground-state disorder in the spin 1/2 kagome heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 46 :14201, 1992.
- [14] J.T. Chalker, P. C. W. Holdsworth, and E. F. Shender. Hidden order in a frustrated system : properties of the heisenberg kagome antiferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 68 :855, 1992.
- [15] P. Chandra and P. Coleman. Quantum spin nematics : moment free magnetism. *Phys. Rev. Lett.*, 66 :100, 1991.
- [16] P. Chandra, P. Coleman, and A.I. Larkin. Ising transition in frustrated heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, 64 :88, 1990.
- [17] P. Chandra and B. Doucot. Possible spin-liquid state at large s for the frustrated square heisenberg lattice. *Phys. Rev. B*, 38 :9335, 1988.
- [18] H. H. Chen and P. M. Levy. Quadrupole phase transitions in magnetic solids. *Phys. Rev. Lett.*, 27 :1383, 1971.
- [19] H. H. Chen and P. M. Levy. Structural and magnetic phase transitions in the rare-earth pnictides. *Phys. Rev. Lett.*, 27 :1385, 1971.
- [20] A. Chubukov. Order from disorder in a kagome antiferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 69 :832, 1992.
- [21] A. Chubukov and T. Jolicoeur. Order from disorder phenomena in heisenberg antiferromagnets on a triangular lattice. *Phys. Rev. B*, 46 :11137, 1992.
- [22] Sidney Coleman. There are no goldstone bosons in two dimensions. *Comm. Math. Phys.*, 31 :259–264, 1973.
- [23] J.H.P. Colpa. Diagonalisation of the quadratic boson hamiltonian. *Physica A*, 93 :327–353, 1978.
- [24] J. Von Delft and C. L. Henley. Destructive quantum interference in spin tunneling problems. *Phys. Rev. Lett.*, 69 :3236, 1992.
- [25] Maged Elhajal, Benjamin Canals, and Claudine Lacroix. Symmetry breaking due to dzyaloshinsky-moriya interactions in the kagomé lattice. *Phys. Rev. B*, 66 :014422, 2002.
- [26] V. Elser. Nuclear antiferromagnetism in a registered he3 solid. *Phys. Rev. Lett.*, 62 :2405, 1989.
- [27] N. Elstner and A. P. Young. Spin 1/2 heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice : high temperature expansion and exact diagonalization studies. *Phys. Rev. B*, 50 :6871–6876, 1994.
- [28] Alan M. Ferrenberg and Robert H. Swendsen. New monte carlo technique for studying phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 61 :2635, 1988.
- [29] A. Georges, R. Siddhant, and S. Florens. Dynamical mean field theory of resonating-valence-bond antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 87 :277203, 2001.

- [30] A.B. Harris, C. Kallin, and A.J. Berlinsky. Possible néel orderings of the kagome antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 45(1992) :2899, 1992.
- [31] M. Hasenbusch, A. Pelissetto, and E. Vicari. Transitions and crossover phenomena in fully frustrated xy systems. cond-mat/0111127, 2005.
- [32] C. L. Henley. Order by disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 62 :2056, 1989.
- [33] Kazuo Hida. Magnetization process of the $s=1$ and $1/2$ uniform and distorted kagomé heisenberg antiferromagnets. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 70 :3673, 2001.
- [34] Y. Honda, K. Katsumata, and K. Yamada. The spin gap in a quantum antiferromagnet on the kagomé lattice. *J. Phys. Cond. Matt.*, 14 :L625–L629, 2002.
- [35] D.A. Huse and A.D. Rutenberg. Classical antiferromagnets on a kagome lattice. *Phys. Rev. B*, 45 :7536, 1992.
- [36] H. Kawamura and M. Kikuchi. Free-vortex formation and topological phase transitions of two-dimensional spin systems. *Phys. Rev. B*, 47 :1134, 1993.
- [37] H. Kawamura and S. Miyashita. Phase transition of two-dimensional heisenberg antiferromagnet. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 53 :4138, 1984.
- [38] A. Keren. Dynamical simulation of spins on kagome and square lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 72 :3254–3257, 1994.
- [39] S. Kivelson. Statistics of holons in the quantum dimer hard-core gas. *Phys. Rev. B*, 39 :259–264, 1989.
- [40] John. B. Kogut. An introduction to lattice gauge theory and spin systems. *Rev. Mod. Phys.*, 51 :659, 1979.
- [41] P. Kopietz, P. Scharf, M.S. Skaf, and S. Chakravarty. No title. *Europhys. Lett.*, 9 :465, 1989.
- [42] J. M. Kosterlitz and D.J. Thouless. Metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *J. Phys. C*, 6 :1181, 1973.
- [43] K. Kubo and T. Momoi. Ground state of a spin system with two- and four-spin exchange interactions on the triangular lattice. *Z. Phys. B.*, 103 :485,489, 1997.
- [44] David P. Landau and Kurt Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2000.
- [45] L. Landau and E. Lifschitz. *Mécanique Quantique*. Editions Mir, Moscou, 1967.
- [46] P. Lecheminant, B. Bernu, C. Lhuillier, and L. Pierre. Order by disorder in the j_1 - j_2 model. *Phys. Rev. B*, 52 :6647–6652, 1995.
- [47] P. Lecheminant, B. Bernu, C. Lhuillier, L. Pierre, and P. Sindzingre. Order versus disorder in the quantum heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice using exact spectra analysis. *Phys. Rev. B*, 56 :2521–2529, 1997.

- [48] J. Lee and J. M. Kosterlitz. New numerical method to study phase transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 65 :137, 1990.
- [49] J. Lee and J. M. Kosterlitz. Finite-size scaling and monte carlo simulations of first-order phase transitions. *Phys. Rev. B*, 43 :3265, 1991.
- [50] P.W. Leung and V. Elser. Numerical studies of a 36-site kagome antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 47 :5459–5461, 1993.
- [51] C. Lhuillier and G. Misguich. Frustrated quantum magnets. cond-mat/0109146 - Lecture notes of the School Trends in high magnetic field science (Cargese May 2001) to be published in Springer Series., 2001.
- [52] W. LiMing, G. Misguich, P. Sindzingre, and C. Lhuillier. From néel long range order to spin liquids in the multiple-spin exchange model. *Phys. Rev. B*, 62 :6372, 2000.
- [53] Hong-Ke Liu, Wei-Yin Sun, Wen-Xia Tang, Tetsuo Yamamoto, and Norikazu Ueyama. Self-assembly of the first copper(ii) infinite 2d network with large cavities formed between the two adjacent layers. *Inorg. Chem.*, 38 :6313, 1999.
- [54] P. Locher. Linear spin waves in a frustrated heisenberg model. *Phys. Rev. B*, 41 :2537, 1990.
- [55] J.-M. Lévy-Leblond and F. Balibar. *Quantique : Rudiments*. Masson, 1997. pp76-80.
- [56] M. Mambrini and F. Mila. Rvb description of the low energy singlets of the spin-1/2 kagome antiferromagnet. *Eur. Phys. J. B*, 17 :651,659, 2001.
- [57] N.D. Mermin. The topological theory of defects in ordered media. *Rev. Mod. Phys.*, 51 :591–648, 1979.
- [58] N.D. Mermin and H. Wagner. Absence of ferromagnetism and antiferromagnetism in one and two dimensional isotropic heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, 17 :1133, 1966.
- [59] G. Misguich. Communication privée, 2005.
- [60] G. Misguich, B. Bernu, C. Lhuillier, and C. Waldtmann. Spin liquid in the m.s.e. model on the triangular lattice : Helium three on graphite. *Phys. Rev. Lett.*, 81(5) :1098–1101, 1998.
- [61] G. Misguich, C. Lhuillier, B. Bernu, and C. Waldtmann. The multispin exchange phase diagramm. *Phys. Rev. B*, 60 :1064–1074, 1999.
- [62] G. Misguich, D. Serban, and V. Pasquier. Quantum dimer model on the kagome lattice : Solvable dimer-liquid and ising gauge theory. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :137202, 2002.
- [63] Y. Mizuno, T. Tohyama, S. Maekawa, T. Osafune, N. Motoyama, H. Eisaki, and S. Uchida. Electronic states and magnetic properties of edge-sharing cu-o chains. *Phys. Rev. B*, 57 :5326, 1998.

- [64] R. Moessner and J. T. Chalker. Low temperature properties of classical geometrically frustrated antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 58 :12049–12062, 1998.
- [65] R. Moessner and J. T. Chalker. Properties of a classical spin liquid : The heisenberg pyrochlore antiferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 80 :2929–2932, 1998.
- [66] T. Momoi. Communication privée, 2005.
- [67] T. Momoi, K. Kubo, and K. Niki. Possible chiral phase transition in two-dimensional solid ${}^3\text{He}$. *Phys. Rev. Lett.*, 79 :2081, 1997.
- [68] T. Momoi, H. Sakamoto, and K. Kubo. Magnetization plateau in a two-dimensional multiple-spin exchange model. *Phys. Rev. B*, 59 :9491–9499, 1999.
- [69] T. Mondelli, H. Mutka, C. Payen, B. Frick, and K. H. Andersen. Temperature dependence of the spin dynamics in the strongly frustrated antiferromagnet SrCr_2As_2 (scgo). *Physica B*, 284 :1371, 2000.
- [70] M. Wintel, H.U. Everts, and W. Apel. The heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice : topological excitations. *Europhys. Lett.*, 25 :711–716, 1994.
- [71] M. Wintel, H.U. Everts, and W. Apel. Monte carlo simulation of the heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice : Topological excitations. *Phys. Rev. B*, 52 :13480, 1995.
- [72] T. Nakamura and S. Miyashita. Thermodynamic properties of the quantum heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice. *Phys. Rev. B*, 52 :9174–9177, 1995.
- [73] Y. Narumi, K. Katsumata, Z. Honda, J.-C. Domenge, P. Sindzingre, C. Lhuillier, Y. Shimaoka, T.C. Kobayashi, and K. Kindo. Observation of a transient magnetization plateau in a quantum antiferromagnet on the kagomé lattice. *Europhys. Lett.*, 65 (5) :705–711, 2004.
- [74] P. Nikolic and T. Senthil. Physics of low-energy singlet states of the kagome lattice quantum heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 68 :214415, 2003.
- [75] N. Read and B. Chakraborty. Statistics of the excitation of the resonating valence bond state. *Phys. Rev. B*, 40 :7133–7140, 1989.
- [76] N. Read and S. Sachdev. Large- n expansion for frustrated quantum antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 66 :1773–1776, 1991.
- [77] J.N. Reimers and A.J. Berlinsky. Order by disorder in the classical heisenberg kagome antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 48 :9539–9554, 1993.
- [78] I. Richte, P. Chandra, and P. Coleman. Spin folding in the two-dimensional heisenberg kagome antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 47 :15342, 1993.
- [79] S. Sachdev. Kagome-acute- and triangular-lattice heisenberg antiferromagnets : Ordering from quantum fluctuations and quantum-disordered ground states with unconfined bosonic spinons. *Phys. Rev. B*, 45 :12377–12396, 1991.

- [80] T. Senthil and M.P.A. Fisher. Z₂ gauge theory of electron fractionalization in strongly correlated systems. *Phys. Rev. B*, 62 :7850, 2000.
- [81] T. Senthil and M.P.A. Fisher. Fractionalization in the cuprates : Detecting the topological order. *Phys. Rev. Lett.*, 86 :292, 2001.
- [82] P. Sindzingre, G. Misguich, C. Lhuillier, B. Bernu, L. Pierre, C. Waldtmann, and H.-U. Everts. magnetothermodynamics of the spin-1/2 kagome antiferromagnet. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :2953–2956, 2000.
- [83] R.R.P. Singh and D.A. Huse. Three sublattice order in triangular and kagome-lattice spin-half antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 68 :1766–1769, 1992.
- [84] B.W. Southern and H.-J. Xu. Monte carlo study of the heisenberg antiferromagnet on the triangular lattice. *Phys. Rev. B*, 52 :3836, 1995.
- [85] B.W. Southern and A.P. Young. Spin stiffness in frustrated antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 48 :13170, 1993.
- [86] A.V. Syromyatnikov and S.V. Maleyev. Hidden long-range order in kagomé heisenberg antiferromagnets. *Phys. Rev. B*, 66 :132408, 2002.
- [87] J. Tobochnik and G.V. Chester. Monte carlo study of the planar spin model. *Phys. Rev. B*, 20 :3761, 1979.
- [88] Matthias Troyer. Classical and quantum monte carlo algorithms and exact diagonalization. http://research.yale.edu/boulder/Boulder-2004/ReadingMaterial-2004/QMC_ED.pdf, 2004.
- [89] J. Villain, R. Bidaux, J.P. Carton, and R. Conte. Order by disorder. *J. Phys. Fr.*, 41 :1263, 1980.
- [90] Pascal Viot. Simulation numérique en physique statistique. Cours de DEA : <http://www.lptmc.jussieu.fr/users/viot/coursPViot.html>, 2004.
- [91] Oliver Waldmann. Magnetic molecular wheels and grids - the need for novel concepts in "zero-dimensionnal" magnetism. To be published in *Coord. Chem. Rev.* (2005).
- [92] C. Waldtmann, H.U. Everts, B. Bernu, C. Lhuillier, P. Sindzingre, P. Lecheminant, and L. Pierre. First excitations of the antiferromagnetic heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice. *Eur. Phys. J. B*, 2 :501–507, 1998.
- [93] C. Weber, L. Capriotti, G. Misguich, F. Becca, M. Elhajal, and F. Mila. Ising transition driven by frustration in a 2d classical model with continuous symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 91 :177202, 2003.
- [94] X.G. Wen, F. Wilczek, and A. Zee. Chiral spin states and superconductivity. *Phys. Rev. B*, 39 :11413–11423, 1989.
- [95] C. Zeng and V. Elser. Numerical studies of antiferromagnetism on a kagome net. *Phys. Rev. B*, 42 :8436, 1990.

- [96] C. Zeng and V. Elser. Quantum dimer calculations on the spin 1/2 kagome heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 51 :8318, 1995.
- [97] J. Zinn-Justin. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. International Series of Monographs on Physics, Oxford, clarendon press edition, 1996.

Résumé

A la suite d'expériences récentes menées sur un composé de spins $1/2$ sur le réseau kagomé nous avons étudié le modèle de Heisenberg $J_1 - J_2$, avec un échange J_1 ferromagnétique entre premiers voisins, en compétition avec un échange J_2 antiferromagnétique entre seconds voisins.

Classiquement, le fondamental est un ordre de Néel à 12 sous-réseaux non-coplanaires qui brise complètement la symétrie $O(3)$ du Hamiltonien à $T = 0$. La non-coplanarité du paramètre d'ordre induit une brisure de symétrie chirale qui est restaurée à température finie en même temps que les vortex \mathbb{Z}_2 du problème prolifèrent. La transition chirale est de plus en plus faiblement du premier ordre à mesure que la frustration $J_2/|J_1|$ augmente.

Pour des spins $1/2$ les fluctuations quantiques habillent l'ordre classique sans le détruire, tant que $J_2/|J_1| < 3$. En augmentant encore la frustration les fluctuations restaurent la symétrie $SO(3)$ et on obtient une phase gappée.

D'autre part, sur le réseau carré avec un échange cyclique à quatre corps nous avons obtenu la première signature d'un ordre nématique- p pour des spins $1/2$.

Abstract

Following recent experiments on an $S = 1/2$ antiferromagnet on the kagomé lattice, we investigated the $J_1 - J_2$ Heisenberg model with ferromagnetic J_1 and antiferromagnetic J_2 .

Classically the ground state displays 12-sublattices Néel long-range order which fully breaks the symmetry of the Hamiltonian at $T = 0$. The non-coplanarity of the order parameter induces a chiral symmetry breaking which is restored at finite temperature, together with the proliferation of the relevant \mathbb{Z}_2 vortices. The first order pattern of the chiral transition goes weaker and weaker as the frustration $J_2/|J_1|$ increases.

For spins $1/2$, quantum fluctuations renormalize the classical order without wiping it out, as far as $J_2/|J_1| < 3$. With stronger frustration, quantum fluctuations restore the $SO(3)$ symmetry and one obtains a gapped phase.

We also studied the influence of cyclic four-spins exchange on the square lattice, obtaining the first numerical evidence for a p -nematic order for spins $1/2$.